

## INHALTSVERZEICHNIS

### Schwerpunktprogramm "Dynamische Benetzung flexibler, adaptiver und schaltbarer Oberflächen" (SPP 2171)

GZ	Antragsteller/-in	Ort	Antrag (in Euro)
AL 1705/5-1	Professor Dr. Sebastian Aland	Dresden	181.850
AN 782/14-1	Professor Dr.-Ing. Sergiy Antonyuk	Kaiserslautern	107.600
HA 1993/19-1	Professor Dr.-Ing. Hans Hasse	Kaiserslautern	53.550
LA 3865/2-1	Dr.-Ing. Kai Langenbach	Kaiserslautern	53.550
MU 1370/19-1	Professor Dr.-Ing. Ralf Müller	Kaiserslautern	214.600
AU 321/10-1	Dr. Günter K. Auernhammer	Dresden	172.934
FE 600/32-1	Professor Dr. Andreas Fery	Dresden	18.000
UH 121/3-1	Dr. Petra Uhlmann	Dresden	55.000
BA 5008/5-1	Dr. Ellen Backus	Mainz	211.990
BI 738/9-1	Professor Dr. Markus Biesalski	Darmstadt	225.090
BO 3120/9-1	Privatdozentin Dr. Rodica Borgia	Cottbus	219.000
VA 1159/3-1	Dr. Olga Varlamova	Cottbus	260.400
BR 3749/3-1	Dr. Martin Brinkmann, Ph.D.	Saarbrücken	158.350
BR 4760/5-1	Professor Dr. Björn Braunschweig	Münster	173.685
BU 1556/36-1	Professor Dr. Hans-Jürgen Butt	Mainz	192.270
BU 2711/2-1	Dr. Claus Burkhardt	Reutlingen	97.716
KO 2881/3-1	Privatdozent Dr. Wilfried Konrad	Tübingen	13.120
NE 681/15-1	Professor Dr. Christoph Neinhuis	Dresden	172.650
RO 3250/24-1	Privatdozentin Dr. Anita Roth-Nebelsick	Stuttgart	95.832
CU 346/7-1	Dr. Jiayi Cui	Saarbrücken	159.300
DO 1140/4-1	Professor Dr.-Ing. Edgar Dörsam	Darmstadt	229.530
ER 467/13-1	Professor Dr. Alexey Eremin	Magdeburg	115.454
STA 425/45-1	Professor Dr. Ralf Stannarius	Magdeburg	103.325
GA 736/12-1	Professorin Dr. Tatiana Gambaryan-Roisman	Darmstadt	256.348
GO 995/40-1	Professor Dr. Stanislav N. Gorb	Kiel	202.950
LI 1902/11-1	Professor Dr. Oliver Lieleg	Garching	204.750
ZO 113/28-1	Professor Dr. Cordt Zollfrank	Straubing	210.750
GU 1075/18-1	Professor Dr. Evgeny Gurevich	Bochum	157.850
HU 2264/7-1	Professorin Dr.-Ing. Jeanette Hussong	Bochum	158.050
GU 1455/3-1	Dr. Svetlana Gurevich	Münster	158.725
HE 2570/7-1	Professor Dr. Andreas Heuer	Münster	158.725
HA 2549/23-1	Professor Dr. Rainer Haag	Berlin	189.050
HA 2549/24-1	Professor Dr. Rainer Haag	Berlin	210.100
PA 3092/2-1	Dr. Vivek Pachauri, Ph.D.	Aachen	272.400
HA 2696/46-1	Professor Dr. Steffen Hardt	Darmstadt	253.520
RE 1461/10-1	Professor Dr. Arnold Reusken	Aachen	162.160
HA 4382/11-1	Professor Dr. Jens Harting	Nürnberg	183.350
HA 6306/9-1	Dr. Martin Hager	Jena	132.195
PO 563/43-1	Professor Dr. Jürgen Popp	Jena	131.350
HA 8467/2-1	Dr. Kirsten Harth	Magdeburg	374.445
HE 8451/1-1	Dr. Dorothea Helmer	Freiburg	199.812
HI 1724/4-1	Dr. Michael Hirtz	Eggenstein-Leopoldshafen	183.150
HO 1108/29-1	Professor Dr. Christian Holm	Stuttgart	189.750
HU 850/12-1	Professor Dr. Patrick Huber	Hamburg	173.840
IO 68/15-1	Professor Dr. Leonid Ionov	Bayreuth	223.811
JO 287/13-1	Professor Dr. Rainer Jordan	Dresden	209.470
KA 4747/2-1	Dr. Stefan Karpitschka	Göttingen	204.050
KL 1165/29-1	Professorin Dr. Regine von Klitzing	Darmstadt	204.350
KU 2719/5-1	Dr. Florian Kummer	Darmstadt	251.670
LE 2936/11-1	Privatdozent Dr. Pavel Levkin	Karlsruhe	237.310

LE 3303/4-1	Dr. Gregory Lecrivain, Ph.D.	Dresden	158.043
LO 1986/5-1	Dr. Pierre Lorenz	Leipzig	349.600
ME 5355/1-1	Dr. Stefan Metzger	Erlangen	186.969
MO 2196/6-1	Professor Dr. Gareth Monkman, Ph.D.	Regensburg	193.317
MU 1674/17-1	Professor Dr. Marcus Müller	Göttingen	163.350
TA 259/14-1	Professor Dr. Motomu Tanaka	Heidelberg	218.291
MU 1803/21-1	Professor Dr.-Ing. Frank. A. Müller	Jena	194.550
NA 1436/3-1	Dr. Prapanch Nair	Erlangen	303.800
OE 220/21-1	Professor Dr. Egbert Oesterschulze	Kaiserslautern	204.160
SCHO 1782/1-1	Dr.-Ing. Clarissa Schönecker	Kaiserslautern	232.750
OE 285/6-1	Professor Dr. Martin Oettel	Tübingen	151.100
PE 1782/2-1	Dr. Dirk Peschka	Berlin	225.450
PF 375/6-1	Dr. Thomas Pfohl	Freiburg	215.350
RA 1732/13-1	Professor Dr. Bart Jan Ravoo	Münster	183.350
RE 3228/4-1	Dr. Stefan Reinicke	Potsdam	204.700
RI 529/18-1	Privatdozent Dr. Hans Riegler	Potsdam	167.350
RU 489/37-1	Professor Dr. Jürgen Rühle	Freiburg	325.950
SA 1657/16-1	Professorin Dr. Svetlana Santer	Potsdam	192.950
SCHM 985/22-1	Professorin Dr. Friederike Schmid	Mainz	178.150
VO 639/16-1	Professorin Dr. Doris Vollmer	Mainz	189.650
SE 1118/9-1	Professor Dr. Ralf Seemann	Saarbrücken	200.550
WA 1653/6-1	Professorin Dr. Barbara Agnes Wagner, Ph.D.	Berlin	160.850
SE 2842/2-1	Dr.-Ing. Michael Selzer	Karlsruhe	172.850
SE 3019/1-1	Dr. Marcello Sega	Erlangen	169.650
SN 145/1-1	Professor Dr. Jacobus Snoeijs, Ph.D.	Enschede	199.630
TH 781/12-1	Professor Dr. Uwe Thiele	Münster	174.338
SP 1382/7-1	Professor Dr. Thomas Speck	Mainz	79.975
VI 237/7-1	Dr. Peter Virnau	Mainz	88.175
STA 352/12-1	Professor Dr. Holger Stark	Berlin	161.250
SY 125/9-1	Dr. Alla Synytska	Dresden	203.750
TH 781/11-1	Professor Dr. Uwe Thiele	Münster	527.038
TH 781/13-1	Professor Dr. Uwe Thiele	Münster	175.838
VO 899/25-1	Professor Dr. Axel Voigt	Dresden	225.150

**Antragstyp** Schwerpunktprogramm - Einzelantrag - Neuantrag

**Type of Proposal** Priority Programme - Individual Proposal - New Proposal

**Antragsdauer / Requested Duration** 36 Monate / 36 months

**Fach** Mathematik

**Subject Area** Mathematics

**Rahmenprojekt / Framework Project** SPP 2171

**Titel** **Effiziente Simulationen der Benetzungsdynamik flexibler Substrate**

**Title** **Efficient simulations of dynamic wetting of flexible substrates**

**Geschäftszeichen / Reference No.** **AL 1705/5-1**

**Antragsteller / Applicant** **Professor Dr. Sebastian Aland**  
Hochschule für Technik und Wirtschaft Dresden (FH)  
Fakultät Informatik/Mathematik  
Dresden

**Beantragte Mittel / Budget Request:**

	Beantragt / Requested		
<b>Dauer [Monate] / Duration [Months]</b>	<b>36</b>		
<b>AL 1705/5-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>181.850</b>		
<b>Professor Dr. Sebastian Aland</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>163.100</b>
Doktorandin/Doktorand und Vergleichbare 75 % / Doctoral Researcher or Comparable 75 %	1	36	145.100
Hilfskräfte / Support Staff			18.000
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>18.750</b>
Publikationen / Publications			2.250
Reisen / Travel			16.500

**Bewilligungen der letzten vier Jahre zu anderen Projekten (seit 14.10.2014 ) /**  
**DFG Project Funding Over the Last Four Years (since 14.10.2014):**

<b>Datum / Date</b> <b>Gz / Ref</b>		<b>Euro</b>
--	--	-------------

Datum / Date Gz / Ref		Euro
	<b>Professor Dr. Sebastian Aland</b>	<b>192.200</b>
02.11.2016 AL 1705/3-1	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal Phasenfeldmodelle für biologische Zellen in Strömung / Phase-Field Models for Biological Cells in Flow	192.200

## Zusammenfassung

Die Benetzung elastischer Substrate spielt eine bedeutende Rolle in der Natur und in technologischen Anwendungen. Dennoch ist die Modellierung und Simulation solche Prozesse nach Grundsätzen der Kontinuumsmechanik kaum erforscht. In diesem Projekt entwickeln wir numerische Methoden für die Kopplung von Zweiphasenströmung mit elastischen Substraten. Dazu kombinieren wir das Phasenfeldmodell für bewegte Kontaktlinien mit Methoden der Fluid-Struktur Interaktion auf eine effiziente und robuste Weise.

Mit den entstandenen numerischen Methoden untersuchen wir spannende Phänomene die in Experimenten entdeckt wurden: (i) die stick-slip Bewegung eines flüssigen Tropfens auf einem viskoelastischen Substrat, (ii) die komplizierte Benetzungsdynamik auf strukturierten, elastischen Oberflächen und (iii) die langreichweitige Interaktion flüssiger Tropfen durch ein weiches Substrat (cheerios effect). All diese Punkte werden in Kooperation mit experimentellen und theoretischen Projekten des SPP durchgeführt, um schließlich ein tieferes Verständnis für die grundlegende Physik hinter der Benetzungsdynamik auf elastischen Substraten zu schaffen.

## Summary

Wetting of elastic substrates (i.e. soft wetting) plays a major role in a broad variety of phenomena in nature and technology. Yet, the continuum modeling and simulation of soft wetting has remained essentially unexplored. In this project we develop numerical methods for the coupling of two-phase flow to elastic bodies and substrates. Thereby, we combine phase-field modeling of moving contact lines with efficient methods for fluid-structure interaction to develop an efficient numerical framework to simulate various aspects of soft wetting.

The numerical models are applied to investigate three exciting phenomena that have been discovered in experiments: (i) the stick-slip motion arising from interaction of a liquid drop with a viscoelastic substrate, (ii) the complicated wetting dynamics of elastic structured surfaces, and (iii) the substrate-mediated long range interaction of liquid drops (cheerios effect). All these points are addressed in collaboration with experimental and theoretical projects within the SPP to finally establish a deeper understanding of the fundamental physics behind the dynamic wetting of elastic substrates.

<b>Antragstyp</b>	Schwerpunktprogramm - Einzelantrag - Neuantrag
<b>Type of Proposal</b>	Priority Programme - Individual Proposal - New Proposal
<b>Antragsdauer / Requested Duration</b>	36 Monate / 36 months
<b>Fach</b>	Mechanik
<b>Subject Area</b>	Mechanics
<b>Rahmenprojekt / Framework Project</b>	SPP 2171
<b>Titel</b>	<b>Dynamische Entnetzung: Tropfen auf akustisch aktivierten Oberflächen</b>
<b>Title</b>	<b>Dynamic De-wetting: Droplets on Sonically Switched Surfaces</b>
<b>Geschäftszeichen / Reference No.</b>	<b>AN 782/14-1</b>
<b>Antragsteller / Applicant</b>	<b>Professor Dr.-Ing. Sergiy Antonyuk</b> Technische Universität Kaiserslautern Fachbereich Maschinenbau und Verfahrenstechnik Lehrstuhl für Mechanische Verfahrenstechnik Kaiserslautern
<b>Geschäftszeichen / Reference No.</b>	<b>HA 1993/19-1</b>
<b>Antragsteller / Applicant</b>	<b>Professor Dr.-Ing. Hans Hasse</b> Technische Universität Kaiserslautern Fachbereich Maschinenbau und Verfahrenstechnik Lehrstuhl für Thermodynamik Kaiserslautern
<b>Geschäftszeichen / Reference No.</b>	<b>LA 3865/2-1</b>
<b>Antragsteller / Applicant</b>	<b>Dr.-Ing. Kai Langenbach</b> Technische Universität Kaiserslautern Fachbereich Maschinenbau und Verfahrenstechnik Lehrstuhl für Thermodynamik Kaiserslautern
<b>Geschäftszeichen / Reference No.</b>	<b>MU 1370/19-1</b>
<b>Antragsteller / Applicant</b>	<b>Professor Dr.-Ing. Ralf Müller</b> Technische Universität Kaiserslautern Fachbereich Maschinenbau und Verfahrenstechnik Lehrstuhl für Technische Mechanik Kaiserslautern

**Beantragte Mittel / Budget Request:**

	<b>Beantragt / Requested</b>		
<b>Dauer [Monate] / Duration [Months]</b>	<b>36</b>		
<b>AN 782/14-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>107.600</b>		
<b>Professor Dr.-Ing. Sergiy Antonyuk</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>104.600</b>
Doktorandin/Doktorand und Vergleichbare 50 % / Doctoral Researcher or Comparable 50 %	1	36	96.800
Hilfskräfte / Support Staff			7.800
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>3.000</b>
Geräte bis 10.000 Euro, Software und Verbrauchsmaterial / Equipment up to EUR 10,000, Software and Consumables			1.000
Reisen / Travel			2.000
<b>HA 1993/19-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>53.550</b>		
<b>Professor Dr.-Ing. Hans Hasse</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>52.300</b>
Doktorandin/Doktorand und Vergleichbare 25 % / Doctoral Researcher or Comparable 25 %	1	36	48.400
Hilfskräfte / Support Staff			3.900
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>1.250</b>
Reisen / Travel			1.250
<b>LA 3865/2-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>53.550</b>		
<b>Dr.-Ing. Kai Langenbach</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>52.300</b>
Doktorandin/Doktorand und Vergleichbare 25 % / Doctoral Researcher or Comparable 25 %	1	36	48.400
Hilfskräfte / Support Staff			3.900
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>1.250</b>
Reisen / Travel			1.250
<b>MU 1370/19-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>214.600</b>		
<b>Professor Dr.-Ing. Ralf Müller</b>			

	Anz. / No.	Dauer / Duration	Euro
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>209.100</b>
Doktorandin/Doktorand und Vergleichbare 100 % / Doctoral Researcher or Comparable 100 %	1	36	193.500
Hilfskräfte / Support Staff			15.600
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>5.500</b>
Geräte bis 10.000 Euro, Software und Verbrauchsmaterial / Equipment up to EUR 10,000, Software and Consumables			1.500
Reisen / Travel			4.000
<b>Gesamtsumme / Total</b>			<b>429.300</b>

**Bewilligungen der letzten vier Jahre zu anderen Projekten (seit 14.10.2014 ) / DFG Project Funding Over the Last Four Years (since 14.10.2014):**

Datum / Date Gz / Ref		Euro
	<b>Professor Dr.-Ing. Sergiy Antonyuk</b>	<b>2.028.072</b>
09.10.2018 AN 782/12-1	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal Analyse der Fluidisations- und Scherbedingungen in Rotor-Wirbelschichten im trockenen und feuchten Zustand / Analysis of fluidization and shear conditions in rotary-fluidized beds under dry and wet conditions	277.300
11.09.2018 AN 782/13-1	Internationale Zusammenarbeit: Internationale Kooperationsanbahnung / International Cooperation: Initiation of Int. Collaboration Aufbau einer Forschungsk Kooperation zur nachhaltigen Reduzierung der Nachernteverluste von Lebens- und Futtermitteln in Äthiopien durch geeignete Lager- und Transportmethoden / Establishment of a research cooperation for the sustainable reduction of the post-harvest losses of food and feed in Ethiopia through suitable silo and transport methods	11.150
23.06.2017 AN 782/9-1	Schwerpunktprogramm: Einzelantrag / Priority Programmes: Individual Proposal Mehrdimensionale Fraktionierung feindisperser Partikeln unter Nutzung der Querstromfiltration mit überlagertem elektrischem Feld / Multidimensional fractionation of finely dispersed particles using cross-flow filtration with superimposed electric field	342.854
09.02.2016 AN 782/6-2	Paketantrag: Einzelantrag / Package Proposals: Individual Proposal Charakterisierung der Form und des Agglomeratzustandes disperser Systeme mit einem 3D-Streulichtpartikelsensor / Characterization of shape and state of agglomeration of disperse systems by a 3D Light Scattering Sensor	378.350
01.12.2015 AN 782/4-1	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal Experimentelle und numerische Untersuchung des Strömungsprozesses von Hochdruckwasserstrahlen und ihrer Interaktion mit Bauteiloberflächen / Experimental and numerical investigation of the flow process of high-pressure water jets and their interaction with technical component surfaces	93.518
29.05.2015 INST 248/131-2	Sonderforschungsbereich: Einzelantrag / Collaborative Research Centres: Individual Proposal Strukturierung von Bauteiloberflächen durch Aufbringung feindisperser Partikeln / Surface Structuring by Cold-sprayed Fine Particles	506.400
29.05.2015 INST 248/188-1	Sonderforschungsbereich: Einzelantrag / Collaborative Research Centres: Individual Proposal Dynamische Wechselwirkungen von Partikeln und Tropfen mit strukturierten Bauteiloberflächen / Dynamic Interactions of Particles and Droplets with Structured Component Surfaces	418.500

Datum / Date Gz / Ref		Euro
	<b>Professor Dr.-Ing. Hans Hasse</b>	<b>4.301.517</b>
14.06.2017 HA 1993/18-1	Schwerpunktprogramm: Einzelantrag / Priority Programmes: Individual Proposal Fluidzerstäubung und Verdampfung bei der Nanopartikelsynthese in Sprayflammen / Atomization and Evaporation in Flame Spray Pyrolysis	399.117
23.11.2015 INST 248/214-1	SFB/Transregio: Einzelantrag / CRC/Transregio: Individual Proposal Spin+Chemische Sensorik: Übertragung der Elektronen-Spinpolarisation auf Kernspins zur Steigerung der Sensitivität von NMR Experimenten / Spin+Chemical Sensing: Transfer of angular momentum between electron and nuclear spins for NMR signal enhancement	867.400
01.06.2015 INST 248/193-1	Satellit: Transferprojekt / Satellites: Transfer Project Kryogene Kühlschmierstoffe für die spanende Bearbeitung auf der Basis von Mono-Ethylenglykol / Mono Ethylene Glycol based Cryogenic Lubricants for Cutting Processes	434.300
29.05.2015 INST 248/141-2	Sonderforschungsbereich: Einzelantrag / Collaborative Research Centres: Individual Proposal Zentrale Aufgaben / Central Tasks	1.904.400
29.05.2015 INST 248/123-2	Sonderforschungsbereich: Einzelantrag / Collaborative Research Centres: Individual Proposal Modellierung und Simulation der Benetzung von Bauteiloberflächen / Modeling and Simulation of Wetting of Component Surfaces	696.300
	<b>Dr.-Ing. Kai Langenbach</b>	<b>38.592</b>
01.06.2016 LA 3865/1-1	Forschungsstipendium: Einzelantrag / Research Fellowship: Individual Proposal Dichtefunktional für Moleküle mit nicht-zentralem Dipol auf Basis einer anisotropen Störungstheorie / Density functional theory for molecules with non-central dipole on the basis of an anisotropic perturbation theory	38.592
	<b>Professor Dr.-Ing. Ralf Müller</b>	<b>2.474.725</b>
09.07.2018 MU 1370/18-1	Schwerpunktprogramm: Einzelantrag / Priority Programmes: Individual Proposal solidFIDEMO – Ein Firnverdichtungsmodell für die volumetrische Massenbilanz / solidFIDEMO – a firn densification model for volumetric mass balances	275.150
30.10.2017 MU 1370/11-2	Schwerpunktprogramm: Einzelantrag / Priority Programmes: Individual Proposal Innovative Finite Elemente Modellierung von 3D Rissausbreitung mit einem Phasenfeldansatz / Advanced Finite Element Modelling of 3D Crack Propagation by a Phase Field Approach	139.675
17.08.2015 MU 1370/8-2	Forschergruppe: Einzelantrag / Research Units: Individual Proposal Untersuchung von Größeneffekten in ferroischen Materialien mittels Phasenfeldsimulationen / Investigation of size effects in ferroic materials using phase field simulations	274.100
29.05.2015 INST 248/130-2	Sonderforschungsbereich: Einzelantrag / Collaborative Research Centres: Individual Proposal Gezielte Temperatursteuerung beim Drehen metastabiler Austenite / Systematic Temperature Control when Turning Metastable Austenitic Steels	756.700
29.05.2015 INST 248/127-2	Sonderforschungsbereich: Einzelantrag / Collaborative Research Centres: Individual Proposal Phasenfeldmodellierung von oberflächennahen Umwandlungs- und Versagensmechanismen / Phase Field Modeling of Transformation and Failure Mechanisms in the Vicinity of Surface	332.800
29.05.2015 INST	Sonderforschungsbereich: Einzelantrag / Collaborative Research Centres: Individual Proposal	696.300



Datum / Date Gz / Ref		Euro
248/123-2	Modellierung und Simulation der Benetzung von Bauteiloberflächen / Modeling and Simulation of Wetting of Component Surfaces	

## Zusammenfassung

Ziel des Projektes ist es ein fundamentales Verständnis der komplexen Phänomene, die während des Ablösens von Tropfen von einer vibrierenden Oberfläche auftreten, zu erlangen. Mit dieser Zielsetzung ist das Projekt sehr gut in das SPP 2171 eingebunden. Die Tropfenablösung ist ein wichtiger Entnetzungsprozess. Die schaltbare Aktivierung der Oberfläche wird durch eine gesteuerte Oberflächenbewegung durch z.B. Ultraschallanregung erreicht. Das Ablösen der Tropfen von der Oberfläche kann auf unterschiedliche Arten geschehen, z. B. können sich ein oder mehrere Tropfen ablösen oder, ein Rest des Tropfens verbleibt auf der Oberfläche. Der Prozess wird von eng miteinander wechselwirkenden Faktoren beeinflusst. Diese Faktoren beinhalten u.a. Geometrie, Trägheit, Viskosität und Oberflächenspannung. Weitere Einflussfaktoren sind die Tropfengröße, die Art der Anregung und die Eigenschaften des Fluides und Festkörpersubstrats. In Vorarbeiten haben die Antragsteller eine skalenübergreifende Modellierung, in der molekulardynamische Simulationen und Phasenfeldmethoden thermodynamisch konsistent mittels der Dichtegradiententheorie verknüpft werden, entwickelt. Diese Modellierung wird hier zur systematischen Untersuchung der Tropfenablösung verwendet. Die experimentellen Arbeiten werden mit existierender Laborausstattung durchgeführt, welche durch Hochgeschwindigkeitskameras die Beobachtung der Tropfenablösung von piezoelektrisch angeregten Oberflächen erlaubt. Die Kombination der Erkenntnisse aus diesen Untersuchungen wird verwendet, um ein umfassendes Bild der Tropfenablösung zu erhalten, um die bestimmenden dimensionslosen Zahlen zu identifizieren und um eine quantitative Beschreibung zu entwickeln.

## Summary

The aim of this project is to gain a fundamental physical understanding of the complex phenomena that occur during the detachment of droplets from vibrating surfaces. With this focus, the project is well embedded in SPP 2171: the droplet detachment is an important de-wetting process, the switching of the surface is established here by the control of its movements, e.g. by ultrasonic waves. The project's goal is tackled by a combination of different simulation and experimental methods. The detachment of a droplet from a surface can take place in different ways, e.g. one or more droplets may be ejected, a part of the droplet may remain on the surface or not. The process is governed by different closely interacting effects such as inertia, viscosity, and the surface tensions and influenced by many parameters including geometric ones like the droplet size, the modes of the movement of the surface, and the properties of the fluid and the solid. In a previous collaboration, the applicants have developed a scale-bridging approach, in which molecular dynamic simulations and continuum simulations with the phase field method are consistently coupled using thermodynamic density gradient theory. It will be applied here for systematic studies of the droplet detachment. The experimental work will be carried out with existing equipment in which the detachment of droplets from piezo-electrically excited surfaces is examined using high-speed cameras. The combined knowledge from these studies will be used for establishing a comprehensive picture of the droplet detachment process, identifying the dimensionless numbers that govern it, and for developing quantitative descriptions.

**Bemerkung der  
Geschäftsstelle /  
Comment by the DFG  
Head Office**

Es liegt ein befristeter Arbeitsvertrag vor, der am 02.07.2020 ausläuft.  
The applicant's fixed-term contract will expire on 02.07.2020 .

**Antragstyp** Schwerpunktprogramm - Einzelantrag - Neuantrag

**Type of Proposal** Priority Programme - Individual Proposal - New Proposal

**Antragsdauer / Requested Duration** 36 Monate / 36 months

**Fach** Statistische Physik, Weiche Materie, Biologische Physik, Nichtlineare Dynamik

**Subject Area** Statistical Physics, Soft Matter, Biological Physics, Nonlinear Dynamics

**Rahmenprojekt / Framework Project** SPP 2171

**Titel** **Einfluss von Co-Nonsolvency auf die dynamische Benetzung**

**Title** **Impact of co-nonsolvency effects on dynamic wetting**

**Geschäftszeichen / Reference No.** **AU 321/10-1**

**Antragsteller / Applicant** **Dr. Günter K. Auernhammer**  
Leibniz-Institut für Polymerforschung Dresden e.V.  
Institut Physikalische Chemie und Physik der Polymere  
Dresden

**Geschäftszeichen / Reference No.** **FE 600/32-1**

**Antragsteller / Applicant** **Professor Dr. Andreas Fery**  
Leibniz-Institut für Polymerforschung Dresden e.V.  
Institut Physikalische Chemie und Physik der Polymere  
Dresden

**Geschäftszeichen / Reference No.** **UH 121/3-1**

**Antragstellerin / Applicant** **Dr. Petra Uhlmann**  
Leibniz-Institut für Polymerforschung Dresden e.V. (IPF)  
Dresden

**Beantragte Mittel / Budget Request:**

	Beantragt / Requested		
Dauer [Monate] / Duration [Months]	36		
AU 321/10-1			
Summe / Total [Euro]	172.934		
Dr. Günter K. Auernhammer			
	Anz. / No.	Dauer / Duration	Euro

<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>145.100</b>
Doktorandin/Doktorand und Vergleichbare 75 % / Doctoral Researcher or Comparable 75 %	1	36	145.100
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>27.834</b>
Geräte bis 10.000 Euro, Software und Verbrauchsmaterial / Equipment up to EUR 10,000, Software and Consumables			16.084
Publikationen / Publications			2.250
Reisen / Travel			9.500
<b>FE 600/32-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>			<b>18.000</b>
<b>Professor Dr. Andreas Fery</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>18.000</b>
Hilfskräfte / Support Staff			18.000
<b>UH 121/3-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>			<b>55.000</b>
<b>Dr. Petra Uhlmann</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>47.500</b>
Nichtwiss. Mitarbeiterin/Mitarbeiter 33 % / Non-Academic Staff Member 33 %	1	36	47.500
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>7.500</b>
Geräte bis 10.000 Euro, Software und Verbrauchsmaterial / Equipment up to EUR 10,000, Software and Consumables			7.500
<b>Gesamtsumme / Total</b>			<b>245.934</b>

**Bewilligungen der letzten vier Jahre zu anderen Projekten (seit 15.10.2014 ) /  
DFG Project Funding Over the Last Four Years (since 15.10.2014):**

<b>Datum / Date Gz / Ref</b>		<b>Euro</b>
	<b>Dr. Günter K. Auernhammer</b>	<b>1.673.892</b>
20.12.2017 AU 321/3-3	Schwerpunktprogramm: Einzelantrag / Priority Programmes: Individual Proposal 3D Messung feldinduzierter Deformationen in magnetischen Hybridmaterialien / 3D measurement of field-induced deformations in magnetic hybrid materials	102.992
18.09.2017 AU 321/8-1	Schwerpunktprogramm: Einzelantrag / Priority Programmes: Individual Proposal Interne Dynamik in Modelbetonen: 3D Partikeltrajektorien, Fluss- und Konzentrationsprofile / Internal dynamics in concrete and model systems of concrete: 3D particle tracking, flow and concentration profiles.	238.600
01.06.2016 INST 163/488-1	Sonderforschungsbereich: Einzelantrag / Collaborative Research Centres: Individual Proposal Experimentelle Untersuchungen zur Koaleszenz und zum Aufriss von Tropfen auf festen Oberflächen - Leitkonfiguration Tropfen / Experimental	978.600

Datum / Date Gz / Ref		Euro
	Investigation of Coalescence and Breakup of Droplets on Solid Surfaces - Generic Configuration Sessile Drop	
01.06.2016 INST 163/492-1	Sonderforschungsbereich: Einzelantrag / Collaborative Research Centres: Individual Proposal Fließprofil nahe einer bewegten Dreiphasenkontaktklinie / Flow Velocity Profile near a Moving Three-phase Contact Line	256.500
19.10.2015 AU 321/3-2	Schwerpunktprogramm: Einzelantrag / Priority Programmes: Individual Proposal 3D Messung feldinduzierter Deformationen in magnetischen Hybridmaterialien / 3D measurement of field-induced deformations in magnetic hybrid materials	97.200
	<b>Professor Dr. Andreas Fery</b>	<b>941.650</b>
24.07.2018 FE 600/29-1	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal Selbstassemblierung und Strukturbildung von Spinnenseidenproteinen in (ultra-)dünnen Filmen / Self-assembly und structure formation of spider silk proteins in (ultra-)thin films	194.650
29.11.2017 INST 93/946-1	SFB/Transregio: Einzelantrag / CRC/Transregio: Individual Proposal Entwicklung eines Mikropartikel-Sensorsystems für die Korrelation mechanischer Belastung während der Biofabrikation mit Zellfunktionalität / Development of a micro particle sensor system to establish correlations between mechanical stress and cell functionality during biofabrication	499.600
03.07.2017 FE 600/20-1	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal Faltenbildung in Anisotropen Systemen / The formation of wrinkles in anisotropic systems	208.100
18.01.2017 FE 600/19-1	Internationale Zusammenarbeit: Tagungsförderung / International Cooperation: Conference Funding 15. Europäische Konferenz zu organisierten Filmen (ECOF 15) / 15th European Conference on Organized Films (ECOF 15)	23.100
14.10.2015 FE 600/17-1	Internationale Zusammenarbeit: Tagungsförderung / International Cooperation: Conference Funding 15th Dresden Polymer Discussion: Polymer Materials in the Transition from Responsiveness to Interactivity and Adaptivity / 15th Dresden Polymer Discussion: Polymer Materials in the Transition from Responsiveness to Interactivity and Adaptivity	16.200

## Zusammenfassung

Für eine gute Adaptivität eines Substrats auf äußere Bedingungen ist eine scharfe Antwort des Substrats auf den Stimulus erforderlich. In der vorgeschlagenen Arbeit wollen wir die Veränderungen in der Benetzungsdynamik von Polymerbürsten untersuchen, die Co-Nonsolvency-Effekte zeigen. Der Co-Nonsolvency-Effekt beschreibt das nicht intuitive Phänomen, dass ein Polymer unter Umständen in einer Mischung aus zwei guten Lösungsmitteln unlöslich werden kann. Solche Substrate verändern sich in einem relativ kleinen Bereich der Lösungsmittelzusammensetzung von guten Lösungsmittelbedingungen (gequollener Zustand der Bürste) zu schlechten Lösungsmittelbedingungen (kollabierter Zustand). Aus diesen Änderungen des Quellzustands folgen Änderungen der dynamischen Benetzungseigenschaften.

Die Ziele dieses Projekts sind:

- (a) Untersuchung der Statik und Dynamik der Benetzung von Tropfen, die durch Co-Nonsolvency-Effekte eine Quellung oder einen Kollaps der Bürste hervorrufen
- (b) Eine mögliche Konkurrenz der Lösungsmittelbedingungen zwischen der Gasphase und dem Tropfen oder zwischen zwei Tropfen unterschiedlicher Zusammensetzung zu untersuchen
- (c) Identifikation der wichtigsten Abhängigkeiten und Entwicklung eines

## physikalischen Modells

Um diese Ziele zu erreichen, kombinieren wir verschiedene Strategien.

(a) Untersuchung der Benetzungsdynamik in einem breiten Bereich gut definierter Kontaktliniengeschwindigkeiten (von  $\mu\text{m/s}$  bis zu einigen zehn  $\text{cm/s}$ ).

(b) Kombination der Benetzungsexperimente mit komplementären experimentellen Ansätzen (einschließlich bildgebender und spektroskopischer Ellipsometrie zur Bestimmung der Bürstendicke, AFM-Techniken zur mechanischen Charakterisierung und Partikel-Tracking-Methoden zur Bestimmung von Strömungsprofilen).

(c) Systematische Variation der experimentellen Parameter, wie die Eigenschaften der Bürste (Pfropfdichte, Molekulargewicht, Dicke der Bürste), die Zeitskalen und Kontaktliniengeschwindigkeiten (siehe oben) und die Zusammensetzung der Flüssigkeits- (Tropfen-) und Gasphase.

Bürsten, die Co-Nonsolvency zeigen, haben eine komplexere Antwort auf Lösungsmitteltropfen als normal (quellbare) Bürsten. Wenn die Gasphase im Gleichgewicht mit der flüssigen Phase ist, haben wir eine einstellbare Quellung (durch die Zusammensetzung der Gas- und Flüssigphase) der Bürste. Wenn die Gas- und Flüssigphase unterschiedliche Quellungszustände der Bürste begünstigen, tritt eine Konkurrenz zwischen beiden Effekten auf und die Co-Nonsolvency (und ihre Kinetik) wechselwirkt direkt mit der Dynamik der Benetzung. Die oben erwähnte Kombination experimenteller Methoden erlaubt es uns, die Kinetik und Dynamik des Systems über einen weiten Bereich von Längen- und Zeitskalen zu untersuchen. Insbesondere werden Poly (N-isopropylacrylamid) (PNiPAAm)-Bürsten verwendet, die durch ein Pfropfverfahren hergestellt werden, das ein genau definiertes Molekulargewicht, die richtige Pfropfdichte und die richtige Dicke der Bürstenschicht ermöglicht.

## Summary

For a good responsiveness of a substrate to external conditions, a distinct answer of the substrate to the stimulus is needed. In the proposed work, we want to investigate the changes in the dynamics of wetting of polymer brushes showing co-nonsolvency effects. The co-nonsolvency effect describes the counterintuitive phenomenon that a polymer can under certain circumstances become insoluble in a mixture of two good solvents under certain circumstances. Such substrates change from good solvent conditions (swollen state of the brush) to bad solvent conditions (collapsed state) in a relatively small range of solvent composition. These changes in the swelling state also induce changes in the dynamic wetting properties.

The goals of this project are:

- (a) To study the statics and dynamics of the wetting of drops that induce swelling or collapse of the brush through co-nonsolvency effects
- (b) To investigate a potential competition of the solvent conditions between the gas phase and the drop or between two drops of different composition
- (c) To identify dominating dependencies and develop a physical model

To achieve these goals, we combine various strategies.

(a) Studying the dynamics of wetting in a broad range of well-defined contact lines velocities (from  $\mu\text{m/s}$  to tens of  $\text{cm/s}$ ).

(b) Combination of the wetting experiments with complementary experimental approaches (including imaging and spectroscopic ellipsometry to determine the brush layer thickness, AFM-based techniques for the mechanical characterization, and particle tracking methods to determine flow profiles).

(c) Systematic variations of the experimental parameters, like the properties of the brush (grafting density, molecular weight, brush layer thickness), the time scales and contact lines velocities (see above), and the composition of

the liquid (drop) and gas phase involved in the wetting.

Brushes showing co-nonsolvency exhibit a richer response to solvent drops than normal (swellable) brushes. When the gas phase is in equilibrium to the liquid phase we have a tunable adaptiveness (through the composition of the gas and liquid phase) of the brush. When the gas and liquid phase favor different swelling states of the brush, a competition between both effects occurs and the co-nonsolvency (and its kinetics) interacts directly with the dynamics of wetting. The abovementioned combination of experimental methods will allow us to investigate the kinetics and dynamics of the system over a broad range of length and time scales. Specifically, we will use poly(N-isopropylacrylamide) (PNiPAAm) brushes prepared by a grafting-to method that allows for a well-defined molecular weight, grafting density and brush layer thickness.

**Antragstyp** Schwerpunktprogramm - Einzelantrag - Neuantrag

**Type of Proposal** Priority Programme - Individual Proposal - New Proposal

**Antragsdauer / Requested Duration** 36 Monate / 36 months

**Fach** Physikalische Chemie von Molekülen, Flüssigkeiten und Grenzflächen - Spektroskopie, Kinetik

**Subject Area** Physical Chemistry of Molecules, Interfaces and Liquids - Spectroscopy, Kinetics

**Rahmenprojekt / Framework Project** SPP 2171

**Titel** **Die molekulare Ebene schaltbarer Benetzung**

**Title** **The molecular scale of switchable wetting**

**Geschäftszeichen / Reference No.** **BA 5008/5-1**

**Antragstellerin / Applicant** **Dr. Ellen Backus**  
Max-Planck-Institut für Polymerforschung  
Mainz

**Mitverantwortlicher / Co-Applicant** Professor Dr. Mischa Bonn  
Max-Planck-Institut für Polymerforschung  
Mainz

**Beantragte Mittel / Budget Request:**

	<b>Beantragt / Requested</b>		
<b>Dauer [Monate] / Duration [Months]</b>	<b>36</b>		
<b>BA 5008/5-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>211.990</b>		
<b>Dr. Ellen Backus</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>145.100</b>
Doktorandin/Doktorand und Vergleichbare 75 % / Doctoral Researcher or Comparable 75 %	1	36	145.100
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>66.890</b>
Gäste / Visiting Researchers			1.500
Geräte bis 10.000 Euro, Software und Verbrauchsmaterial / Equipment up to EUR 10,000, Software and Consumables			35.000
Publikationen / Publications			2.250
Reisen / Travel			28.140



**Bewilligungen der letzten vier Jahre zu anderen Projekten (seit 14.10.2014 ) /  
DFG Project Funding Over the Last Four Years (since 14.10.2014):**

Datum / Date Gz / Ref		Euro
	<b>Dr. Ellen Backus</b>	<b>342.450</b>
07.11.2014 BA 5008/3-1	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal Wasserdynamik an Grenzflächen zwischen Luft und ionischen Lösungen: Synergie zwischen SFG-Experimenten und DFTMD-Simulationen / DYNAmics at ionic Water-air INterfaces: Synergy between SFG experiments and DFTMD simulations	342.450

**Zusammenfassung**

Intermolekulare Oberflächenwechselwirkungen bestimmen maßgeblich die Benetzungseigenschaften, an Einblicken in die Benetzung auf der molekularen Ebene mangelte es jedoch bisher. Wir schlagen hier die Verwendung photoschaltbarer Oberflächen, basierend auf Spiropyran/Merocyanin-Isomerisation, zur unmittelbaren Umschaltung der Benetzungseigenschaften einer Oberfläche und der Verfolgung der molekularen Reaktion in Echtzeit vor. In der geschlossenen Spiropyranform ist das Molekül unpolar; die offene Merocyanin-Form ist zwitterionisch. Unter UV-Belichtung erhält man die Merocyanin-Form; sichtbares Licht schaltet das Molekül in die geschlossene Form zurück. Es ist bekannt, dass diese funktionalisierte Oberflächen sich im Fall des Spiropyrans hydrophob, für den der Merocyanin-Form dagegen hydrophil verhalten. Die Möglichkeit die Hydrophobizität dieser Oberflächen mittels ultrakurzer Laserpulse –kürzer als die Zeitskala innerhalb derer Moleküle sich reorientieren– zu schalten bietet uns die einzigartige Möglichkeit, der Reaktion des Wassers auf eine sprungartige Änderung der hydrophoben Oberflächeneigenschaften zu folgen. Unser Ziel ist es auf diese Weise Einblicke in die Dynamik der Be- und Entnetzung schaltbarer Substrate auf molekularer Ebene zu erhalten und mit makroskopischen Benetzungseigenschaften zu korrelieren. Die Struktur des Wassers und die der organischen Oberflächenbeschichtung werden vor, während und nach dem Photoschalten mittels Summenfrequenzspektroskopie (SFG) untersucht. Bei SFG überlappen sich ein infraroter (IR) und ein sichtbarer Laserpuls an der Oberfläche. Ist der IR-puls in Resonanz mit einer Molekülschwingung ist das Signal stark erhöht. Aufgrund seiner Auswahlregeln untersuchen wir mittels SFG-Spektroskopie nur die Grenzflächen ohne Beiträge des Bulk-Wassers. Die Schwingungsfrequenz liefert Informationen über die Stärke Wasserstoffbrückenbindungsnetzwerks, während die Intensität ein Maß für den Grad an Ausrichtung der Wassermoleküle darstellt. Weiterhin können wir Informationen über die Anordnung der Polymere anhand derer C-H-Schwingungen erhalten. Durch die Kombination der SFG-Methode mit einem optischen Puls zur Anstoßung des Übergangs zwischen hydrophober und -philer Oberfläche können wir Informationen zur Dynamik im Sub-Pikosekundenbereich erlangen. Typische Fragen denen wir uns widmen möchten sind:

- Worin bestehen die Unterschiede des Wasserstoffbrückenbindungsnetzwerks und der Wasserorientierung in der hydrophoben und -philen Struktur?
  - Wie schnell schaltet der Photoschalter und wie schnell verändert der Rest des Polymers seine Ordnung und Orientierung?
  - Wie schnell passt sich das Wasser der neuen Situation an?
  - Welche Dynamik besitzt die Kontaktlinienverbreiterung?
- Diese Studie verspricht, beispiellose Einsichten in die

Benetzungseigenschaften auf molekularer Ebene zu liefern und neue Wege, nicht nur für ein besseres fundamentales Verständnis, sondern auch für das Design überlegener aktiver Oberflächen, zu eröffnen.

## Summary

Intermolecular interfacial interactions co-determine macroscopic wetting properties, yet insights into wetting at the molecular level have been lacking. Here, we propose to use photoswitchable surfaces based on spiropyran/merocyanine isomerization to instantaneously switch the surface's wetting properties, and follow the molecular response of water in real-time. In the closed spiropyran form, the molecule is nonpolar, while it is zwitterionic in the open merocyanine form. Under UV light irradiation the merocyanine form is obtained; visible light switches the molecule back to the closed form. It is well-known that surfaces functionalized with the spiropyran/merocyanine pair behave hydrophobic for the spiropyran case, but hydrophilic for the merocyanine form. The ability to switch the hydrophobicity of these surfaces using ultrashort laser pulses – shorter than the timescales on which molecules reorient – provides a unique way to follow the response of water to a step change in the hydrophobic surface properties. In this manner, we aim to obtain molecular-level information about the (de)wetting dynamics at switchable substrates and to correlate molecular-level details on the water organization with macroscopic wetting properties.

The structure of water and the organic coating at the interface will be investigated before, during, and after photoswitching using sum frequency generation (SFG) spectroscopy. In SFG, an infrared laser pulse and a visible laser pulse are overlapped at the interface. If the infrared laser pulse is in resonance with a molecular vibration, the signal is strongly enhanced. Due to its selection rules, SFG probes specifically the interfacial layers and does not see the bulk water. The vibrational frequency provides information about the strength of the hydrogen bond network, while the intensity of the signal is a measure for the amount of water alignment. Furthermore, we can obtain information about the ordering of the polymer from its CH vibrations. By combining the SFG probe method with an optical pulse to initiate the transition between hydrophobic and hydrophilic surface, we can obtain dynamical information on sub-picosecond timescales, to probe the molecular timescales on which the water molecules adapt to the new surface structure. Typical questions we aim to address are:

- What are differences in the hydrogen bond network of water and the water orientation for the hydrophobic and hydrophilic structure?
- How fast does the photoswitch switch and how fast does the rest of the polymer change ordering and orientation?
- How fast does the water adapt to the new situation?
- What is the dynamics of the contact line spreading?

This study will provide unprecedented insights into wetting phenomena at a molecular level, expected to open avenues not only for a better fundamental understanding, but also for designing superior active surfaces.

**Antragstyp** Schwerpunktprogramm - Einzelantrag - Neuantrag

**Type of Proposal** Priority Programme - Individual Proposal - New Proposal

**Antragsdauer / Requested Duration** 36 Monate / 36 months

**Fach** Biomaterialien

**Subject Area** Biomaterials

**Rahmenprojekt / Framework Project** SPP 2171

**Titel** **Untersuchungen zur dynamischen Benetzbarkeit, Quellung und Kapillartransport in Papier**

**Title** **Investigation of dynamic wetting, swelling, and capillary-driven fluid transport in paper**

**Geschäftszeichen / Reference No.** **BI 738/9-1**

**Antragsteller / Applicant** **Professor Dr. Markus Biesalski**  
Technische Universität Darmstadt  
Ernst Berl-Institut  
Fachgebiet Makromolekulare Chemie  
Darmstadt

**Mitverantwortlicher / Co-Applicant** Privatdozent Dr. Tobias Meckel  
Technische Universität Darmstadt  
Fachbereich Biologie  
Arbeitsgruppe Membrane Dynamics  
Darmstadt

**Beantragte Mittel / Budget Request:**

	Beantragt / Requested		
<b>Dauer [Monate] / Duration [Months]</b>	<b>36</b>		
<b>BI 738/9-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>225.090</b>		
<b>Professor Dr. Markus Biesalski</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>154.940</b>
Doktorandin/Doktorand und Vergleichbare 75 % / Doctoral Researcher or Comparable 75 %	1	36	145.100
Hilfskräfte / Support Staff			9.840
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>48.750</b>

Geräte bis 10.000 Euro, Software und Verbrauchsmaterial / Equipment up to EUR 10,000, Software and Consumables			34.500
Publikationen / Publications			2.250
Reisen / Travel			9.000
Sonstiges / Other			3.000
<b>Investitionsmittel / Instrumentation</b>			<b>21.400</b>
High Speed Kamera / High Speed Kamera			21.400

**Bewilligungen der letzten vier Jahre zu anderen Projekten (seit 15.10.2014) /  
DFG Project Funding Over the Last Four Years (since 15.10.2014):**

Datum / Date Gz / Ref		Euro
	<b>Professor Dr. Markus Biesalski</b>	<b>1.022.550</b>
18.07.2018 BI 738/8-1	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal Polymer-modifizierte Papiere - Vermeidung von Sensitivitätsverlusten in papierbasierten analytischen Verfahren. / Polymer modified paper - reducing sensitivity losses in paper-based analytical devices	211.400
16.05.2018 BI 738/7-1	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal Orthogonale Funktionalisierung von Porengrenzflächen in Papiervliesen mittels immobilisierter, thermisch stabiler Peptide / Orthogonal Functionalization of Porous Interfaces in Paper Sheets Through Immobilization of Thermally Stable Peptides	34.800
16.05.2018 BI 738/5-1	Paketantrag: Einzelantrag / Package Proposals: Individual Proposal Thermische und photochemische Vernetzung von Papierfasern zur Erzeugung von nassfesten und multifunktionalen Papieren / Thermal and Photochemical Crosslinking of Paper Fibers for Generation of Paper Substrates Providing a High Wet Strength and Multiple Chemical Functions	292.900
16.05.2018 BI 738/6-1	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal Immobilisierung von ionischen Flüssigkeiten in mikrofluidischen Papieren als Basis für elektrochemische Sensoren / Immobilization of ionic liquids on microfluidic paper as a basis for electrochemical sensors	195.850
01.06.2016 INST 163/491-1	Sonderforschungsbereich: Einzelantrag / Collaborative Research Centres: Individual Proposal Benetzung und Transport auf quellbaren, oberflächenimmobilisierten Polymerbürsten und Polymernetzwerken / Wetting and Transport on Swellable, Immobilized Polymer Brushes and Polymer Networks	287.600

**Zusammenfassung**

Die Wechselwirkung von wässrigen Flüssigkeiten mit Papierfasern spielt eine zentrale Rolle bei der Herstellung, Analyse, Modifikation, Funktionalisierung und Anwendung von Papierprodukten. Ein quantitatives Verständnis der physikalisch-chemischen Prozesse, die die anfängliche Benetzung, die nachfolgende Faserquellung und den Kapillartransport von Wasser auf, innerhalb und zwischen den Fasern eines Papierblattes bestimmen, fehlt jedoch weitestgehend. Insbesondere die hohe Geschwindigkeit der Prozesse, die auf unterschiedlichen Längenskalen ablaufen, stellt gerade für Wissenschaftler eine große Herausforderung dar, insbesondere wenn es um die Analyse der Erfassung dieser dynamischen Prozesse geht. Erschwerend kommt hinzu, dass es bis heute nicht möglich ist, die oben genannten drei Prozesse, Benetzung, Faserquellung und Kapillartransport, in Papier unabhängig voneinander zu bestimmen. Das vorgeschlagene Projekt widmet sich dieser Herausforderung, indem es diese Prozesse durch die Kombination neuer Papieraufnahmestudien mit einem "Spinning Device" und definierten Doppelschichtpapieren in Kombination mit zeitlich und räumlich hochauflösenden

Lichtmikroskopieverfahren besser verstehen will. Im Hinblick auf die Mikroskopieverfahren werden konfokale und suprauflösende Fluoreszenzmikroskopie sowie High-Speed- und Fluoreszenz-Videografie eingesetzt. Besondere Aufmerksamkeit wird zunächst der Untersuchung der Benetzung der Papierfasern mit reinem Wasser gewidmet. Mit Hilfe einer mikrofluidischen Rotationsvorrichtung wird die kapillare Befüllung der Makroporen im Papier zunächst von der Benetzung entkoppelt, indem der Kapillarkraft eine entsprechende Zentrifugalkraft entgegengewirkt. Dieses Setup ermöglicht es, den Einfluss von papierintrinsic (Fasertyp, Porosität usw.) und -extrinsic Parametern (Faservormodifizierung, pH-Wert der wässrigen Lösung, etc.) auf die Benetzung der Fasern unmittelbar an der Imbibitionsfront zu untersuchen. Hierbei wird das Ziel verfolgt besser zu verstehen, welche Rolle die anfängliche Benetzung für den Kapillarfluss in Papieren spielt. In ähnlicher Weise wird das Quellverhalten der Fasern und dessen Einfluss auf die Imbibition untersucht. Abschließend soll ein besseres Verständnis dafür geschaffen werden, wie Benetzung, Quellung und Kapillartransport die mechanischen Eigenschaften von Papieren beeinflussen können. Letzteres wird durch Untersuchung von makroskopisch messbaren Verformungen der Papiere während der Imbibition untersucht. Im Erfolgsfall, wird das Projekt eine umfangreiche Plattform neuartiger und grundlegender Erkenntnisse über die Benetzung von Papierfasern liefern und darüber, wie ein solcher Prozess nachfolgende Prozesse wie die Faserquellung und die kapillare Imbibition bestimmt.

## Summary

The interaction of aqueous fluids with paper fibers plays a central role in the production, analysis, modification, functionalization and application of paper products. However, a quantitative understanding of the physicochemical processes that determine the initial wetting, subsequent fiber swelling, and capillary transport of water on, within, and between the fibers of a paper sheet is still poor. In particular, the high speed of the processes, which run on different length-scales, are still of great challenge for scientists, in particular, if it comes down to the analysis of capturing these interactions. To make the situation even worse, as of today it is still not trivial, to independently determine the abovementioned three processes, wetting, fiber swelling and capillary transport, in paper.

The proposed project addresses this particular point and intends to better understand these processes by combining new paper imbibition studies using a "spinning device" and defined double-layer papers with temporally and spatially high-resolution light microscopy methods.

With regard to the microscopy methods, confocal and super-resolution fluorescence microscopy as well as high-speed and fluorescence videography will be used. Specific attention will first be paid to the detection of the wetting of the paper fibers by pure water. With the help of a microfluidic rotational device, the capillary filling of the macropores in paper will first be decoupled from wetting by counteracting the capillary force with a corresponding centrifugal force. This setting allows to investigate the influence of paper-intrinsic (fiber type, porosity, etc.) and extrinsic parameters (fiber pre-modification, pH of the aqueous solution) on the wetting of the fibers immediately at the forefront of imbibition, in order to better understand the role that initial wetting plays on capillary flow in paper sheets. In a similar fashion, the swelling behavior of the fibers and the influence on imbibition will be investigated. Finally, the project aims for a better understanding how wetting, swelling and capillary transport can affect mechanical properties of paper sheets. The latter will be studied by investigation of macroscopically measurable deformations of the paper webs during imbibition. If successful, the project will provide a large base of novel fundamental insights of wetting of paper fibers, and how such a process will determine subsequent processes such as fiber swelling and capillary imbibition.

**Antragstyp** Schwerpunktprogramm - Einzelantrag - Neuantrag

**Type of Proposal** Priority Programme - Individual Proposal - New Proposal

**Antragsdauer / Requested Duration** 36 Monate / 36 months

**Fach** Statistische Physik, Weiche Materie, Biologische Physik, Nichtlineare Dynamik

**Subject Area** Statistical Physics, Soft Matter, Biological Physics, Nonlinear Dynamics

**Rahmenprojekt / Framework Project** SPP 2171

**Titel** **Schaltbare Tropfen auf den laserstrukturierten Oberflächen**

**Title** **Switchable drops on laser-structured substrates**

**Geschäftszeichen / Reference No.** **BO 3120/9-1**

**Antragstellerin / Applicant** **Privatdozentin Dr. Rodica Borgia**  
Brandenburgische Technische Universität Cottbus - Senftenberg (BTU)  
Institut für Physik  
Fachgebiet Statistische Physik und Nichtlineare Dynamik  
Cottbus

**Geschäftszeichen / Reference No.** **VA 1159/3-1**

**Antragstellerin / Applicant** **Dr. Olga Varlamova**  
Brandenburgische Technische Universität  
Cottbus - Senftenberg  
Fakultät 1: MINT  
Arbeitsgebiet Experimentalphysik/Festkörperphysik  
Cottbus

**Arbeitgeberzusage Statement by Employer** Die Erklärung zur Arbeitgeberfunktion liegt vor.  
A statement regarding employer status has been received.

**Beantragte Mittel / Budget Request:**

	Beantragt / Requested		
Dauer [Monate] / Duration [Months]	36		
BO 3120/9-1			
Summe / Total [Euro]	219.000		
Privatdozentin Dr. Rodica Borgia			
	Anz. / No.	Dauer / Duration	Euro

<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>209.700</b>
Eigene Stelle 100 % / Temporary Position for Principal Investigator 100 %	1	36	209.700
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>9.300</b>
Publikationen / Publications			1.500
Reisen / Travel			7.800
<b>VA 1159/3-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>260.400</b>		
<b>Dr. Olga Varlamova</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>224.100</b>
Eigene Stelle 100 % / Temporary Position for Principal Investigator 100 %	1	36	209.700
Hilfskräfte / Support Staff			14.400
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>36.300</b>
Geräte bis 10.000 Euro, Software und Verbrauchsmaterial / Equipment up to EUR 10,000, Software and Consumables			21.000
Publikationen / Publications			1.500
Reisen / Travel			13.800
<b>Gesamtsumme / Total</b>	<b>479.400</b>		

**Bewilligungen der letzten vier Jahre zu anderen Projekten (seit 11.10.2014 ) /  
DFG Project Funding Over the Last Four Years (since 11.10.2014):**

<b>Datum / Date Gz / Ref</b>		<b>Euro</b>
	<b>Privatdozentin Dr. Rodica Borgia</b>	<b>10.600</b>
15.01.2018 BO 3120/7-1	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal Experimentelle und theoretische Untersuchung von Oberflächenwellen in MS-GWaves Rotationstank, angetrieben durch periodische Anregung / Experimental and Theoretical Study of Surface Waves driven by Periodical Excitation Using the MS-GWaves Rotating Tank	10.600

**Zusammenfassung**

Im Rahmen des Schwerpunktprogramms 2171 –“Dynamic Wetting of Flexible, Adaptive and Switchable Surfaces” – wird das schaltbare dynamische Verhalten flüssiger Tropfen auf Laser-strukturierten Oberflächen in einer Kombination von Experiment, Theorie und numerischer Simulation untersucht. Die Oberfläche leitender, halbleitender und dielektrischer Substrate wird modifiziert durch Femtosekunden-Laser-induzierte periodische Oberflächenstrukturen (LIPSS) mit hierarchischen Strukturgrößen im Nano- bis Mikrometer-Bereich und großflächigen Gradienten. Das dynamische Verhalten von Tropfen polarer Flüssigkeiten (Wasser, Methanol, Ethanol, Propanol) auf derartigen Oberflächen wird sowohl experimentell als auch theoretisch, auf der Basis eines Phase-Field Ansatzes, untersucht, wobei der Schwerpunkt auf der Koaleszenz der Tropfen im Bereich von Gradienten der Benetzbarkeit liegen wird, zum Beispiel Mikro-Kanälen mit unterschiedlicher Benetzbarkeit zur Umgebung. Bei starker Rückkopplung zwischen theoretischer Modellierung und

Experiment sollen die speziellen Bestrahlungsbedingungen für eine optimale Strukturierung ermittelt werden.

Anschließend wird die (reversible) Schaltbarkeit der Benetzbarkeit im System (nanostrukturierte Oberfläche + Tropfen) untersucht, insbesondere durch Temperatur-Variation und -Gradienten, wodurch die Oberflächenspannung der Tropfen und die Adhäsionskräfte zwischen Tropfen und Substrat modifiziert werden können. Auf der anderen Seite werden elektrische und optische Felder eingesetzt, um das Oberflächenpotential des Substrats, und damit das Adhäsionspotential, zu beeinflussen. Auch hier werden die Experimente und die Theoretische Modellierung (Phasenfeldmodellierung) und Simulation in starker gegenseitiger Rückkopplung durchgeführt.

## Summary

In the framework of the Priority Programme 2171 –“Dynamic Wetting of Flexible, Adaptive and Switchable Surfaces” – the switchable dynamics of liquid droplets on laser-structured substrate surfaces will be studied in a combination of experiment, theory, and numerical simulations. The surface of conducting, semiconducting, and dielectric substrates will be conditioned by femtosecond laser induced periodic surface structures (LIPSS) with nano- to micro-scale hierarchical feature size and gradient area coverage. The dynamic behavior of polar liquid droplets (water, methanol, ethanol, and propanol) on such surfaces will be studied both, in experiments and in theory based on a phase field approach, with emphasis on droplet coalescence on gradient wettability surfaces, e.g. micro-channels of different wettability. Under strong feedback between numerical modelling and experiment the specific irradiation conditions for optimized LIPSS will be derived. Subsequently, the (reversible) switching of the system (nanostructured surface + droplet) wettability will be studied, notably by temperature variation and gradients, which will modify the droplet surface tension and substrate-droplet adhesive forces. On the other hand, electric and light fields will be used to modify the substrate surface potential, and thus the adhesive potential. Again, the experiments will be closely complemented by theoretical modelling (phase field modelling) and simulation, allowing strong mutual feedback.



**Antragstyp** Schwerpunktprogramm - Einzelantrag - Neuantrag

**Type of Proposal** Priority Programme - Individual Proposal - New Proposal

**Antragsdauer / Requested Duration** 36 Monate / 36 months

**Fach** Statistische Physik, Weiche Materie, Biologische Physik, Nichtlineare Dynamik

**Subject Area** Statistical Physics, Soft Matter, Biological Physics, Nonlinear Dynamics

**Rahmenprojekt / Framework Project** SPP 2171

**Titel** **Benetzung elastischer Oberflächenstrukturen**

**Title** **Wetting of elastic surface topographies**

**Geschäftszeichen / Reference No.** **BR 3749/3-1**

**Antragsteller / Applicant** **Dr. Martin Brinkmann, Ph.D.**  
Universität des Saarlandes  
Fachrichtung Physik  
Arbeitsgruppe Geometrie fluider Grenzflächen  
Saarbrücken

**Beantragte Mittel / Budget Request:**

	Beantragt / Requested		
<b>Dauer [Monate] / Duration [Months]</b>	<b>36</b>		
<b>BR 3749/3-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>158.350</b>		
<b>Dr. Martin Brinkmann, Ph.D.</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>145.100</b>
Doktorandin/Doktorand und Vergleichbare 75 % / Doctoral Researcher or Comparable 75 %	1	36	145.100
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>13.250</b>
Geräte bis 10.000 Euro, Software und Verbrauchsmaterial / Equipment up to EUR 10,000, Software and Consumables			8.100
Publikationen / Publications			2.250
Reisen / Travel			2.900

**Zusammenfassung** Die Benetzungseigenschaften einer festen Oberfläche werden stark von deren Topographie beeinflusst. Sind diese topographischen Strukturen zudem noch elastisch verformbar, kann die Oberflächenspannung der Flüssigkeit mechanische Instabilitäten auslösen, die die Kondensation oder

das Verdampfen der Flüssigkeit beeinflussen. Im Rahmen dieses Projektes sollen verschiedene dieser elastokapillaren Instabilitäten, sowie die Dynamik des damit einhergehenden Flüssigkeitstransports anhand von einfachen Oberflächenstrukturen untersucht werden. Hierzu sollen Oberflächen betrachtet werden, die mit einem periodischen Struktur aus dünnen Lamellen von wenigen Mikrometern Breite und mehreren zehn Mikrometern Höhe besetzt sind. Das Silikongummi aus dem die Lamellen gefertigt sind, ist entweder Wasser abweisend, kann aber durch eine Oberflächenbehandlung so verändert werden, dass es von Wasser gut benetzt wird. Um die Faktoren zu verstehen, die bei einer Kondensation oder Verdunstung zur Entstehung verschiedener Muster führen, soll die Deformation der Lamellen sowie der Transport des kondensierten Wassers mit einem numerischen Modell aus gekoppelten Gleichungen beschrieben werden, die sowohl die lokale Deformation der Lamellen als auch die Menge der adsorbierten Flüssigkeit beschreiben.

## Summary

The wetting properties of solid surfaces are strongly influenced by their topography. If, in addition, these topographical structures are also elastically deformable, the surface tension of the liquid may trigger certain mechanical instabilities which can influence the condensation or evaporation of a liquid. Within the framework of this project, various of these elastocapillary instabilities as well as the dynamics of the associated liquid transport will be investigated on the basis of simple surface structures. For this purpose, we will conduct wetting experiments with model surfaces that are decorated with a periodic array of thin lamellae. Each of these lamellae is only a few micrometers wide, several tens of microns high, and several millimeters long. The lamellae are made from a silicon rubber that is water-repellent, but which can be rendered wettable by water. In order to understand the factors that lead to the formation of different patterns during condensation or evaporation of a liquid, the deformation of the lamellae as well as the transport of the condensed liquid will be described by a set of two coupled equations. These equations describe the evolution of the deformation of the lamellae and the local amount of adsorbed water.

**Antragstyp** Schwerpunktprogramm - Einzelantrag - Neuantrag

**Type of Proposal** Priority Programme - Individual Proposal - New Proposal

**Antragsdauer / Requested Duration** 36 Monate / 36 months

**Fach** Physikalische Chemie von Molekülen, Flüssigkeiten und Grenzflächen - Spektroskopie, Kinetik

**Subject Area** Physical Chemistry of Molecules, Interfaces and Liquids - Spectroscopy, Kinetics

**Rahmenprojekt / Framework Project** SPP 2171

**Titel** **Struktur-Eigenschafts-Beziehungen und dynamisches Benetzungsverhalten von photo-schaltbaren molekular dünnen organischen Filmen**

**Title** **Structure-Property Relations and Wetting Dynamics of Organic Thin Films with Photo-Switches**

**Geschäftszeichen / Reference No.** **BR 4760/5-1**

**Antragsteller / Applicant** **Professor Dr. Björn Braunschweig**  
Westfälische Wilhelms-Universität Münster  
Institut für Physikalische Chemie  
Münster

**Beantragte Mittel / Budget Request:**

	<b>Beantragt / Requested</b>		
<b>Dauer [Monate] / Duration [Months]</b>	<b>36</b>		
<b>BR 4760/5-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>173.685</b>		
<b>Professor Dr. Björn Braunschweig</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>145.100</b>
Doktorandin/Doktorand und Vergleichbare 75 % / Doctoral Researcher or Comparable 75 %	1	36	145.100
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>28.585</b>
Geräte bis 10.000 Euro, Software und Verbrauchsmaterial / Equipment up to EUR 10,000, Software and Consumables			20.335
Publikationen / Publications			2.250
Reisen / Travel			6.000

**Bewilligungen der letzten vier Jahre zu anderen Projekten (seit 15.10.2014 ) /**

## DFG Project Funding Over the Last Four Years (since 15.10.2014):

Datum / Date Gz / Ref		Euro
	<b>Professor Dr. Björn Braunschweig</b>	<b>339.346</b>
05.07.2018 BR 4760/4-1	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal Spektroskopische Aufklärung des Unterschieds zwischen nanoskaligen und ausgedehnten Öl/Wasser-Grenzflächen: Adsorption und ionenspezifische Effekte von anionischen und kationischen Tensiden / Spectroscopic clarification on the difference between nanosized and extended oil/water interfaces: Surface adsorption and ion specific effects of anionic and cationic surfactants	162.378
21.06.2017 BR 4760/3-1	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal Elektrokatalytische Aktivierung von CO <sub>2</sub> in ionischen Flüssigkeiten / Electrocatalytic Activation of CO <sub>2</sub> in Room-Temperature Ionic Liquids	176.968

### Zusammenfassung

Responsive Oberflächen, welche ihre Benetzungseigenschaften nach Bedarf wechseln können, sind von großem Interesse für selbstreinigende Oberflächen, Mikrofluidik uva. Ein Verständnis des dynamischen Benetzungsverhaltens photo-schaltbarer sowie dünner organische Filme erfordert allerdings ein molekulares Verständnis der relevanten Oberflächen. Da sich die molekulare Struktur der Filme nicht nur durch cis/trans-Photoisomerisierung verändern lässt, sondern sich auch an veränderte chemischen Umgebungen (Flüssigkeit/Gas) adaptiert, müssen die Schichten und deren Dynamik auf verschiedenen Längenskalen charakterisiert werden. Ein Verständnis des dynamischen Benetzungsverhaltens soll in diesem Projekt durch Struktur-Eigenschaft-Beziehungen vom Molekül bis zum makroskopischen Verhalten von benetzenden Tropfen sowie Filmen erreicht werden. Dazu wird nichtlineare optische Spektroskopie eingesetzt, um die relevanten Grenzflächen in situ und zeitaufgelöst zu untersuchen.

### Summary

Smart surfaces that can reversibly change their wetting properties are of great interest for applications such as self-cleaning surfaces, microfluidics or tunable lenses just to mention a few. However, even for passive surfaces that do not change their molecular properties when broad in contact with a liquid, a quantitative description the wetting dynamics is still a challenging issue. That is in particularly true when changes on the molecular scale due to adaptation of the substrate in different chemical environments or due to photo-switching of the substrate need to be taken into account as well. For that reason, we believe that an understanding of the wetting dynamics of photo-switchable substrates requires molecular level information on the substrate dynamics and structure changes under different light conditions as well as different chemical environments. In order to resolve the latter we propose to perform characterizations and analysis on different length scales, where both molecular structure changes as well as mesoscopic and macroscopic properties are addressed and correlated.

### Bemerkung der

### Geschäftsstelle /

### Comment by the DFG

### Head Office

Es liegt ein befristeter Arbeitsvertrag vor, der am 31.12.2019 ausläuft.  
The applicant's fixed-term contract will expire on 31.12.2019 .

**Antragstyp** Schwerpunktprogramm - Einzelantrag - Neuantrag

**Type of Proposal** Priority Programme - Individual Proposal - New Proposal

**Antragsdauer / Requested Duration** 36 Monate / 36 months

**Fach** Statistische Physik, Weiche Materie, Biologische Physik, Nichtlineare Dynamik

**Subject Area** Statistical Physics, Soft Matter, Biological Physics, Nonlinear Dynamics

**Rahmenprojekt / Framework Project** SPP 2171

**Titel** **Dynamische Fortschritt- und Rückzugskontaktwinkel auf adaptiven Oberflächen**

**Title** **Dynamic advancing and receding contact angles of adaptive surfaces**

**Geschäftszeichen / Reference No.** **BU 1556/36-1**

**Antragsteller / Applicant** **Professor Dr. Hans-Jürgen Butt**  
Max-Planck-Institut für Polymerforschung  
Mainz

**Mitverantwortlicher / Co-Applicant** Dr. Rüdiger Berger  
Max-Planck-Institut für Polymerforschung  
Mainz

**Beantragte Mittel / Budget Request:**

	<b>Beantragt / Requested</b>		
<b>Dauer [Monate] / Duration [Months]</b>	<b>36</b>		
<b>BU 1556/36-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>192.270</b>		
<b>Professor Dr. Hans-Jürgen Butt</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>155.180</b>
Doktorandin/Doktorand und Vergleichbare 75 % / Doctoral Researcher or Comparable 75 %	1	36	145.100
Hilfskräfte / Support Staff			10.080
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>37.090</b>
Geräte bis 10.000 Euro, Software und Verbrauchsmaterial / Equipment up to EUR 10,000, Software and Consumables			27.000
Publikationen / Publications			2.250
Reisen / Travel			7.840

**Bewilligungen der letzten vier Jahre zu anderen Projekten (seit 12.10.2014 ) /  
DFG Project Funding Over the Last Four Years (since 12.10.2014):**

Datum / Date Gz / Ref		Euro
	<b>Professor Dr. Hans-Jürgen Butt</b>	<b>519.800</b>
01.06.2016 INST 163/492-1	Sonderforschungsbereich: Einzelantrag / Collaborative Research Centres: Individual Proposal Fließprofil nahe einer bewegten Dreiphasenkontaktklinie / Flow Velocity Profile near a Moving Three-phase Contact Line	256.500
01.06.2016 INST 163/503-1	Sonderforschungsbereich: Einzelantrag / Collaborative Research Centres: Individual Proposal Kondensation von Wasser an superamphiphoben Oberflächen / Condensation of Water on Superamphiphobic Surfaces	263.300

**Zusammenfassung**

Eine der großen Herausforderungen in der Grenzflächenforschung ist ein quantitatives Verständnis adaptiver Oberflächen. Unter „adaptiven“ Oberflächen verstehen wir Oberflächen, deren Struktur sich in Gegenwart der Flüssigkeit oder des Dampfes ändert. Adaptionsprozesse laufen mit einer spezifischen Kinetik ab.

Kürzlich haben wir eine Theorie entwickelt (Langmuir 2018, 34, 11292), die die Adaptionskinetik mit dynamischen Kontaktwinkeln verbindet. Zwei Ergebnisse der Theorie sind: Erstens, die Adaption der Oberfläche führt zur Kontaktwinkelhysterese. Daher sind Adaptionsprozesse, neben Rauigkeit und Heterogenität der Oberfläche, mit verantwortlich für Kontaktwinkelhysterese. Zweitens, Fortschreit- und Rückzugskontaktwinkel ändern sich in klar definierter Weise mit der Geschwindigkeit der Kontaktklinie. Zusätzlich zu hydrodynamischen Effekten sind daher auch Adaptionsprozesse verantwortlich für geschwindigkeitsabhängige Kontaktwinkel.

Ziel unseres Projektes ist es unsere Theorie experimentell zu überprüfen. Dazu ist geplant die dynamischen Kontaktwinkel von sitzenden Tropfen auf Polymeroberflächen zu messen. Dies soll mit Hilfe eines selbst-gebauten Drop Adhesion Force Instrument (DAFI) geschehen. Dabei wird ein Tropfen mit einer Mikropipette über eine Oberfläche bewegt. Die dazu nötige Kraft wird gemessen, gleichzeitig mit den beiden Kontaktwinkeln. Bei dieser Methode ist der Geschwindigkeit auf maximal 5 cm/s beschränkt. Daher möchten wir die DAFI-Methode mit einem weiteren Aufbau ergänzen, der es erlaubt, rollende Tropfen auf einer schiefen Ebene zu untersuchen. Dieser Versuchsaufbau soll mit Hochgeschwindigkeitskameras ausgestattet werden. Damit ließen sich dynamische Kontaktwinkel bis zu einer Tropfengeschwindigkeit von 1 m/s messen.

Als Modelloberflächen verwenden wir Siliziumoxid-Oberflächen, auf die Polymere gepfropft sind. Zur Herstellung von Polymerbürsten unterschiedlicher Dicke verwenden wir Atom-Transfer-Radikal-Polymerisation (ATRP). Zur Untersuchung der Adaptionsprozesse, die von polaren Flüssigkeiten hervorgerufen werden, werden wir Poly-N-Isopropylacrylamid (PNIPAM) und Poly(2-Hydroxyethylmethacrylate) (PHEMA) verwenden. Polymethyl-methacrylat (PMMA) und Polystyrol (PS) Filme planen wir in Kombination mit unpolaren Flüssigkeiten zu verwenden. Als Oberflächen die nicht nur quellen, sondern sich umorganisieren ist beabsichtigt, gemischten Polymerbürsten, bestehend aus PS und Poly(2-Vinylpyridine), zu untersuchen. Die jeweilige Quell- und Umorganisationskinetik bei Kontakt mit Flüssigkeiten, soll mittels

Röntgenreflektometrie, Oberflächenplasmon-Spektroskopie und konfokaler Mikroskopie bestimmen.

Bei Erfolg stünde ein relativ universelles Modell zur Verfügung, Adaptionsverursachte dynamische Kontaktwinkel und Kontaktwinkelhysterese zu beschreiben. Adaption von Oberfläche wäre damit als ein weiterer Grund für Kontaktwinkelhysterese etabliert, neben z.B. Oberflächenrauigkeit oder –heterogenität.

## Summary

One of the big challenges in surface science is to quantitatively understand dynamic contact angles of adaptive surfaces. Here, we are concerned with surfaces, which spontaneously change in the presence of the liquid or its vapor.

In our recently developed theory (Langmuir 2018, 34, 11292), we related the kinetics of adaptation processes to dynamic contact angles. One result of the theory is that adaptation has two important consequences: (a) it leads to contact angle hysteresis and (b) advancing and receding contact angles become velocity dependent. Therefore, surface adaptation can be established as one cause for contact angle hysteresis (in addition to e.g. roughness and heterogeneity) and for changing dynamic contact angles (in addition to e.g. hydrodynamics). Adaptation may in particular explain the observed changes in contact angle at very low speed of the contact line.

The aim of our project is to test the theory. To reach this aim, we plan to measure the kinetics of the adaptation process for thin polymer films. With the kinetics and our adaption theory, we can calculate the dynamic advancing and receding contact angles. Finally, the predicted dynamic contact angles will be compared with the velocity-dependent contact angles of moving drops measured on the same polymer films.

To measure advancing and receding contact angle versus speed of the contact line we will use our home built Drop Adhesion Force Instrument (DAFI). In DAFI, sessile drops are moved across surfaces at defined velocity by a wire and the advancing and receding contact angles are measured optically in parallel with the force. Since DAFI is limited to velocities < 5 cm/s we plan to build up a tilted plane setup with cameras to monitor the dynamic contact angles of moving drops at velocities up to 1 m/s.

As model systems, we plan to use silicon oxide surfaces coated with different polymer brush films. Surface-initiated atom-transfer radical polymerization will be used to synthesize the polymer films. For polar liquids, we will use poly(N-isopropylacrylamide (PNIPAM) and poly(2-hydroxyethyl methacrylate) (PHEMA). For non-polar liquids, we plan to synthesize polymethyl-methacrylate (PMMA) and polystyrene (PS) brushes. Binary brush films made from PS and poly(2-vinylpyridine) (PVP) will be investigated, too, as one example of a more complex adaptation. The swelling kinetics and (re)organizations of molecules upon exposure to solvents will be investigated by X-ray reflectometry, surface plasmon resonance (SPR) and laser scanning confocal microscopy.

In case we can validate our theory, the measurement of the velocity dependence of the dynamic contact angles will allow calculating the adaption kinetics of surfaces. If successful, we would have a relatively universal framework for quantitative modeling of dynamic contact angles and contact angle hysteresis caused by adaptation processes.

<b>Antragstyp</b>	Schwerpunktprogramm - Einzelantrag - Neuantrag
<b>Type of Proposal</b>	Priority Programme - Individual Proposal - New Proposal
<b>Antragsdauer / Requested Duration</b>	36 Monate / 36 months
<b>Fach</b>	Bioinformatik und Theoretische Biologie
<b>Subject Area</b>	Bioinformatics and Theoretical Biology
<b>Rahmenprojekt / Framework Project</b>	SPP 2171
<b>Titel</b>	<b>Grenzflächenprozesse an pflanzlichen inneren Oberflächen: Dynamische Wechselwirkungen zwischen Mikroblasen und flexiblen Fasergebilden</b>
<b>Title</b>	<b>Interfacial processes at plant internal surfaces: microbubble dynamics at flexible fibril networks</b>
<b>Geschäftszeichen / Reference No.</b>	<b>BU 2711/2-1</b>
<b>Antragsteller / Applicant</b>	<b>Dr. Claus Burkhardt</b> NMI Naturwissenschaftliches und Medizinisches Institut an der Universität Tübingen Reutlingen
<b>Geschäftszeichen / Reference No.</b>	<b>KO 2881/3-1</b>
<b>Antragsteller / Applicant</b>	<b>Privatdozent Dr. Wilfried Konrad</b> Eberhard Karls Universität Tübingen Fachbereich Geowissenschaften Invertebraten Paläontologie Tübingen
<b>Geschäftszeichen / Reference No.</b>	<b>NE 681/15-1</b>
<b>Antragsteller / Applicant</b>	<b>Professor Dr. Christoph Neinhuis</b> Technische Universität Dresden Institut für Botanik Dresden
<b>Geschäftszeichen / Reference No.</b>	<b>RO 3250/24-1</b>
<b>Antragstellerin / Applicant</b>	<b>Privatdozentin Dr. Anita Roth-Nebelsick</b> Staatliches Museum für Naturkunde Stuttgart - Zentrum für Biodiversitätsforschung Stuttgart



**Kooperations-  
partnerinnen und  
Kooperations-  
partner /  
Cooperation  
Partners**

Dr. Dagmar Voigt  
Technische Universität Dresden  
Institut für Botanik  
Dresden

**Beantragte Mittel / Budget Request:**

	<b>Beantragt / Requested</b>		
<b>Dauer [Monate] / Duration [Months]</b>	<b>36</b>		
<b>BU 2711/2-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>97.716</b>		
<b>Dr. Claus Burkhardt</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>82.176</b>
Doktorandin/Doktorand und Vergleichbare 37 % / Doctoral Researcher or Comparable 37 %	1	36	71.600
Hilfskräfte / Support Staff			10.576
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>15.540</b>
Reisen / Travel			6.340
Sonstiges / Other			9.200
<b>KO 2881/3-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>13.120</b>		
<b>Privatdozent Dr. Wilfried Konrad</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>13.120</b>
Geräte bis 10.000 Euro, Software und Verbrauchsmaterial / Equipment up to EUR 10,000, Software and Consumables			5.400
Reisen / Travel			7.720
<b>NE 681/15-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>172.650</b>		
<b>Professor Dr. Christoph Neinhuis</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>164.930</b>
Doktorandin/Doktorand und Vergleichbare 75 % / Doctoral Researcher or Comparable 75 %	1	36	145.100
Hilfskräfte / Support Staff			19.830
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>7.720</b>
Reisen / Travel			7.720
<b>RO 3250/24-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>95.832</b>		

Privatdozentin Dr. Anita Roth-Nebelsick			
	Anz. / No.	Dauer / Duration	Euro
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>81.432</b>
Doktorandin/Doktorand und Vergleichbare 38 % / Doctoral Researcher or Comparable 38 %	1	36	73.500
Hilfskräfte / Support Staff			7.932
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>14.400</b>
Geräte bis 10.000 Euro, Software und Verbrauchsmaterial / Equipment up to EUR 10,000, Software and Consumables			5.300
Reisen / Travel			9.100
<b>Gesamtsumme / Total</b>			<b>379.318</b>

**Bewilligungen der letzten vier Jahre zu anderen Projekten (seit 15.10.2014 ) / DFG Project Funding Over the Last Four Years (since 15.10.2014):**

Datum / Date Gz / Ref		Euro
	<b>Privatdozentin Dr. Anita Roth-Nebelsick</b>	<b>146.800</b>
06.06.2018 INST 41/907-2	SFB/Transregio: Einzelantrag / CRC/Transregio: Individual Proposal Modellierung und Simulation poröser pflanzlicher Gewebe unter Frost- und Kondensierung / Experimental-based modelling and simulation of porous plant tissues under frost and condensation conditions	106.900
06.06.2018 INST 41/923-2	SFB/Transregio: Öffentlichkeitsarbeit / CRC/Transregio: Public Relations Projekt Öffentlichkeitsarbeit / Public relations project	39.900

**Zusammenfassung**

Der Wassertransport in Pflanzen wird durch Verdunstung an den Blättern angetrieben. Das Wasser wird daher nicht aufwärts „gepumpt“ sondern nach oben „gezogen“. Dadurch entsteht ein negativer Druck in den Leitbahnen: das Wasser befindet sich unter Zugspannung und daher in einem (thermodynamisch) metastabilen Zustand. Zur Vermeidung von Blockaden durch Embolie existieren Mechanismen, die auf Interaktionen zwischen Gasblasen, Wasser und flexiblen Strukturen der Leitbahnen basieren. Die Leitbahnen werden von toten Zellen gebildet und weisen typischerweise einen Durchmesser von etwa 20 – 250 µm auf, sowie Längen von einigen Zentimetern bis in den Meterbereich. Verbunden sind die Leitbahnen durch spezielle Poren, sog. Tüpfel, die für den Erhalt der Funktionalität der Leitbahnen eine entscheidende Rolle spielen. Die Tüpfel weisen eine spezielle Struktur auf, u.a. eine nanoporöse flexible Tüpfelmembran, durch die der Wasseraustausch zwischen benachbarten Gefäßen erfolgt. Diese Tüpfelmembran interagiert in dynamischer Weise mit Mikroblasen. Ziel dieses Projektes ist es, die Grenzflächenprozesse an dieser Membran zu analysieren, die in entscheidender Weise an der Funktionalität dieses einzigartigen biologischen Transportmechanismus beteiligt sind, und für den es bis jetzt kein technisches Äquivalent gibt. Insbesondere sollen die Flexibilität des Tüpfelapparates und seine Bedeutung für die Grenzflächeninteraktionen im Fokus stehen. Kombiniert werden theoretische Ansätze aus der Differentialgeometrie und Visko-Elastizität mit experimentellen Untersuchungen, um relevante Details der Tüpfelstruktur zu klären. Hierfür werden u.a. eine Kombination von Cryo-SEM (Cryo-Scanning

Electron Microscopy) und focused ion beam (FIB) angewendet werden. Das Projekt verfolgt zwei Ziele: 1) Eine detaillierte Analyse der 3-Phasen-Interaktionen (2 Fluide – Gas und Wasser – die Grenzflächen mit flexiblen Komponenten des Tüpfelapparates bilden). 2) Es soll ein entscheidender Beitrag zum Verständnis der physikalischen Grundlagen dieses speziellen Transportmechanismus geleistet werden, mit Relevanz über die Biologie hinaus.

## Summary

Water transport in plants is based on the gradient of chemical potential caused by the transpirational water loss at the leaves: water is thus not “pumped” but rather “pulled” upwards. Accordingly, the water inside the conduits is under tension, i.e. negative pressure. Land plants therefore rely on a water transport principle, which causes the water to be in a (thermodynamically) metastable state.

To avoid and/or repair embolism (blockage by gas bubbles), various mechanisms exist which comprise interactions between gas bubbles, water and flexible conduit wall structures. The conduits for water transport consist of dead cells showing typical diameters of about 20-250  $\mu\text{m}$  and lengths varying from a few centimeters to some meters. The conduits are interconnected by pores of a few micrometers in diameter, termed pits which show a characteristic structure, being similar to two funnels put together at their wide ends and separated by a pit membrane. The pit membrane, a compound material consisting of a flexible cellulosic nanofibril network, is able to interact with interfaces of gas microbubbles. We aim at analysing these dynamic interactions at the interface to understand the underlying physical processes which are crucial for maintaining the functionality of this unique metastable transport system that has no technical equivalent so far. Until now, analyses of interactions between bubbles and pit structures neglected the flexibility of some of its parts although the tissue must be able to support pressure differences of several megapascal across the gas-water interface in case of embolism. To unravel the interdependencies between structure and interfaces, mathematical methods such as differential geometry or visco-elasticity will be applied. These will be combined with novel methods of interface and microstructure analytics to clarify structural details of the pit apparatus which are crucial for dynamic interactions at the interface. We will apply Cryo-SEM, combined with the focused ion beam (FIB) technique to detect the detailed arrangement and nature of the cellulosic network and other components, as well as water-gas bubble appearance and impact at the interface. The project pursues two objectives: 1) To address problems related to the physics of three-phase-interactions (two fluids – gas and water – forming interfaces which are attached to flexible, solid parts of the conduit) and 2) to contribute to the understanding of the physical processes enabling the unique water transport system of plants with consequences beyond biology.

## Bemerkung der Geschäftsstelle / Comment by the DFG Head Office

Bei Dr. Wilfried Konrad liegt ein befristeter Arbeitsvertrag vor, der am 30.09.2021 ausläuft. Eine Weiterbeschäftigung ist beabsichtigt.  
The applicant's (Dr. Wilfried Konrad) fixed-term contract will expire on 30.09.2021. A continued employment is intended.

**Antragstyp** Schwerpunktprogramm - Einzelantrag - Neuantrag

**Type of Proposal** Priority Programme - Individual Proposal - New Proposal

**Antragsdauer / Requested Duration** 36 Monate / 36 months

**Fach** Physikalische Chemie von Festkörpern und Oberflächen, Materialcharakterisierung

**Subject Area** Physical Chemistry of Solids and Surfaces, Material Characterisation

**Rahmenprojekt / Framework Project** SPP 2171

**Titel** **Sessile Tropfen auf schaltbaren, mit Schmierstoffen infundierten Oberflächen**

**Title** **Sessile droplets on switchable lubricant infused surfaces**

**Geschäftszeichen / Reference No.** **CU 346/7-1**

**Antragsteller / Applicant** **Dr. Jiaxi Cui**  
Leibniz-Institut für Neue Materialien gGmbH (INM)  
Saarbrücken

**Beantragte Mittel / Budget Request:**

	Beantragt / Requested		
<b>Dauer [Monate] / Duration [Months]</b>	<b>36</b>		
<b>CU 346/7-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>159.300</b>		
<b>Dr. Jiaxi Cui</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>133.800</b>
Doktorandin/Doktorand und Vergleichbare 66 % / Doctoral Researcher or Comparable 66 %	1	36	127.700
Sonst. wiss. Mitarbeiterin/Sonst. wiss. Mitarbeiter 15 % / Other Research Assistant 15 %	1	9	6.100
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>25.500</b>
Geräte bis 10.000 Euro, Software und Verbrauchsmaterial / Equipment up to EUR 10,000, Software and Consumables			20.500
Publikationen / Publications			2.000
Reisen / Travel			3.000

**Zusammenfassung** Das Benetzungsverhalten eines Tropfens auf mit Schmierstoffen infundierten Oberflächen (LIS) unterscheidet sich von dem auf festen

Oberflächen. Grund hierfür ist das Vorhandensein einer beweglichen, flüssigen Zwischenschicht, einer Schmierstoffkante und einer potenziellen umhüllenden Schicht. Obwohl LIS bereits viele vielversprechende Eigenschaften gezeigt haben, sind die zugrunde liegenden Mechanismen der Benetzung, Bewegung und Verdunstung von Tröpfchen auf LIS bei weitem noch nicht vollständig verstanden. Um ein grundlegendes Wissen über diese Verhaltensweisen zu entwickeln, sind sowohl theoretische als auch experimentelle Werkzeuge notwendig. Ziel dieses Projektes ist es, eine Versuchsplattform zu entwickeln, die eine In-situ-Regulierung der charakteristischen Parameter der LIS ermöglicht, um so die Hauptfaktoren zu untersuchen, die Einfluss auf die Tröpfchen auf den LIS haben. Die Parameter sollen die Dicke der Schmierschicht auf der Oberseite, die Oberflächenmorphologie, die Oberflächenspannung und die Viskosität des Schmierstoffes einschließen. Die Plattform basiert auf schaltbaren LIS, die aus schaltbaren Substraten und responsiven Schmierstoffen bestehen. Die schaltbaren Substrate bestehen entweder aus einer porösen Oberfläche oder einer strukturierten Oberfläche mit genau definierter Geometrie zur Stabilisierung des Schmierstoffes sowie aus einer Kanal-eingebettete Trägerschicht, die einen präzisen Flüssigkeitstransport ermöglicht. Die responsiven Schmierstoffe sind so gestaltet, dass sie auf thermische oder Lichtreize mit Änderungen der Oberflächenspannung und Viskosität reagieren. Wir werden systematisch die Schaltbarkeit unseres Systems charakterisieren. Dafür werden wir Ellipsometrie oder konfokale Mikroskopie verwenden, um die Änderung der Dicke zu überwachen, den Wasserkontaktwinkel, um die Veränderung der Oberflächenspannung zu beurteilen, und die Tropfchengleitrate, um die Viskosität zu berechnen. Mit den kalibrierten Substraten werden wir verschiedene grundlegende Benetzungsverhalten untersuchen, darunter 1) die Benetzungskonfiguration eines Tropfens auf den Substraten; 2) die Entwicklung der Schmierstoffkante durch Änderung der Dicke des Schmierfilms oben auf den LIS und ihr Beitrag zur Form und Beweglichkeit der Tropfen; 3) die Bildung der umhüllenden Schicht; 4) die Verdunstung eines Tröpfchens bei unterschiedlicher Schmierstoffkante und umhüllender Schicht, die durch die Dicke der Schmierstoffschicht und der Oberflächenspannung der Schmierstoffe gesteuert wird; und 5) die Koaleszenz von zwei Tröpfchen. Diese Studien werden es uns ermöglichen, die physikalischen Modelle, die entwickelt wurden, zu überprüfen, die Energiedissipationsmechanismen der Schmierstoffkante zu verstehen, eine neue Einsicht in die Langlebigkeit und Stabilität von LIS zu gewinnen und Richtlinien für die Regulierung der Tröpfchenmischung auf LIS bereitzustellen.

## Summary

Wetting behavior of a droplet on lubricant infused surfaces (LIS) is different from that on solid surfaces due to the presence of a mobile liquid interlayer, a lubricant ridge, and a potential cloaking layer. Although LIS have shown a lot of promising properties, the underlying mechanism of the wetting, movement, and evaporation of droplets on LIS is far from being fully understood. Developing the fundamental knowledge on these behaviors requires both theoretical and experimental tools. This project aims to develop an experimental platform that allows in-situ regulation of characteristic parameters of LIS, including the thickness of lubricant layer on the top, surface morphology, surface tension and viscosity of the lubricant, for studying the main factors manipulating the droplets on LIS. The platform is based on switchable LIS consisting of tunable substrates and responsive lubricants. The tunable substrates consist on either a porous surface or a structured surface with well-defined geometry for stabilizing the lubricant, and of a channel-embedded supporting layer that allows for precise liquid-transport. Responsive lubricants are designed to be sensitive to thermo- or light-stimuli with changes in surface tension and viscosity. We will systematically characterize the switchability of our system in the

absence/presence of water droplets by using ellipsometry ( $< 1 \mu\text{m}$ ) or laser scanning confocal microscopy ( $> 1 \mu\text{m}$ ) to monitor the change in thickness, using water contact angle to evaluate the variation in surface tension, and using droplet sliding rate to estimate the viscosity. With the calibrated substrates, we will study several basic wetting and relative behaviors on LIS, including 1) the wetting configuration of a droplet on the substrates by in-situ switching the wetting state from Cassie to slippery state, and then to slippery Wenzel state; 2) the evolution of lubricant ridge by changing the thickness of the lubricant layer on the top of LIS and its contribution to the shape and mobility of the droplet; 3) the formation of cloaking layer; 4) the evaporation of a droplet with different lubricant ridge and cloaking layer controlled through the thickness of the lubricant layer and the surface tension of lubricants; and 5) the coalescence of two droplets on LIS by varying the apparent contact angle. These studies will allow us to verify the physical models developed to describe the wetting configurations on LIS, to understand the energy dissipating mechanisms of the lubricant ridge, to develop new understanding on the longevity and stability of LIS, and to provide guiding rule to regulate droplet mixing on LIS.

**Bemerkung der**

**Geschäftsstelle /**

**Comment by the DFG**

**Head Office**

Es liegt ein befristeter Arbeitsvertrag vor, der am 31.03.2020 ausläuft.

The applicant's fixed-term contract will expire on 31.03.2020.

**Antragstyp** Schwerpunktprogramm - Einzelantrag - Neuantrag

**Type of Proposal** Priority Programme - Individual Proposal - New Proposal

**Antragsdauer / Requested Duration** 36 Monate / 36 months

**Fach** Strömungsmechanik

**Subject Area** Fluid Mechanics

**Rahmenprojekt / Framework Project** SPP 2171

**Titel** **Schnelle Entnetzung und Flüssigkeitsspaltung zwischen elastischen Oberflächen**

**Title** **Fast dewetting and fluid-splitting phenomena between elastic surfaces**

**Geschäftszeichen / Reference No.** **DO 1140/4-1**

**Antragsteller / Applicant** **Professor Dr.-Ing. Edgar Dörsam**  
Technische Universität Darmstadt  
Fachbereich - Maschinenbau  
Institut für Druckmaschinen und Druckverfahren  
Darmstadt

**Beantragte Mittel / Budget Request:**

	Beantragt / Requested		
<b>Dauer [Monate] / Duration [Months]</b>	<b>36</b>		
<b>DO 1140/4-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>229.530</b>		
<b>Professor Dr.-Ing. Edgar Dörsam</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>201.780</b>
Doktorandin/Doktorand und Vergleichbare 100 % / Doctoral Researcher or Comparable 100 %	1	36	193.500
Hilfskräfte / Support Staff			8.280
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>27.750</b>
Geräte bis 10.000 Euro, Software und Verbrauchsmaterial / Equipment up to EUR 10,000, Software and Consumables			18.000
Publikationen / Publications			2.250
Reisen / Travel			7.500

**Bewilligungen der letzten vier Jahre zu anderen Projekten (seit 15.10.2014 ) /**

**DFG Project Funding Over the Last Four Years (since 15.10.2014):**

Datum / Date Gz / Ref		Euro
	<b>Professor Dr.-Ing. Edgar Dörsam</b>	<b>388.100</b>
01.06.2016 INST 163/501-1	Sonderforschungsbereich: Einzelantrag / Collaborative Research Centres: Individual Proposal Mechanische Zwangsbenetzung von Oberflächen durch gravierte Tiefdruckzylinder / Forced Wetting with Hydrodynamic Assist on Gravure Print Cylinders	388.100

**Zusammenfassung**

Die Strömungsdynamik und Benetzung von Flüssigkeiten im Spalt zwischen zwei rotierenden Zylindern, wobei mindestens einer der Zylinder eine elastisch verformbare Oberfläche besitzt und die Zylinder mit Geschwindigkeiten von bis zu 5 m/s schlupffrei aufeinander abrollen, soll untersucht werden. Mittels Hochgeschwindigkeits-Videotechnik und – Interferometrie soll das Dickenprofil des etwa  $\mu\text{m}$ -dicken Flüssigkeitsfilms zwischen den Oberflächen, deren elastische Verformung sowie die Struktur der Benetzungsrandlinien untersucht werden. Besonders Augenmerk legen wir auf das Viscous Fingering, eine Musterbildungsinstabilität, die mit der Saffman-Taylor-Instabilität eines sich zurückziehenden Fluidmeniskus verwandt ist. Im Besonderen untersuchen wir ein mögliches Skalenverhalten, das den Zusammenhang zwischen der Rotationsgeschwindigkeit, der Länge des von der Flüssigkeit benetzten Streifens im Druckspalt, die charakteristische Längenskala der Musterbildungsinstabilität und die elastische Verformung der Oberflächen betrifft. Zudem beziehen wir neben glatten auch strukturierte elastische Oberflächen ein, die ein Muster aus vorstehenden und zurückversetzten Oberflächenelementen tragen. Durch diese Struktur wollen wir auf Längenskalen zwischen 10  $\mu\text{m}$  und 1 mm der Fluidströmung unterschiedliche Randbedingungen setzen.

Unser Antrag ist durch die aktuelle Entwicklung im industriellen Flexodruck motiviert, und soll auch der Etablierung einer Modellplattform für Untersuchungen auf diesem Gebiet dienen. Zur Durchführung des Projekts verwenden wir sowohl zum Drucken, als auch zur Videoaufnahme und zur Druckformherstellung Technologien und Vorrichtungen, die dem aktuellen Industriestandard im Bereich des Massendrucks entsprechen.

**Summary**

We consider the dynamics and wetting properties of liquids in the wedge between two rotating cylinders at least one of which is elastic. The cylinders are rolling upon each other without mechanical slip at velocities up to 5 m/s. By optical high-speed video and interferometry techniques we want to study the thickness profile of the  $\mu\text{m}$ -sized thin liquid film between the surfaces, the deformation of the elastic surfaces themselves, the structure of the wetting lines, and fluid-dynamic pattern formation instabilities known as viscous fingering, which is related to the Saffman-Taylor instability of a retracting fluid meniscus.

Specifically, we would like to study a possible algebraic scaling behavior between rotation velocity, length of the wetted area in the nip (i.e. the contact zone of the cylinders), characteristic pattern size, and elastic surface distortion. Further, we are interested in the effect of a structuring of one of the surfaces, i.e. providing a pattern of protruding and recessed surface elements. With this technique specific fluid flow and wetting patterns could partially be enforced on the 10  $\mu\text{m}$  to 1 mm scale.

Our experiment is inspired by, and a model system for the flexographic printing process. We use industrial-standard large-area printing, imaging, and plate manufacturing techniques for the project.



**Antragstyp** Schwerpunktprogramm - Einzelantrag - Neuantrag

**Type of Proposal** Priority Programme - Individual Proposal - New Proposal

**Antragsdauer / Requested Duration** 36 Monate / 36 months

**Fach** Experimentelle Physik der kondensierten Materie

**Subject Area** Experimental Condensed Matter Physics

**Rahmenprojekt / Framework Project** SPP 2171

**Titel** **Benetzung, elastische und Kapillarkräfte dünner freistehender smektischer Filme**

**Title** **Wetting, elastic and capillary forces of thin freely suspended smectic films**

**Geschäftszeichen / Reference No.** **ER 467/13-1**

**Antragsteller / Applicant** **Professor Dr. Alexey Eremin**  
Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg  
Institut für Experimentelle Physik  
Abteilung Nichtlineare Phänomene  
Magdeburg

**Geschäftszeichen / Reference No.** **STA 425/45-1**

**Antragsteller / Applicant** **Professor Dr. Ralf Stannarius**  
Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg  
Institut für Experimentelle Physik  
Magdeburg

**Beantragte Mittel / Budget Request:**

	Beantragt / Requested		
<b>Dauer [Monate] / Duration [Months]</b>	<b>36</b>		
<b>ER 467/13-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>115.454</b>		
<b>Professor Dr. Alexey Eremin</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>72.600</b>
Doktorandin/Doktorand und Vergleichbare 75 % / Doctoral Researcher or Comparable 75 %	1	18	72.600
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>29.625</b>

Geräte bis 10.000 Euro, Software und Verbrauchsmaterial / Equipment up to EUR 10,000, Software and Consumables			20.900
Publikationen / Publications			1.125
Reisen / Travel			7.600
<b>Investitionsmittel / Instrumentation</b>			<b>13.229</b>
High Power Laser Light Source / High Power Laser Light Source			13.229
<b>STA 425/45-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>103.325</b>		
<b>Professor Dr. Ralf Stannarius</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>73.800</b>
Doktorandin/Doktorand und Vergleichbare 75 % / Doctoral Researcher or Comparable 75 %	1	18	72.600
Hilfskräfte / Support Staff			1.200
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>29.525</b>
Geräte bis 10.000 Euro, Software und Verbrauchsmaterial / Equipment up to EUR 10,000, Software and Consumables			20.800
Publikationen / Publications			1.125
Reisen / Travel			7.600
<b>Gesamtsumme / Total</b>	<b>218.779</b>		

**Bewilligungen der letzten vier Jahre zu anderen Projekten (seit 14.10.2014 ) /  
DFG Project Funding Over the Last Four Years (since 14.10.2014):**

<b>Datum / Date Gz / Ref</b>		<b>Euro</b>
	<b>Professor Dr. Alexey Eremin</b>	<b>239.043</b>
26.05.2017 ER 467/8-2	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal Struktur und Dynamik der nematischen Phasen aus bent-core Mesogenen mit starken smektischen Fluktuationen / Structure and dynamics of nematic phases with strong smectic fluctuations formed by bent-core mesogens	239.043
	<b>Professor Dr. Ralf Stannarius</b>	<b>811.350</b>
20.12.2017 STA 425/36-3	Schwerpunktprogramm: Einzelantrag / Priority Programmes: Individual Proposal Magneto-optisch schaltbare anisotrope Suspensionen und Gele / Magneto- optically switchable anisotropic suspensions and gels	192.000
29.04.2016 STA 425/36-2	Schwerpunktprogramm: Einzelantrag / Priority Programmes: Individual Proposal Magneto-optisch schaltbare anisotrope Farbstoffsuspensionen / Magneto- optically switchable anisotropic dye suspensions	3.100
05.04.2016 STA 425/40-1	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal OASIS - Smektische Filme unter Mikrogravitation / OASIS - Smectic Films under Microgravitation	191.200
19.10.2015 STA 425/36-2	Schwerpunktprogramm: Einzelantrag / Priority Programmes: Individual Proposal Magneto-optisch schaltbare anisotrope Farbstoffsuspensionen / Magneto-	168.000

Datum / Date Gz / Ref		Euro
	optically switchable anisotropic dye suspensions	
26.08.2015 STA 425/28-2	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal Dynamik und Wechselwirkungen kolloidaler Teilchen auf freistehenden smektischen Filmen / Dynamics and Interactions of Colloidal Particles on Freely Suspended Smectic Films	125.600
28.01.2015 STA 425/38-1	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal Geometrische Frustration in granularen Packungen / Geometric frustration in granular packings	131.450

## Zusammenfassung

In diesem Projekt wird die Dynamik von Flüssigkeitsgrenzflächen während der Benetzung und unter kapillaren Wechselwirkungen experimentell untersucht. Wir nutzen dabei eine bemerkenswerte Eigenschaft von smektischen Flüssigkristallen aus: Ihre Fähigkeit, stabile, frei tragende Filme auszubilden. Diese Filme stellen quasi-2D-Flüssigkeiten mit einzigartigen Merkmalen dar. Ihre geschichtete Struktur garantiert auf molekularer Skala einheitliche Filmdicken im Gleichgewicht. Sie macht Sie auch extrem robust und verhindert Drainage. Gleichzeitig sind diese Filme äußerst flexibel und weisen eine komplexe Dynamik auf, sie eignen sich hervorragend als Modellsysteme für Untersuchungen dünner flüssiger Membranen, die mit auftreffenden oder eingebetteten Objekten wechselwirken oder anderen statischen oder dynamischen Belastungen ausgesetzt sind. Solche Filme ermöglichen die Untersuchung der Benetzung und Entnetzung in Kombination mit elastischen Deformationen der Filmflächen. Der Antrag basiert auf Vorstudien des Tropfenaufschlages auf freitragende Filme, der Bewegung von Objekten in diesen Filmen und der Dynamik von Grenzflächenspannungen und der optischen Manipulation des Benetzungsverhaltens:

(i) Tröpfcheneinschlag auf freistehende Filme: Wir schlagen vor, den Aufprall von Tröpfchen auf dünne, freitragende smektische Filme zu untersuchen. Bei niedriger kinetischer Energie werden die Tröpfchen in der Filmebene eingebettet. Wenn Sie ausreichend schnell sind, können Sie in die Filme jedoch durchdringen. Dabei

werden sie in eine dünne smektische Beschichtung verkapselt, sie bilden smektische 'Schalen'.

(II) Tröpfchen auf smektischen Filmen: Auftreffende Tröpfchen, die im Film eingebettet werden, setzen sich zunächst auf seine Oberfläche. Ihre anschließenden Formumwandlungen spiegeln die Benetzungsprozesse an Ober- und Unterseite wider, innerhalb von Mikrosekunden. Wir werden Hochgeschwindigkeitsphotographie verwenden, um diese Prozesse zu analysieren, für eine repräsentative Auswahl von Flüssigkeiten und Tensiden.

(III) Dynamische Grenzflächenspannung: Wenn eine frische smektische Grenzfläche in einer Tensid-Lösung schwacher Konzentration (unterhalb der kritischen Mizellen-Konzentration) entsteht, wird Sie zunächst nur teilweise mit Tensidmolekülen bedeckt.

Die Dynamik der Bedeckung führt zu einer zeitabhängigen Grenzflächenspannung. Darüber hinaus können lichtempfindliche Tenside eingesetzt werden, um die Grenzflächenspannung lokal oder global zu manipulieren. Dies ermöglicht die Steuerung der Formen, Positionen und Stabilität von LC-Strukturen in wässrigen Tensidlösungen durch Bestrahlung mit UV- und sichtbarem Licht, kontinuierlich und umkehrbar.

## Summary

In this project, the dynamics of fluid interfaces during wetting and capillary interactions will be studied experimentally. We will take advantage of a distinctive property of smectic liquid crystals: their ability to form stable freely

suspended films. These films represent quasi-2D liquids, with unique features. Their layered structure guarantees uniform film thicknesses in equilibrium, on a molecular scale. It also renders them extremely robust and inhibits drainage. At the same time, these films are extremely flexible and they exhibit complex shape dynamics, providing unique model systems for studies of thin fluid membranes interacting with impacting or embedded objects, or exposed to other static or dynamic stresses. Such films allow the investigation of wetting and dewetting in combination with related elastic deflections of the film surfaces.

The proposal is based on preliminary studies by the applicants of droplet impact on smectic films, interface tension dynamics and optical manipulation of interfaces, substantially expanding these studies and broadening the scope of the investigations. The research program is divided into three interrelated subtasks: impact of liquid droplets on thin free-standing films, embedding and motion of objects in the films, and studies of the dynamic interface tension including optical manipulation of wetting behaviour:

(i) Droplet impact on free-standing films: We propose to study the impact of droplets of immiscible liquids on thin freely suspended smectic films. At low kinetic energy, the droplets become trapped in the film plane. When they are sufficiently fast, they can penetrate the films. Thereby, they are encapsulated by a thin smectic coating, forming smectic 'shells'.

(ii) Droplets on smectic films: Impacting droplets that are trapped by the film first settle on its surface. Their subsequent shape transformations reflect wetting processes at the droplet top and bottom surfaces, within microseconds. We will employ high-speed imaging to analyze this wetting process for a representative selection of liquids and surfactants.

(iii) Dynamical interface tension: When a fresh smectic interface is created in a low-concentration surfactant solution (below the critical micelle concentration), it is initially covered only partially with surfactant molecules. The dynamics of the surface coverage results in a time dependent interface tension. In addition, photosensitive surfactants can be used to locally or globally manipulate the interface tension. This allows to control shapes, positions and stability of LC structures immersed in aqueous surfactant solutions by irradiation with UV and visible light, continuously and reversibly.

**Antragstyp** Schwerpunktprogramm - Einzelantrag - Neuantrag

**Type of Proposal** Priority Programme - Individual Proposal - New Proposal

**Antragsdauer / Requested Duration** 36 Monate / 36 months

**Fach** Chemische und Thermische Verfahrenstechnik

**Subject Area** Chemical and Thermal Process Engineering

**Rahmenprojekt / Framework Project** SPP 2171

**Titel** **Modellierung der Ausbreitung, Imbibition und Verdampfung von Flüssigkeiten auf strukturierten oder porösen, verformbaren Substraten**

**Title** **Modelling of spreading, imbibition and evaporation of liquids on structured or porous deformable substrates**

**Geschäftszeichen / Reference No.** **GA 736/12-1**

**Antragstellerin / Applicant** **Professorin Dr. Tatiana Gambaryan-Roisman**  
Technische Universität Darmstadt  
Institut für Technische Thermodynamik  
Darmstadt

**Beantragte Mittel / Budget Request:**

	<b>Beantragt / Requested</b>		
<b>Dauer [Monate] / Duration [Months]</b>	<b>36</b>		
<b>GA 736/12-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>256.348</b>		
<b>Professorin Dr. Tatiana Gambaryan-Roisman</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>234.648</b>
Doktorandin/Doktorand und Vergleichbare 100 % / Doctoral Researcher or Comparable 100 %	1	36	193.500
Hilfskräfte / Support Staff			41.148
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>21.700</b>
Geräte bis 10.000 Euro, Software und Verbrauchsmaterial / Equipment up to EUR 10,000, Software and Consumables			7.000
Publikationen / Publications			1.500
Reisen / Travel			13.200

**Bewilligungen der letzten vier Jahre zu anderen Projekten (seit 15.10.2014 ) /  
DFG Project Funding Over the Last Four Years (since 15.10.2014):**

Datum / Date Gz / Ref		Euro
	<b>Professorin Dr. Tatiana Gambaryan-Roisman</b>	<b>1.321.500</b>
30.11.2017 INST 41/803-3	SFB/Transregio: Einzelantrag / CRC/Transregio: Individual Proposal Numerische Simulation der Transportvorgänge beim Tropfenaufrall auf beheizte Wände unter besonderer Berücksichtigung der verdampfenden Dreiphasen-Kontaktlinien / Numerical simulation of the transport processes during drop impingement onto heat-ed walls with special consideration of the evaporating three-phase contact line	321.400
30.11.2017 INST 41/804-3	SFB/Transregio: Einzelantrag / CRC/Transregio: Individual Proposal Hochauflösende Messungen zum Wärmetransport beim Tropfenaufrall auf eine heiße Wand unter besonderer Berücksichtigung der verdampfenden Dreiphasen-Kontaktlinie / High-resolution measurements of heat transport during drop impingement onto a hot wall with special consideration of the evaporation near the three-phase contact line	349.400
01.06.2016 INST 163/490-1	Sonderforschungsbereich: Einzelantrag / Collaborative Research Centres: Individual Proposal Strömung und Verdunstung reiner Flüssigkeiten und (Nano-)Suspensionen auf strukturierten Beschichtungen / Flow and Evaporation of Pure Liquids and (Nano)-Suspensions from Structured Coatings	350.400
24.11.2014 INST 163/426-1	SFB/Transregio: Einzelantrag / CRC/Transregio: Individual Proposal Numerische Untersuchung zur Filmverdampfung von Mehrkomponentensystemen und zur Entstehung von Ablagerungen / Numerische Untersuchung zur Filmverdampfung von Mehrkomponentensystemen und zur Entstehung von Ablagerungen	300.300

**Zusammenfassung**

Zahlreiche experimentelle Untersuchungen belegen, dass die gleichzeitige Imbibition und Verdampfung/Verdunstung von Flüssigkeiten auf heißen Oberflächen, die mit Nanofasermatten beschichtet sind, den Wärmetransport beim Tropfenaufrall auf ein heißes Substrat sowie beim Blasen- und Strömungssieden signifikant verbessern. Die Imbibition- und Verdampfungsprozesse werden von einer starken Verformung der Polymerfasern und einer Veränderung der Beschichtungsgeometrie begleitet. Um Beschichtungen für spezifische Anwendungen zu entwickeln, sind Methoden zur Vorhersage der Imbibitionsdynamik und der Verdampfung in verformbaren porösen Beschichtungen notwendig. Das geplante Projekt zielt auf die Entwicklung von Modellen zur Ausbreitung, Imbibition und Verdampfung/Verdunstung von Flüssigkeiten auf strukturierten oder porösen, verformbaren Substraten ab. Das auf der Dünnschichttheorie basierende numerische Modell wird entwickelt, validiert und auf elastisch verformbare Substrate mit flacher Topographie angewendet, wobei das volle Verständnis des Einflusses von Material-, Struktur- und Prozessparametern auf Ausbreitung, Imbibition und Verdampfung/Verdunstung erreicht wird. Parallel dazu wird die Benetzung und Verdampfung/Verdunstung von Flüssigkeiten an Elementen poröser Struktur (Rillen, Fasern und Fasergruppen) unter Berücksichtigung der Koaleszenz von flexiblen Fasern numerisch beschrieben. Die Ergebnisse dieser Studien werden es ermöglichen, die Schlüsselphänomene zu bestimmen, die die Imbibition auf der Skala der gesamten porösen Struktur beherrschen. Auf der Grundlage dieser Erkenntnisse werden in der Zukunft Homogenisierungstechniken zur Berechnung effektiver Transportkoeffizienten angewendet. Diese Transportkoeffizienten werden verwendet, um die Imbibition und Verdampfung/Verdunstung auf

strukturierten oder porösen, verformbaren Substraten, die für natürliche Phänomene und technologische Anwendungen relevant sind, auf der makroskopische Skala zu simulieren.

## **Summary**

Numerous experimental investigations show that simultaneous imbibition and evaporation of liquids on hot surfaces coated by nanofiber mats significantly enhance the heat transfer during impact of a drop on a hot substrate and during nucleate and flow boiling. The imbibition and evaporation processes are accompanied by strong deformation of polymeric fibers and change of coating geometry. In order to design the coatings for specific applications, the methods for predicting the imbibition dynamic and evaporation in deformable porous coatings are necessary. The planned project is aimed at development of models for spreading, imbibition and evaporation of liquids on structured or porous deformable substrates. The thin film theory-based numerical model will be developed, validated and applied to elastic deformable substrates with shallow topography, whereas the full understanding of the influence of material, structural and process parameters on spreading, imbibition and evaporation processes will be achieved. In parallel, the wetting and evaporation of liquids on elements of porous structure (grooves, fibers and groups of fibers) will be modelled numerically, taking into account the coalescence of flexible fibers. The results of these studies will allow elucidating the key phenomena governing imbibition on a scale of the whole porous structure. In the future, homogenization techniques for computation of effective transport coefficients will be applied on the basis of this knowledge. These coefficients will be used for macroscopic-scale simulation of imbibition and evaporation on structured or porous deformable substrates, which are relevant to natural phenomena and technological applications.

<b>Antragstyp</b>	Schwerpunktprogramm - Einzelantrag - Neuantrag
<b>Type of Proposal</b>	Priority Programme - Individual Proposal - New Proposal
<b>Antragsdauer / Requested Duration</b>	36 Monate / 36 months
<b>Fach</b>	Herstellung und Eigenschaften von Funktionsmaterialien
<b>Subject Area</b>	Synthesis and Properties of Functional Materials
<b>Rahmenprojekt / Framework Project</b>	SPP 2171
<b>Titel</b>	<b>Bioinspirierte Kompositmaterialien mit ausgerichteten Cellulosefasern als adaptive Substrate mit dynamischen Oberflächenfunktionalitäten</b>
<b>Title</b>	<b>Bioinspired composite materials with aligned cellulose fibers as adaptive substrates with dynamic surface functionalities</b>
<b>Geschäftszeichen / Reference No.</b>	<b>GO 995/40-1</b>
<b>Antragsteller / Applicant</b>	<b>Professor Dr. Stanislav N. Gorb</b> Christian-Albrechts-Universität zu Kiel Zoologisches Institut Arbeitsgruppe Funktionelle Morphologie und Biomechanik Kiel
<b>Geschäftszeichen / Reference No.</b>	<b>LI 1902/11-1</b>
<b>Antragsteller / Applicant</b>	<b>Professor Dr. Oliver Lieleg</b> Technische Universität München Munich School of BioEngineering Garching
<b>Geschäftszeichen / Reference No.</b>	<b>ZO 113/28-1</b>
<b>Antragsteller / Applicant</b>	<b>Professor Dr. Cordt Zollfrank</b> Technische Universität München TUM-Campus Straubing für Biotechnologie und Nachhaltigkeit Professur für Biogene Polymere Straubing

**Beantragte Mittel / Budget Request:**

	<b>Beantragt / Requested</b>
<b>Dauer [Monate] / Duration [Months]</b>	<b>36</b>
<b>GO 995/40-1</b>	



<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>202.950</b>		
<b>Professor Dr. Stanislav N. Gorb</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>160.100</b>
Doktorandin/Doktorand und Vergleichbare 75 % / Doctoral Researcher or Comparable 75 %	1	36	145.100
Hilfskräfte / Support Staff			15.000
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>42.850</b>
Geräte bis 10.000 Euro, Software und Verbrauchsmaterial / Equipment up to EUR 10,000, Software and Consumables			27.000
Publikationen / Publications			2.250
Reisen / Travel			12.400
Sonstiges / Other			1.200
<b>LI 1902/11-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>204.750</b>		
<b>Professor Dr. Oliver Lieleg</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>160.100</b>
Doktorandin/Doktorand und Vergleichbare 75 % / Doctoral Researcher or Comparable 75 %	1	36	145.100
Hilfskräfte / Support Staff			15.000
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>44.650</b>
Geräte bis 10.000 Euro, Software und Verbrauchsmaterial / Equipment up to EUR 10,000, Software and Consumables			30.000
Publikationen / Publications			2.250
Reisen / Travel			12.400
<b>ZO 113/28-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>210.750</b>		
<b>Professor Dr. Cordt Zollfrank</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>160.100</b>
Doktorandin/Doktorand und Vergleichbare 75 % / Doctoral Researcher or Comparable 75 %	1	36	145.100
Hilfskräfte / Support Staff			15.000
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>50.650</b>
Geräte bis 10.000 Euro, Software und Verbrauchsmaterial / Equipment up to EUR 10,000, Software and Consumables			36.000
Publikationen / Publications			2.250
Reisen / Travel			12.400
<b>Gesamtsumme / Total</b>	<b>618.450</b>		

**Bewilligungen der letzten vier Jahre zu anderen Projekten (seit 12.10.2014 ) /  
DFG Project Funding Over the Last Four Years (since 12.10.2014):**

<b>Datum / Date Gz / Ref</b>		<b>Euro</b>
	<b>Professor Dr. Stanislav N. Gorb</b>	<b>762.700</b>
06.09.2016 GO 995/28-2	Forschergruppe: Einzelantrag / Research Units: Individual Proposal Frühdiagenese von Korallen, verursacht durch variable Aktivität endolithischer Algen und deren Einfluss auf geochemische Proxies. / Early diagenesis of corals generated by variable activity of endolithic algae and its impact on geochemical proxies.	5.500
30.11.2015 INST 257/272-3	Sonderforschungsbereich: Einzelantrag / Collaborative Research Centres: Individual Proposal Nitrat-Atmung von Benthosforaminiferen in Sauerstoffminimumzonen (SMZ) - Einblicke in Vergangenheit und Gegenwart  / Foraminiferal nitrate respiration in oxygen minimum zones (OMZ) - past and present	757.200
	<b>Professor Dr. Oliver Lieleg</b>	<b>891.950</b>
18.12.2017 LI 1902/9-1	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal Mikrofluidische Analyse der selektiven Barrierenwirkung von nativen und chemisch modifizierten Mucin-Gelen / A microfluidics approach to study the selective permeability of native and chemically modified mucin gels	206.950
29.11.2017 INST 95/1264-2	Sonderforschungsbereich: Einzelantrag / Collaborative Research Centres: Individual Proposal Nicht-lineare Mechanik und Selbstheilung in makromolekularen Netzwerken / Non-Linear Mechanics and Self-Repair in Macromolecular Networks	628.400
01.06.2016 INST 86/1406-2	Sonderforschungsbereich: Einzelantrag / Collaborative Research Centres: Individual Proposal Nanoagentien in 3-dimensionalen Hydrogelen aus Biopolymeren / Nanoagents in 3-dimensional biopolymer hydrogels	56.600
	<b>Professor Dr. Cordt Zollfrank</b>	<b>1.634.303</b>
31.08.2018 ZO 113/24-2	Schwerpunktprogramm: Koordinationsantrag / Priority Programmes: Coordination Proposal Koordinationsfonds / Coordination Funds	539.600
31.08.2018 ZO 113/21-2	Schwerpunktprogramm: Einzelantrag / Priority Programmes: Individual Proposal Kombinierte materialwissenschaftliche und bioinspirierte Generierung maßgeschneiderter Unordnung in funktionellen optischen Materialien / Tailoring disorder in functional optical materials using a combined materials engineering and bioinspiration approach	270.750
11.07.2018 ZO 113/26-1	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal Glucose-basierte Block-Co-Oligomere mit gemischter alpha/beta-Konfiguration / Glucose-based block-co-oligomers with mixed alpha/beta configuration	23.800
03.05.2017 ZO 113/24-1	Schwerpunktprogramm: Koordinationsantrag / Priority Programmes: Coordination Proposal Koordinationsfonds / Coordination Funds	121.286
05.10.2016 ZO 113/22-1	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal Biomechanische Qualifizierung des strukturoptimierten Funktionswerkstoffs Cottonid als adaptives Element / Biomechanical qualification of the structurally optimized functional material Cottonid as an adaptive element	431.817
09.07.2015	Schwerpunktprogramm: Einzelantrag / Priority Programmes: Individual	247.050

Datum / Date Gz / Ref		Euro
ZO 113/21-1	Proposal Kombinierte materialwissenschaftliche und bioinspirierte Generierung maßgeschneiderter Unordnung in funktionellen optischen Materialien / Tailoring disorder in functional optical materials using a combined materials engineering and bioinspiration approach	

## Zusammenfassung

Die Oberfläche eines Materials ist von fundamentaler Bedeutung, weil durch sie die Funktion und Eigenschaften für die jeweiligen Anwendungen im Hinblick auf ihre Interaktion mit den herrschenden Umgebungsbedingungen determiniert werden. Anpassungs- und Wandlungsfähigkeit ist eine inhärente Eigenschaft biologischer Materialien, um ihre ursprüngliche Funktionalität in gewissen Grenzen zu erhalten und wieder herzustellen. Natürliche Materialien und Prozesse bieten eine schier unerschöpfliche Quelle an möglichen Lösungen für technische Fragestellungen, um neue Materialien mit maßgeschneiderten Oberflächen zu generieren. Derartige bioinspirierte Materialien bieten besondere Möglichkeiten, sich an komplexe und multivariate Umgebungsbedingungen anzupassen. Unser Projekt wird durch biologische Vorbilder inspiriert, die adaptive und dynamische Oberflächeneigenschaften aufweisen. Der Fokus des beantragten Projekts liegt auf der Entwicklung und Charakterisierung von flexiblen, adaptiven und schaltbaren funktionellen Substraten mit speziellen mechanischen Eigenschaften oder Wechselwirkungen mit Fluiden. Wir beabsichtigen die Herstellung derartiger Materialien durch die ausgerichtete Anordnung natürlicher Cellulosefasern für die Entwicklung technischer Materialien nach biologischen Prinzipien. In dem Projekt verfolgen wir drei Arbeitsrichtungen: i) Die Untersuchung natürlicher vertikal ausgerichteter Cellulosenanofaserstrukturen bestimmter klebriger Pflanzensamen, ii) die Herstellung ähnlicher Strukturen mit Cellulosenanofasern über synthetische Routen mit ausgewählten biogenen Materialien, z.B. nano-fibrillierte Cellulose und iii) die Kombination von mikroskopischen und tribologischen Methoden zur Charakterisierung der biologischen und der bioinspirierten Materialien mit verbesserten adhäsiven, nicht-kohäsiven und weiteren funktionellen Eigenschaften. Reaktionsfähige Oberflächenstrukturen mit adaptiven Eigenschaften werden über die gezielte Funktionalisierung von gerichteten Cellulosenanofasern mit magnetischen Partikeln oder photo-schaltbaren Gruppen realisiert, um so die Benetzbarkeit, die tribologischen Eigenschaften oder das Adhäsionsverhalten der Oberflächen zu verändern. Die von uns vorgeschlagenen Materialien basieren auf nachwachsenden Rohstoffen und sind unbedenklich für die Umwelt, wodurch die biologische Transformation von Industrie und Gesellschaft weiter voran gebracht wird.

## Summary

The surface of a material is of fundamental importance, because it determines its function and properties for the respective application regarding a potential interaction with its environment. Biological materials are able to change and develop as an inherent capability in order to restore or maintain the original functionality within certain limits. Natural materials and processes offer a tremendous pool of solutions to tailor and design a novel class of materials and surfaces also known as bioinspired materials, which have the potential to conquer complex multi-variant environments and applications. Our project is inspired by biological role models, which exhibit adaptive and dynamic surface properties. The focus of the proposed research lies in the development and characterization of flexible, adaptive, and switchable functional substrates for mechanical or liquid interaction. We envision the fabrication of these materials using aligned natural fibers such as cellulose for the development of engineering materials applying biological principles. In this project, we will follow three directions: i) exploration of

natural vertically-aligned cellulose nanofibre arrays from mu-cilaginous plant seeds, ii) fabrication of similar cellulose nanofiber arrays following various synthetic routes based on biogenic material choices, i.e. cellulose nanofibers, and iii) combining both micro-copy techniques and tribological methods to characterize properties of biological systems and bio-logically-inspired artificial materials with enhanced adhesive, frictional, and other functional proper-ties. Responsive surface structures with adaptive characteristics will be generated from aligned cellulose nanofibers via a tailored functionalization, e.g., with magnetic particles or photo-switchable groups, to achieve tunable wettability, tribological properties, and adhesion. Our pro-posed materials are based on renewable resources and are environmentally benign, which fits well to the biological transformation in industry and society.

**Antragstyp** Schwerpunktprogramm - Einzelantrag - Neuantrag

**Type of Proposal** Priority Programme - Individual Proposal - New Proposal

**Antragsdauer / Requested Duration** 36 Monate / 36 months

**Fach** Strömungsmechanik

**Subject Area** Fluid Mechanics

**Rahmenprojekt / Framework Project** SPP 2171

**Titel** **Benetzung von schaltbaren Substraten mittels magnetisch aktuierter Filamente**

**Title** **Wetting of switchable surfaces through magnetically-actuated filaments**

**Geschäftszeichen / Reference No.** **GU 1075/18-1**

**Antragsteller / Applicant** **Professor Dr. Evgeny Gurevich**  
Ruhr-Universität Bochum  
Fakultät für Maschinenbau  
Lehrstuhl für Laseranwendungstechnik  
Bochum

**Geschäftszeichen / Reference No.** **HU 2264/7-1**

**Antragstellerin / Applicant** **Professorin Dr.-Ing. Jeanette Hussong**  
Ruhr-Universität Bochum  
Institut für Thermo- und Fluidodynamik  
Lehrstuhl für Hydraulische Strömungsmaschinen  
Bochum

**Beantragte Mittel / Budget Request:**

	Beantragt / Requested		
<b>Dauer [Monate] / Duration [Months]</b>	<b>36</b>		
<b>GU 1075/18-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>157.850</b>		
<b>Professor Dr. Evgeny Gurevich</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>145.100</b>
Doktorandin/Doktorand und Vergleichbare 75 % / Doctoral Researcher or Comparable 75 %	1	36	145.100

<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>12.750</b>
Geräte bis 10.000 Euro, Software und Verbrauchsmaterial / Equipment up to EUR 10,000, Software and Consumables			6.000
Publikationen / Publications			2.250
Reisen / Travel			4.500
<b>HU 2264/7-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>158.050</b>		
<b>Professorin Dr.-Ing. Jeanette Hussong</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>145.100</b>
Doktorandin/Doktorand und Vergleichbare 75 % / Doctoral Researcher or Comparable 75 %	1	36	145.100
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>12.950</b>
Geräte bis 10.000 Euro, Software und Verbrauchsmaterial / Equipment up to EUR 10,000, Software and Consumables			5.700
Publikationen / Publications			2.250
Reisen / Travel			5.000
<b>Gesamtsumme / Total</b>	<b>315.900</b>		

**Bewilligungen der letzten vier Jahre zu anderen Projekten (seit 11.10.2014 ) /  
DFG Project Funding Over the Last Four Years (since 11.10.2014):**

<b>Datum / Date Gz / Ref</b>		<b>Euro</b>
	<b>Professor Dr. Evgeny Gurevich</b>	<b>626.650</b>
18.12.2017 GU 1075/14-1	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal Einbringung von Instabilitäten in großflächige Dünnschichtbeschichtungen mit komplexen Flüssigkeiten / Employing Instabilities in Large Area Thin-Film Coating with Complex Fluids	270.550
03.07.2017 GU 1075/12-1	Schwerpunktprogramm: Einzelantrag / Priority Programmes: Individual Proposal Mischkristallverfestigung in kubisch raumzentrierten TiZrNbHfTa Hochentropie-Legierungen / Solid solution strengthening in TiZrNbHfTa BCC high entropy alloys	158.600
09.07.2015 GU 1075/8-1	Schwerpunktprogramm: Einzelantrag / Priority Programmes: Individual Proposal Zugang zu gezielter struktureller und chemischer Fehlordnung in Metalloxid Dünnschichten für verbesserte Lichtabsorption (EnLight) / Design of Structural and Chemical Disorder in Metal Oxide Thin Films for Enhanced Light Absorption (EnLight)	197.500
	<b>Professorin Dr.-Ing. Jeanette Hussong</b>	<b>476.500</b>
26.06.2017 HU 2264/3-1	Schwerpunktprogramm: Einzelantrag / Priority Programmes: Individual Proposal Deterministisch-hydrodynamische Größen-, Form- und Dichtefraktionierung polydisperser Feinstpartikelsysteme / Deterministic-hydrodynamic Size-, Shape- and Density Fractionation of Polydisperse Microparticles	301.500
24.04.2015	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal Entwicklung eines Versuchsaufbaus für simultane Messungen der Druck- und	175.000

Datum / Date Gz / Ref		Euro
HU 2264/1-1	Geschwindigkeitsverteilungen kavitierender Ultraschallströmungen mittels kombinierter Differentialinterferometrie und Mikro Partikel Image Velocimetry / Development of an experimental set-up for simultaneous density and velocity field measurements in cavitating ultrasound flows by means of Differential Interferometry and Micro Particle Image Velocimetry	

## Zusammenfassung

Im vorliegenden Projekt werden magnetisch aktuierte, schaltbare Substrate hergestellt indem sie mit flexiblen superparamagnetischen Filamenten bedeckt werden. Zur Oberflächenbenetzung werden fortschreitende Wellenbewegungen entlang der Substratoberfläche eingesetzt, die zu (1) einer Umschaltung der Oberflächenbenetzungseigenschaften und (2) einer unidirektionalen Nettoantriebskraft in der Flüssigkeit führt. Mit einer solchen Aktuierung kann ein Transport für jede Art von Wellenbewegung realisiert werden, solange Modulationen der Oberflächenbenetzungseigenschaften und der lokalen Porosität in der Filamentschicht auftreten. Die Filamentbewegung in einem rotierenden Magnetfeld wird durch die Wechselwirkung zwischen viskosen Flüssigkeitskräften, elastischen Biegekräften und magnetischen Dipolkräften dominiert. Zudem beeinflussen hydrodynamische sowie magnetische Wechselwirkung zwischen benachbarten Filamenten die Bewegung und damit die Entwicklung der fortschreitenden Porositäts- und Benetzungsmodulationen. Es besteht somit eine starke Kopplung zwischen der Benetzungshydrodynamik und den Substrateigenschaften. So führt z.B. eine Erhöhung der Wellengeschwindigkeit zu einer erhöhten Dämpfung der Amplitudenbewegung von Filamenten durch viskose Fluidkräfte. Dies wirkt sich wiederum auf die magnetischen und hydrodynamischen Wechselwirkungskräfte zwischen den Filamenten aus. Um den Prozess der Oberflächenbenetzung erfolgreich zu steuern, wird die Rolle von Zeit- und Längenskalen auf die Filamentbewegung untersucht. Das Projekt umfasst vier Phasen: (I) das Design und die Modellierung des Substrats, (II) die Substratherstellung und Materialanalyse, (III) die Technologie- und Systemintegration und (IV) die Strömungscharakterisierung. Das Projekt ist eine Zusammenarbeit der Forschungsgruppen LAT und LM der RUB. Hierdurch werden die Kompetenzen in der laserbasierten Fertigung und der Messtechnik der Mikrofluidik kombiniert. Schaltbare, magneto-elastischen Oberflächen werden aus Nanokompositen hergestellt, wobei in der weichen Polymermatrix superparamagnetische Nanopartikeln eingebettet werden. Magnetische Nanopartikel werden durch Femtosekunden-Laserablation von Eisen-Targets in Flüssigkeiten hergestellt und in den Polymeren dispergiert. Für die Polymerisation wird ein neuartiger Ansatz angewendet, der eine schnelle Abdeckung der Substratoberflächen mit dicht gepackten, magnetischen Filamenten ermöglicht, die durch ein rotierendes Magnetfeld aktuiert werden. Zur Charakterisierung des Benetzungs- und Transportprozesses von Tröpfchen und Flüssigkeitsfilmen werden phasenstarre Aufnahmen der Filamentbewegung und des Strömungsfeldes mittels Micro-PIV und A-PTV durchgeführt.

## Summary

In the present project we are going to design magnetically actuated, switchable substrates with flexible superparamagnetic filament arrays covering the surface. Creating a travelling wave actuation along the substrate surface leads to (1) a switching of surface wetting properties and (2) unidirectional net driving force in the liquid. The unique kick of both transport mechanism is that it can work for any type of travelling wave motion as long as surface wetting and porosity variations in the filament layer are created. To understand the actual substrate's filament motion in a rotating magnetic

field, one has to consider the interaction between viscous fluid forces, elastic bending forces and magnetic dipole forces. Furthermore, secondary effects due to hydrodynamic interaction as well as magnetic interaction between neighboring filaments affect the filament motion and with it the evolution of overall travelling waves of porosity. Therefore, there exists a strong coupling between wetting hydrodynamics and substrate properties. E.g. an increase in actuation wave speed will result in an increased damping of the amplitude motion of filaments due to viscous fluid forces. This again will affect magnetic and hydrodynamic interaction forces between filaments. To successfully control the process of surface wetting the role of time and length scales on the filament motion will be studied closely. The project comprises four main steps: (I) the design and modeling of the substrate, (II) the substrate synthesis and material analysis, (III) the technology and system integration and (IV) the flow characterization. The project will be performed in a joined effort of research groups LAT and LM at RUB to combine expertises in laser-based manufacturing and microfluidics measurement techniques. Switchable substrates with arrays of magneto-elastic surface filaments will be synthesized from nanocomposites that is a soft polymer with embedded superparamagnetic nanoparticles. Magnetic nanoparticles will be produced by femtosecond laser ablation of iron targets in liquids and dispersed in the polymers. For polymerization a novel approach will be applied which allows rapid covering substrate surfaces with densely packed, magnetic filaments actuated through a rotating magnetic field. Phase locked recordings of the filament motion and the flow field by means of Micro-PIV and A-PTV will be performed to characterize the wetting and transport process of droplets and liquid films.

**Bemerkung der  
Geschäftsstelle /  
Comment by the DFG  
Head Office**

Es liegen befristete Arbeitsverträge vor, die am 31.12.2018 sowie am 31.12.2021 auslaufen. Eine Weiterbeschäftigung ist in beiden Fällen beabsichtigt.  
The applicants fixed-term contracts will expire on 31.12.2018 and 31.12.2021. The continued employment is in both cases intended.



**Antragstyp** Schwerpunktprogramm - Einzelantrag - Neuantrag

**Type of Proposal** Priority Programme - Individual Proposal - New Proposal

**Antragsdauer / Requested Duration** 36 Monate / 36 months

**Fach** Theorie und Modellierung

**Subject Area** Theory and Modelling

**Rahmenprojekt / Framework Project** SPP 2171

**Titel** **Flüssigkeiten auf schaltbaren vorstrukturierten Substraten - von mikroskopischen zu mesoskopischen Modellen**

**Title** **Liquids on switchable pre-structured substrates - from microscopic to mesoscopic models**

**Geschäftszeichen / Reference No.** **GU 1455/3-1**

**Antragstellerin / Applicant** **Dr. Svetlana Gurevich**  
Westfälische Wilhelms-Universität Münster  
Fachbereich 11 - Physik  
Institut für Theoretische Physik  
Münster

**Geschäftszeichen / Reference No.** **HE 2570/7-1**

**Antragsteller / Applicant** **Professor Dr. Andreas Heuer**  
Westfälische Wilhelms-Universität Münster  
Institut für Physikalische Chemie  
Münster

**Beantragte Mittel / Budget Request:**

	Beantragt / Requested		
<b>Dauer [Monate] / Duration [Months]</b>	<b>36</b>		
<b>GU 1455/3-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>158.725</b>		
<b>Dr. Svetlana Gurevich</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>145.100</b>
Doktorandin/Doktorand und Vergleichbare 75 % / Doctoral Researcher or Comparable 75 %	1	36	145.100
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>13.625</b>

Publikationen / Publications			1.125
Reisen / Travel			12.500
<b>HE 2570/7-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>158.725</b>		
<b>Professor Dr. Andreas Heuer</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>145.100</b>
Doktorandin/Doktorand und Vergleichbare 75 % / Doctoral Researcher or Comparable 75 %	1	36	145.100
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>13.625</b>
Publikationen / Publications			1.125
Reisen / Travel			12.500
<b>Gesamtsumme / Total</b>	<b>317.450</b>		

**Bewilligungen der letzten vier Jahre zu anderen Projekten (seit 12.10.2014 ) /  
DFG Project Funding Over the Last Four Years (since 12.10.2014):**

<b>Datum / Date Gz / Ref</b>		<b>Euro</b>
	<b>Dr. Svetlana Gurevich</b>	<b>382.350</b>
07.11.2016 GU 1455/1-1	Paketantrag: Einzelantrag / Package Proposals: Individual Proposal Strukturbildung in dynamischen selbstanordnenden Systemen / Pattern formation in dynamic self-assembly systems	210.050
03.06.2016 INST 211/621-2	SFB/Transregio: Einzelantrag / CRC/Transregio: Individual Proposal Aufdampfen von Molekülen auf vorstrukturierte Substrate - von mikroskopischen zu mesoskopischen Modellen / Vapour deposition of molecules on pre-structured substrates - from microscopic to mesoscopic models	108.400
03.06.2016 INST 211/451-3	SFB/Transregio: Einzelantrag / CRC/Transregio: Individual Proposal Strukturbildung in dynamischen selbstanordnenden Systemen / Pattern formation in dynamic self-assembly systems	63.900
	<b>Professor Dr. Andreas Heuer</b>	<b>2.422.050</b>
01.12.2017 INST 211/522-3	Sonderforschungsbereich: Serviceprojekt / Collaborative Research Centres: Service Project Computational Chemistry (Theorie und Modellierung der Kooperativität in chemischen Systemen) / Computational Chemistry (Theory and Modeling of Cooperativity in Chemical Systems)	1.449.800
01.12.2017 INST 211/807-1	Sonderforschungsbereich: Einzelantrag / Collaborative Research Centres: Individual Proposal Die Rolle von Protein-Lipid-Wechselwirkungen bei der Protein-Segregation in der Hefe-Plasmamembran / The role of protein-lipid interactions for protein segregation in the yeast plasma membrane	640.700
07.11.2016 HE 2570/3-1	Paketantrag: Einzelantrag / Package Proposals: Individual Proposal Selbstorganisation molekularer Schichten in 3D mit Hilfe vorgegebener Gerüste / Assembly of layers in 3D with guiding frames	171.950
03.06.2016 INST 211/463-3	SFB/Transregio: Einzelantrag / CRC/Transregio: Individual Proposal Anordnung von molekularen Schichten bei vorgegebenem molekularen Gerüst in 3D / Assembly of layers in 3D with guiding frames	51.200

Datum / Date Gz / Ref		Euro
03.06.2016 INST 211/621-2	SFB/Transregio: Einzelantrag / CRC/Transregio: Individual Proposal Aufdampfen von Molekülen auf vorstrukturierte Substrate - von mikroskopischen zu mesoskopischen Modellen / Vapour deposition of molecules on pre-structured substrates - from microscopic to mesoscopic models	108.400

## Zusammenfassung

In diesem Projekt werden die statischen und dynamischen Eigenschaften einer einfachen Flüssigkeit auf einem schaltbaren vorstrukturierten Substrat aus einer numerischen / theoretischen Perspektive in engem Kontakt zu den experimentellen und theoretischen Projekten des SPP untersucht. Während das Benetzungsverhalten auf homogenen und vorstrukturierten Substraten gut verstanden ist, soll in diesem Projekt ein umfassendes Verständnis der resultierenden Nichtgleichgewichtseffekte beim Schalten erhalten werden. Dabei spielen auch die neuen externen Zeitskalen des periodischen Schaltens eine wichtige Rolle. Besondere Effekte werden z.B. für die Benetzung nahegelegener hydrophiler Streifen erwartet, die sowohl einfache benetzende Tropfen als auch Brückenstrukturen ausbilden.

Für ein umfassendes Verständnis des Systems ist es von zentraler Bedeutung, unterschiedlicher Längen- und Zeitskalen zu betrachten. Um beispielsweise den Schaltprozess selbst zu berücksichtigen, ist eine mikroskopische Analyse erforderlich. Dazu wird das Schalten von photoaktiven Molekülen und deren Einfluss auf die Flüssigkeit über Moleküldynamiksimulationen (MD) explizit untersucht. Im Gegensatz dazu ist für die Untersuchung des Langzeitverhaltens ein Kontinuumsansatz am besten geeignet, um z.B. das dynamische Verhalten und die auftretenden Instabilitäten zu analysieren. Für spezifische Fragestellungen werden auf Basis der Expertise der beiden PIs Kraftfeld- und Gittergas-Simulationen einerseits sowie mesoskopische Dünnschichtmodelle zur Untersuchung der Gradientendynamik an Grenzflächen-Hamiltonians andererseits durchgeführt.

Um eine quantitative Anpassung zwischen diesen Ansätzen zu erreichen, verwenden wir spezielle Multiskalen-Techniken, um die Parameter, die für die mesoskopische Dünnschichtgleichung übergeben werden, zu bestimmen. Das umfasst die Grenzflächenspannung sowie das Benetzungspotential. Für MD-Simulationen kann die Information direkt aus der Berechnung geeigneter Viriale erhalten werden, wohingegen für den Fall eines Gittergasmodells eine verbrückende mikroskopische Dichtefunktionaltheorie verwendet wird, wie sie kürzlich in einer Zusammenarbeit beider PIs entwickelt wurde. Die aufeinander abgestimmte Modellhierarchie soll es uns ermöglichen, entscheidende Aspekte von Nichtgleichgewichtsdepositions- und Umlagerungsprozessen der Moleküle über mehrere Längen- und Zeitskalen hinweg quantitativ zu verstehen.

Während dieser drei Jahre möchten wir (i) umfassende Erfahrungen mit den relevanten theoretischen Werkzeugen gewinnen, (ii) ein gutes Verständnis von Nichtgleichgewichtseffekten als Folge der Schaltprozesse erhalten und (iii) in enger Zusammenarbeit mit den entsprechenden experimentellen Gruppen der SPP diese Ergebnisse auf die spezifischen Interaktionsparameter ihrer Experimente anwenden (z. B. für gegebene Oberflächenstruktur und Kontaktwinkel).

## Summary

In this project we will study the static and dynamic properties of a simple liquid on a switchable pre-structured substrate from a numerical/theoretical perspective in close contact to the both experimental and theoretical projects

of the SPP. Whereas the wetting behavior on homogeneous and pre-structured substrates is well-understood, we aim to obtain a thorough understanding of the resulting non-equilibrium effects upon switching, involving new time-scales as in the case of periodic switching. Prominent effects are expected, e.g., for the wetting of close-by hydrophilic stripes, involving liquid bulge as well as bridge configurations.

For a comprehensive understanding of the system in question we are convinced that an analysis of different length- and time-scales is of utmost importance. For example, in order to take into account the switching process itself, a microscopic analysis is required and, indeed, we will explicitly study the switching of photoactive molecules via Molecular Dynamics simulations (MD) and its impact on the liquid. In contrast, to study the long-time behavior to new equilibrium states, a continuum perspective will be most appropriate where, e.g., the dynamical behavior and arising instabilities can best be analyzed. For specific questions, and fully related to the scientific expertise of the two PIs, we will combine force field and lattice gas simulations, on the one hand, and mesoscopic thin film models studying the gradient dynamics on interface Hamiltonians, on the other hand.

In order to have a quantitative matching among these approaches, we employ specific multiscale bridging techniques to perform the parameter passing to the mesoscopic thin film approach, i.e. the estimation of the tension and the wetting potential. For MD simulations, the information can be directly obtained from the calculation of appropriate virials whereas for the case of a LGM, a bridging microscopic Density Functional Theory will be employed, as developed in a recent collaboration of both PIs. The matched hierarchy of models shall allow us to quantitatively understand crucial aspects of non-equilibrium deposition and rearrangement processes of the molecules across several length and time scales.

During this three year period we aim (i) to gain full experience with the relevant theoretical tools, (ii) to obtain a good physical understanding of non-equilibrium effects upon switching, and (iii) to apply these results, in close collaboration with the corresponding experimental groups of the SPP, to the specific interaction parameters of their experiments (e.g., for given pre-structuring and contact angles).

**Bemerkung der  
Geschäftsstelle /  
Comment by the DFG  
Head Office**

Es liegt ein befristeter Arbeitsvertrag vor, der am 01.10.2022 ausläuft.  
Eine Weiterbeschäftigung ist beabsichtigt.  
The applicant's fixed-term contract will expire on 01.10.2022.  
A continued employment is intended.

**Antragstyp** Schwerpunktprogramm - Einzelantrag - Neuantrag

**Type of Proposal** Priority Programme - Individual Proposal - New Proposal

**Antragsdauer / Requested Duration** 36 Monate / 36 months

**Fach** Organische Molekülchemie - Synthese, Charakterisierung, Theorie und Modellierung

**Subject Area** Organic Molecular Chemistry

**Rahmenprojekt / Framework Project** SPP 2171

**Titel** **Dynamische Benetzbarkeit von schaltbaren Oberflächenbeschichtungen**

**Title** **Dynamic Wetting of Switchable Surface Coatings**

**Geschäftszeichen / Reference No.** **HA 2549/23-1**

**Antragsteller / Applicant** **Professor Dr. Rainer Haag**  
Freie Universität Berlin  
Institut für Chemie und Biochemie  
Abteilung Organische Chemie  
Berlin

**Beantragte Mittel / Budget Request:**

	Beantragt / Requested		
<b>Dauer [Monate] / Duration [Months]</b>	<b>36</b>		
<b>HA 2549/23-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>189.050</b>		
<b>Professor Dr. Rainer Haag</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>145.100</b>
Doktorandin/Doktorand und Vergleichbare 75 % / Doctoral Researcher or Comparable 75 %	1	36	145.100
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>43.950</b>
Geräte bis 10.000 Euro, Software und Verbrauchsmaterial / Equipment up to EUR 10,000, Software and Consumables			36.000
Publikationen / Publications			2.250
Reisen / Travel			5.700

**Bewilligungen der letzten vier Jahre zu anderen Projekten (seit 11.10.2014 ) / DFG Project Funding Over the Last Four Years (since 11.10.2014):**

Datum / Date Gz / Ref		Euro
	<b>Professor Dr. Rainer Haag</b>	<b>4.581.300</b>
11.06.2018 HA 2549/21-1	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal Anpassung von nanocarrier-basierten Drug-Delivery-Systemen an den Redox-Zustand und Thiol-Gradienten gesunder und erkrankter Haut / Adaption of nanocarrier-based drug delivery systems to the redox-state and thiol gradients of healthy and diseased skin	202.950
13.12.2017 HA 2549/20-1	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal EGFR-gerichtete Polyglycerin-ummantelte multifunktionale mizellare Wirkstoffkonjugate für die Präzisions-Krebs-Chemotherapie / EGFR-targeted polyglycerol-shelled multifunctional micellar drug conjugates for precision cancer chemotherapy	329.800
09.06.2017 INST 130/918-2	Sonderforschungsbereich: Einzelantrag / Collaborative Research Centres: Individual Proposal Responsive Nanogele zur Wirkstofffreisetzung / Environmentally responsive nanogels for drug delivery	128.800
09.06.2017 INST 130/916-2	Sonderforschungsbereich: Einzelantrag / Collaborative Research Centres: Individual Proposal Kern-Multischalen Nanocarrier zur dermalen Wirkstofffreisetzung / Core-multishell nanocarriers for drug delivery into skin	109.300
20.02.2017 HA 2549/19-1	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal Chemo-enzymatische Synthese multivalenter dendritischer Architekturen für die Bekämpfung von neurodegenerativen Erkrankungen / Chemo-enzymatic synthesis of multivalent dendritic architectures for the control of neurodegenerative disorders	18.300
16.12.2016 HA 2549/15-2	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal Core-Facility BioSupraMol, Gerätezentrum und Kompetenznetzwerk / Core-Facility BioSupraMol, Core-Facility and competence network	347.000
30.05.2016 HA 2549/18-1	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal Hochaufgelöste Strukturcharakterisierung und Stabilisierung supramolekularer Architekturen durch Verwendung neuer perfluoralkyl-funktionalisierter Dendron-Amphiphile mit Farbstoffspacern als optischen Sonden / High resolution structure characterisation and stabilisation of supramolecular architectures using novel perfluoralkyl functionalised dendron-amphiphiles with dye spacers as optical probes	198.750
24.11.2015 INST 130/732-3	Sonderforschungsbereich: Einzelantrag / Collaborative Research Centres: Individual Proposal Projektübergreifend genutzte analytische Methoden im SFB 765 zur quantitativen Aufklärung multivalenter Wechselwirkungen / Core service facilities for the SFB 765: NMR spectroscopy, surface plasmon resonance, quartz crystal microbalance, calorimetry, and mass spectrometry	693.900
24.11.2015 INST 130/731-3	Sonderforschungsbereich: Einzelantrag / Collaborative Research Centres: Individual Proposal SFB-Geschäftsstelle / SFB administration	1.896.200
24.11.2015 INST 130/717-3	Sonderforschungsbereich: Einzelantrag / Collaborative Research Centres: Individual Proposal Synthese von biofunktionalen Gerüstarchitekturen für multivalente Wechselwirkungen / Syntheses of biofunctional scaffold architectures for multivalent interactions	656.300

#### Wissenschaftliche Preise / Scientific Prizes:

Datum / Date		Euro
	<b>Professor Dr. Rainer Haag</b>	<b>16.000</b>

Datum / Date		Euro
01.01.2002	Heinz Maier-Leibnitz-Preis / Heinz Maier-Leibnitz Prize	16.000

### **Zusammenfassung**

Die hier vorgeschlagenen schaltbaren Oberflächenbeschichtungen bieten eine einzigartige Möglichkeit, die Oberflächenbenetzbarkeit über externe Stimuli dynamisch zu manipulieren. Sowohl die Oberflächenchemie als auch die Oberflächenmorphologie (z. B. kontrollierte Oberflächen-roughness) sind für die Benetzungs- und Oberflächeneigenschaften verantwortlich. Um das dynamische Benetzungsverhalten auf der Materialoberfläche besser verstehen und steuern zu können, werden die universelle schaltbare Oberflächenchemie (Polymere mit lichtresponsiven Spiropyranen) mit einer maßgeschneiderte Oberflächenmorphologie (Roughness, Struktur, Muster usw.) kombiniert, um neue lichtschaltbare polymere Oberflächenbeschichtungen zu erzeugen. In Zusammenarbeit mit experimentellen und theoretischen Physikern, die ebenfalls im SPP 2171 arbeiten, sollen die zugrundeliegenden physikalischen und chemischen Prozesse detailliert untersucht werden.

### **Summary**

The here proposed switchable surface coatings provide a unique opportunity to dynamically manipulate the surface wettability via external stimuli. Both the surface chemistry and surface morphology (e.g., controlled surface roughness) are responsible for surface wetting properties. To further understand and control the dynamic wetting behavior on material surfaces, we combine the universal switchable surface chemistry (polymers with light responsive spiropyran) with a tailored surface morphology (roughness, structure, patterns, etc.) to generate new light-responsive polymer surface coatings. In collaboration with experimental and theoretical physics groups within the SPP 2171, the physical and chemical processes involved in the switchable surface wettability will be studied in detail.

<b>Antragstyp</b>	Schwerpunktprogramm - Einzelantrag - Neuantrag
<b>Type of Proposal</b>	Priority Programme - Individual Proposal - New Proposal
<b>Antragsdauer / Requested Duration</b>	36 Monate / 36 months
<b>Fach</b>	Festkörper- und Oberflächenchemie, Materialsynthese
<b>Subject Area</b>	Solid State and Surface Chemistry, Material Synthesis
<b>Rahmenprojekt / Framework Project</b>	SPP 2171
<b>Titel</b>	<b>Dynamisches Benetzungsverhalten bei Flexible und abstimmbare Fest-Flüssig-Grenzfläche von zweidimensional Materialien</b>
<b>Title</b>	<b>Dynamic wetting behaviour at flexible and tuneable two-dimensional material interfaces</b>
<b>Geschäftszeichen / Reference No.</b>	<b>HA 2549/24-1</b>
<b>Antragsteller / Applicant</b>	<b>Professor Dr. Rainer Haag</b> Freie Universität Berlin Institut für Chemie und Biochemie Abteilung Organische Chemie Berlin
<b>Geschäftszeichen / Reference No.</b>	<b>PA 3092/2-1</b>
<b>Antragsteller / Applicant</b>	<b>Dr. Vivek Pachauri, Ph.D.</b> Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen Institut für Werkstoffe der Elektrotechnik 1 (IWE) Lehrstuhl 1- Mikrostrukturintegration Aachen
<b>Mitverantwortlicher / Co-Applicant</b>	Professor Dr. Mohsen Adeli, Ph.D. Freie Universität Berlin Fachbereich Biologie, Chemie, Pharmazie Institut für Chemie und Biochemie Berlin
<b>Kooperations- partnerinnen und Kooperations- partner / Cooperation Partners</b>	Professor Dr. Hans-Jürgen Butt Max-Planck-Institut für Polymerforschung Mainz  Professor Dr. Christian Holm Universität Stuttgart Fachbereich Physik Institut für Computerphysik (ICP) Stuttgart



Professor Dr. Uwe Thiele  
Westfälische Wilhelms-Universität Münster  
Fachbereich 11 - Physik  
Institut für Theoretische Physik  
Münster

Professorin Dr. Doris Vollmer  
Max-Planck-Institut für Polymerforschung  
Mainz

**Beantragte Mittel / Budget Request:**

	<b>Beantragt / Requested</b>		
<b>Dauer [Monate] / Duration [Months]</b>	<b>36</b>		
<b>HA 2549/24-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>210.100</b>		
<b>Professor Dr. Rainer Haag</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>145.100</b>
Doktorandin/Doktorand und Vergleichbare 75 % / Doctoral Researcher or Comparable 75 %	1	36	145.100
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>65.000</b>
Geräte bis 10.000 Euro, Software und Verbrauchsmaterial / Equipment up to EUR 10,000, Software and Consumables			46.000
Reisen / Travel			13.000
Sonstiges / Other			6.000
<b>PA 3092/2-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>272.400</b>		
<b>Dr. Vivek Pachauri, Ph.D.</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>199.400</b>
Doktorandin/Doktorand und Vergleichbare 100 % / Doctoral Researcher or Comparable 100 %	1	36	193.500
Hilfskräfte / Support Staff			5.900
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>73.000</b>
Geräte bis 10.000 Euro, Software und Verbrauchsmaterial / Equipment up to EUR 10,000, Software and Consumables			40.000
Publikationen / Publications			1.000
Reisen / Travel			12.000
Sonstiges / Other			20.000
<b>Gesamtsumme / Total</b>	<b>482.500</b>		

**Bewilligungen der letzten vier Jahre zu anderen Projekten (seit 15.10.2014 ) /  
DFG Project Funding Over the Last Four Years (since 15.10.2014):**

Datum / Date Gz / Ref		Euro
	<b>Professor Dr. Rainer Haag</b>	<b>4.581.300</b>
11.06.2018 HA 2549/21-1	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal Anpassung von nanocarrier-basierten Drug-Delivery-Systemen an den Redox-Zustand und Thiol-Gradienten gesunder und erkrankter Haut / Adaption of nanocarrier-based drug delivery systems to the redox-state and thiol gradients of healthy and diseased skin	202.950
13.12.2017 HA 2549/20-1	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal EGFR-gerichtete Polyglycerin-ummantelte multifunktionale mizellare Wirkstoffkonjugate für die Präzisions-Krebs-Chemotherapie / EGFR-targeted polyglycerol-shelled multifunctional micellar drug conjugates for precision cancer chemotherapy	329.800
09.06.2017 INST 130/916-2	Sonderforschungsbereich: Einzelantrag / Collaborative Research Centres: Individual Proposal Kern-Multischalen Nanocarrier zur dermalen Wirkstofffreisetzung / Core-multishell nanocarriers for drug delivery into skin	109.300
09.06.2017 INST 130/918-2	Sonderforschungsbereich: Einzelantrag / Collaborative Research Centres: Individual Proposal Responsive Nanogele zur Wirkstofffreisetzung / Environmentally responsive nanogels for drug delivery	128.800
20.02.2017 HA 2549/19-1	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal Chemo-enzymatische Synthese multivalenter dendritischer Architekturen für die Bekämpfung von neurodegenerativen Erkrankungen / Chemo-enzymatic synthesis of multivalent dendritic architectures for the control of neurodegenerative disorders	18.300
16.12.2016 HA 2549/15-2	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal Core-Facility BioSupraMol, Gerätezentrum und Kompetenznetzwerk / Core-Facility BioSupraMol, Core-Facility and competence network	347.000
30.05.2016 HA 2549/18-1	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal Hochaufgelöste Strukturcharakterisierung und Stabilisierung supramolekularer Architekturen durch Verwendung neuer perfluoralkyl-funktionalisierter Dendron-Amphiphile mit Farbstoffspacern als optischen Sonden / High resolution structure characterisation and stabilisation of supramolecular architectures using novel perfluoralkyl functionalised dendron-amphiphiles with dye spacers as optical probes	198.750
24.11.2015 INST 130/717-3	Sonderforschungsbereich: Einzelantrag / Collaborative Research Centres: Individual Proposal Synthese von biofunktionalen Gerüstarchitekturen für multivalente Wechselwirkungen / Syntheses of biofunctional scaffold architectures for multivalent interactions	656.300
24.11.2015 INST 130/731-3	Sonderforschungsbereich: Einzelantrag / Collaborative Research Centres: Individual Proposal SFB-Geschäftsstelle / SFB administration	1.896.200
24.11.2015 INST 130/732-3	Sonderforschungsbereich: Einzelantrag / Collaborative Research Centres: Individual Proposal Projektübergreifend genutzte analytische Methoden im SFB 765 zur quantitativen Aufklärung multivalenter Wechselwirkungen / Core service facilities for the SFB 765: NMR spectroscopy, surface plasmon resonance, quartz crystal microbalance, calorimetry, and mass spectrometry	693.900

#### Wissenschaftliche Preise / Scientific Prizes:

Datum / Date		Euro
	<b>Professor Dr. Rainer Haag</b>	<b>16.000</b>

Datum / Date		Euro
01.01.2002	Heinz Maier-Leibnitz-Preis / Heinz Maier-Leibnitz Prize	16.000

## Zusammenfassung

Schichtmaterialien wie Graphen bieten die einzigartige Möglichkeit, Materialeigenschaften in zwei Dimensionen (2D) für zukünftige Schlüsseltechnologien zu untersuchen. Die Benetzung von 2D-Oberflächen ist ein fundamentales Forschungsgebiet, das für die Nutzung von 2D-Materialien in Sensoren, Energiespeichern, Katalyse-Systemen, Filter-Membranen usw. von zentraler Bedeutung ist. Das Verständnis des Benetzungsverhaltens dieser 2D-Materialien erfordert eine detaillierte Untersuchung der physikalisch-chemischen Eigenschaften, die durch Materialeigenschaften der Oberflächen und deren Abhängigkeit von externen Parametern wie pH, Feuchtigkeit, Temperatur und elektromagnetischen Feldern beeinflusst werden. Aufgrund des komplexen, dynamischen Zusammenspiels dieser Parameter ist ein einheitliches Verständnis des Benetzungsverhaltens an 2D-Grenzflächen fundamental. Dieser Projektvorschlag zielt darauf ab, einen experimentellen Rahmen für die Untersuchung des Benetzungsverhaltens von 2D-Oberflächen zu schaffen und die gewonnenen Erkenntnisse für weitere Fortschritte in diesem modernen Forschungsgebiet einzusetzen. Die Einflüsse der 2D-Materialien, der Schichtdicken, der chemischen Zusammensetzung und der generellen Oberflächeneigenschaften zum Benetzungsverhalten, werden im Projektkonsortium mit modernen Nanofabrikationsmethoden und mittels detaillierter Oberflächencharakterisierung untersucht. Darüber hinaus wird das Benetzungsverhalten von 2D Material-Polymer Verbundstoffen und deren Biorezeptor-Grenzflächen in Nano- bis Mikro-Dimensionen untersucht. Die Verwendung von 2D-Oberflächen in hochempfindlichen Sensoren verlangt eine reproduzierbare Benetzung. Die Kontrolle von biomolekularen Wechselwirkungen an diesen Oberflächen ist eine universelle Herausforderung, da im nano-skaligen Bereich mehrere Parameter die Benetzung der 2D-Oberflächen beeinflussen. Dieser Projektantrag zielt darauf ab, intelligente 2D-Materialien mit einer selektiven Einstellung ihres Benetzungsverhaltens zu realisieren und fundamental zu verstehen. Es sollen robuste Protokolle entwickelt werden, um nanostrukturierte 2D-Oberflächen mit multifunktionalen Gruppen (MFGs) zu erzeugen. Die MFGs sollen als "Anker" für biologische Rezeptormoleküle fungieren und die dendritischen Polymere mit abstimmbaren physikochemischen Eigenschaften sollen eine selektive und spezifische Bindung von Zielmolekülen erlauben. Eine erhöhte Benetzbarkeit solcher "2D-Inseln" auf 2D Materialien ermöglicht hochspezifische, räumlich lokalisierte Bindungen zwischen Rezeptor-Analyt-Paaren und hilft, nicht-spezifische Adsorptionen zu minimieren. Darüber hinaus soll die Positionierung von Rezeptoren entfernt von den 2D-Oberflächen helfen, das Debye-Screening in Flüssigkeiten mit hoher Ionenstärke zu unterdrücken und so eine hochempfindliche Detektion von Biomolekülen erlauben. Die benetzungsoptimierten 2D-Oberflächen werden letztendlich in einem Bioassay zum Nachweis neuartiger Biomarker für Krebserkrankungen validiert.

## Summary

Layered materials such as graphene present a unique opportunity to study discrete material properties in two-dimensions (2D), which are fundamental to the development of future key technologies. Wetting of 2D surfaces is one of such key topics, which is central to the implementation of 2D materials as sensors, energy storage, catalysis, smart membranes etc. Understanding of the wetting behaviour of 2D materials demands special attention to their versatile mechanical (flexible) and physicochemical characteristics, which are influenced by factors inherent to the material surface and its dependence on external parameters such as pH, humidity, temperature and

electromagnetic fields. Due to the complex dynamic interplay of these parameters, a unified understanding of the wetting behaviour at 2D interfaces is fundamental.

This project aims to establish an excellent experimental framework to study the wetting behaviour of 2D material based solid-liquid interfaces and to communicate experimental findings for further progress in this modern field. The influence of substrates, layer-thickness, chemical composition and surface properties originating from nanoscale features of the 2D-materials will be characterized with state-of-the-art nanofabrication and surface characterization tools available in the project consortium. In addition, wetting behaviour of 2D-on-polymer surfaces and their bio-specific transducer interfaces will be studied from nano-to-micro dimensions.

Control of wetting properties on 2D material surfaces have significant consequences in their usage as highly-sensitive electrical transducers, where realization of biomolecular interactions at surfaces remains a universal challenge due to various factors at nanoscale affecting the wetting properties of the 2D surfaces. This proposal aims to construct and to understand smart 2D interfaces with selective tuning of their wetting behaviour. Sophisticated surface modification approaches will be developed rendering nanostructured 2D-material surfaces with multipurpose functional groups (MFGs). The MFGs will support selective linking of dendritic polymers with tuneable physicochemical characteristics and will act as 'anchors' for bio-specific receptors. Increased wettability of such graphene-based '2D islands' will allow highly specific, localized interactions between receptor-analyte pairs and help to minimize non-specific adsorption. Positioning biomolecules away from the 2D-material surface using MFG-dendritic polymers will also suppress ionic-shielding in liquids with high ionic-strength towards electronic biomolecule detection beyond Debye-screening of charges. The wetting-engineered 2D-material interfaces will be validated in a relevant bioassay for efficient detection of novel cancer disease biomarkers.

**Bemerkung der  
Geschäftsstelle /  
Comment by the DFG  
Head Office**

Es liegt ein befristeter Arbeitsvertrag vor, der am 01.07.2021 ausläuft.  
The applicant's fixed-term contract will expire on 01.07.2021 .

**Antragstyp** Schwerpunktprogramm - Einzelantrag - Neuantrag

**Type of Proposal** Priority Programme - Individual Proposal - New Proposal

**Antragsdauer / Requested Duration** 36 Monate / 36 months

**Fach** Strömungsmechanik

**Subject Area** Fluid Mechanics

**Rahmenprojekt / Framework Project** SPP 2171

**Titel** Experimentelle und numerische Untersuchung der Benetzung auf imprägnierten Oberflächen: Die Rolle von Surfactants

**Title** Experimental and numerical study of wetting on liquid-infused surfaces: the role of surfactants

**Geschäftszeichen / Reference No.** HA 2696/46-1

**Antragsteller / Applicant** Professor Dr. Steffen Hardt  
Technische Universität Darmstadt  
Center of Smart Interfaces (CSI)  
Darmstadt

**Geschäftszeichen / Reference No.** RE 1461/10-1

**Antragsteller / Applicant** Professor Dr. Arnold Reusken  
Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen  
Institut für Geometrie und Praktische Mathematik  
Lehrstuhl für Numerische Mathematik  
Aachen

**Beantragte Mittel / Budget Request:**

	Beantragt / Requested		
<b>Dauer [Monate] / Duration [Months]</b>	<b>36</b>		
<b>HA 2696/46-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>253.520</b>		
<b>Professor Dr. Steffen Hardt</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>219.570</b>
Postdoktorandin/Postdoktorand und Vergleichbare 100 % / Postdoctoral Researcher or Comparable 100 %	1	36	209.700
Hilfskräfte / Support Staff			9.870

<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>33.950</b>
Geräte bis 10.000 Euro, Software und Verbrauchsmaterial / Equipment up to EUR 10,000, Software and Consumables			22.050
Reisen / Travel			11.900
<b>RE 1461/10-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>162.160</b>		
<b>Professor Dr. Arnold Reusken</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>153.560</b>
Doktorandin/Doktorand und Vergleichbare 75 % / Doctoral Researcher or Comparable 75 %	1	36	145.100
Hilfskräfte / Support Staff			8.460
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>8.600</b>
Reisen / Travel			8.600
<b>Gesamtsumme / Total</b>	<b>415.680</b>		

**Bewilligungen der letzten vier Jahre zu anderen Projekten (seit 13.10.2014 ) /  
DFG Project Funding Over the Last Four Years (since 13.10.2014):**

<b>Datum / Date Gz / Ref</b>		<b>Euro</b>
	<b>Professor Dr. Steffen Hardt</b>	<b>1.991.545</b>
10.06.2016 HA 2696/43-2	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal Gekoppelte Dynamik eines dünnen flüssigen Films mit hydrodynamischen Instabilitäten in einer benachbarten Fluidschicht / Coupled dynamics of a thin lubricating film with hydrodynamic instabilities in a conjugated liquid layer	194.245
01.06.2016 INST 163/488-1	Sonderforschungsbereich: Einzelantrag / Collaborative Research Centres: Individual Proposal Experimentelle Untersuchungen zur Koaleszenz und zum Aufriss von Tropfen auf festen Oberflächen - Leitkonfiguration Tropfen / Experimental Investigation of Coalescence and Breakup of Droplets on Solid Surfaces - Generic Configuration Sessile Drop	985.800
01.06.2016 INST 163/505-1	Sonderforschungsbereich: Einzelantrag / Collaborative Research Centres: Individual Proposal Verstärkung des elektroosmotischen Flusses auf superhydrophoben Oberflächen / Amplification of the Electroosmotic Flow on Superhydrophobic Surfaces	380.000
15.02.2016 HA 2696/41-1	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal Modellierung und numerische Methoden für Nanopartikel in einer Gasphase / Modelling and numerical methods for nanoparticles in a gas phase	171.300
09.02.2016 HA 2696/42-1	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal Nichtgleichgewichtseffekte in elektrischen Doppelschichten in engen Kanälen / Non-equilibrium electric double layers in narrow channels	260.200

**Zusammenfassung**

Das beantragte Vorhaben hat ein umfassendes Verständnis der dynamischen Besetzung auf imprägnierten Oberflächen zum Ziel. Ein besonderer Schwerpunkt liegt dabei auf der Rolle von Surfactants. Es kommen experimentelle und numerische Methoden in einem engen Wechselspiel zum Einsatz. Die Experimente beruhen auf der Abbildung der

Fluoreszenz von Surfactants bzw. der Abbildung von im Öl gelösten Fluoreszenzfarbstoffen durch einen Lichtschnittoptik. Die erste Stufe des Projekts besteht in der Untersuchung der Dynamik des Tropfentransports auf einer imprägnierten Oberfläche ohne Surfactants. In der Folge werden die Effekte von oberflächenaktiven Substanzen untersucht. Dabei wird die Wirkung von Surfactantmolekülen erforscht, aber auch die Ausbreitung des Ölfilms auf der Tropfenoberfläche. Darüber hinaus sollen grundlegende Untersuchungen zum Tropfentransport auf Oberflächen durchgeführt werden, die mit zwei unterschiedlichen Ölen imprägniert wurden. Zu den herausforderndsten Charakteristika des vorliegenden Strömungsproblems gehören eine sich bewegende Kontaktlinie, der Transport von Surfactants und der sehr dünne Ölfilm. Außerdem besteht eine starke nichtlineare Kopplung zwischen dem Surfactanttransport und Fluidodynamik. Somit ergibt sich eine hochkomplexe Simulationsaufgabe, deren Lösung moderne, zum Teil neu zu entwickelnde numerische Verfahren erfordert. In enger interdisziplinärer Zusammenarbeit der beiden Antragsteller werden dazu Modellierungs- und Validierungsaufgaben bearbeitet. In der Anwendungsperspektive soll die Grundlage dafür gelegt werden, auf der Basis von imprägnierten Oberflächen adaptive und schaltbare Oberflächen zu schaffen.

## Summary

The proposed project aims for a comprehensive understanding of the dynamic wetting of Liquid-infused Surfaces (LISs). A particular focus is on the role of surfactants. Experimental and numerical methods are employed in a close interplay. The experiments are based on the imaging of the fluorescence of surfactants or the imaging of fluorescent dyes dissolved in the oil phase using a light-sheet optics. The first stage of the project consists of studying the dynamics of drop transport on a LIS without surfactants. Subsequently, the effects of surface-active substances are examined. This means investigating the effect of surfactant molecules, but also the spreading of the oil film on the surface of the droplets. In addition, basic investigations on the transport of droplets on surfaces impregnated with two different oils are to be carried out. The most challenging characteristics of the present flow problem include a moving contact line, the transport of surfactants, and the very thin oil film. There is also a strong nonlinear coupling between surfactant transport and fluid dynamics. This results in a highly complex simulation task, the solution of which requires modern, in some cases newly developed numerical methods. In close interdisciplinary cooperation between the two applicants, modeling and validation tasks are carried out. In the application perspective, the foundations should be laid for creating adaptive and switchable interfaces on the basis of LISs.

**Antragstyp** Schwerpunktprogramm - Einzelantrag - Neuantrag

**Type of Proposal** Priority Programme - Individual Proposal - New Proposal

**Antragsdauer / Requested Duration** 36 Monate / 36 months

**Fach** Theoretische Physik der kondensierten Materie

**Subject Area** Theoretical Condensed Matter Physics

**Rahmenprojekt / Framework Project** SPP 2171

**Titel** **Adaptive und schaltbare Grenzflächen basierend auf strukturierten Kolloiden**

**Title** **Colloidal assembly as a tool for adaptive and switchable interfaces**

**Geschäftszeichen / Reference No.** **HA 4382/11-1**

**Antragsteller / Applicant** **Professor Dr. Jens Harting**  
Forschungszentrum Jülich GmbH  
Helmholtz-Institut Erlangen-Nürnberg (HI ERN)  
Abteilung RU-C: Dynamics of complex fluids and interfaces  
Nürnberg

**Beantragte Mittel / Budget Request:**

	Beantragt / Requested		
<b>Dauer [Monate] / Duration [Months]</b>	<b>36</b>		
<b>HA 4382/11-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>183.350</b>		
<b>Professor Dr. Jens Harting</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>163.100</b>
Doktorandin/Doktorand und Vergleichbare 75 % / Doctoral Researcher or Comparable 75 %	1	36	145.100
Hilfskräfte / Support Staff			18.000
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>20.250</b>
Geräte bis 10.000 Euro, Software und Verbrauchsmaterial / Equipment up to EUR 10,000, Software and Consumables			3.000
Publikationen / Publications			2.250
Reisen / Travel			15.000

**Bewilligungen der letzten vier Jahre zu anderen Projekten (seit 15.10.2014 ) /**



## DFG Project Funding Over the Last Four Years (since 15.10.2014):

Datum / Date Gz / Ref		Euro
	<b>Professor Dr. Jens Harting</b>	<b>489.350</b>
31.08.2017 HA 4382/7-1	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal Agglomerationsverhalten von stationären Wirbelschichten bei der Vergasung biogener Brennstoffe mit niedrighschmelzenden Aschen / Ash-induced Agglomeration of bubbling fluidized beds during gasification of biofuels with low melting ashes	271.350
21.04.2017 HA 4382/5-1	Schwerpunktprogramm: Einzelantrag / Priority Programmes: Individual Proposal Magnetokapillare Mikroroboter zum Einfangen und zum Transport von Objekten an Flüssiggrenzflächen / Magnetocapillary microrobots: hunting, harvesting and transporting objects at fluid interfaces	193.600
07.02.2017 HA 4382/6-1	Internationale Zusammenarbeit: Tagungsförderung / International Cooperation: Conference Funding 26. Tagung "Diskrete Simulation in der Fluidodynamik" / 26th Conference on Discrete Simulation of Fluid dynamics	24.400

### Zusammenfassung

Ziel dieses Projekts ist ein fundamentales Verständnis dynamischer Benetzungsvorgänge auf flexiblen, adaptiven oder schaltbaren Substraten. Mit Hilfe von Gitter-Boltzmann Simulationen und einfachen analytischen Modellen wollen wir neuartige Strategien zur Herstellung funktionaler Grenzflächen mit Hilfe von an Flüssigkeitsgrenzflächen angelagerten Kolloiden finden. Hierzu werden wir uns die großen Fortschritte, die die Teilchensynthese in den letzten Jahren verzeichnen konnte, zu Nutze machen. Es ist heute möglich, Partikel mit sehr spezifischen Eigenschaften, wie beispielsweise wohl definierten Formen und Oberflächeneigenschaften oder der Möglichkeit diese Teilchen durch externe Felder zu manipulieren, herzustellen. Ein Beispiel hierfür sind sogenannte Janusteilchen, welche unterschiedliche Eigenschaften an verschiedenen Positionen ihrer Oberfläche aufweisen. Diese Teilchen können sogar so hergestellt werden, dass sie auf externe Stimulationen (Licht, Wärme, externe Felder, etc.) reagieren und ihre Eigenschaften ändern. Lagert man sie an einer Flüssigkeitsgrenzfläche an, können sie vielversprechende Kandidaten zur Herstellung neuartiger adaptiver oder schaltbarer Grenzflächen sein. Zum Beispiel können Janusteilchen mit hydrophoben und hydrophilen Teilen ihrer Oberfläche an einer Grenzfläche rotieren und damit die Benetzungseigenschaften dieser Oberfläche dynamisch verändern. Haben solche Teilchen einen magnetischen Kern, lassen sie sich sogar mit angelegten magnetischen Feldern beeinflussen. Wir werden solche Systeme systematisch mit Hilfe von Computersimulationen untersuchen, wobei der Fokus auf der Adaptivität und Steuerbarkeit der Benetzungseigenschaften liegen soll. Am Beispiel eines Tropfens auf einer flüssig-flüssig Grenzfläche ("flüssiges Substrat"), sowie Grenzflächen, die mit homogenen und

anisotropen Teilchen bestückt sind, werden wir verstehen, welchen Einfluss die Teilchen haben und wie sie mit Hilfe externer Felder "schaltbar" werden.

## Summary

This project will contribute to the fundamental understanding of dynamic wetting and dewetting processes on flexible, adaptive and even switchable substrates by means of lattice Boltzmann simulations and simple analytical models. Our aim is to propose strategies utilizing colloidal assembly at fluid interfaces to generate "substrates" with complex geometrical and wetting properties. We will base on recent advances in the synthesis and control of colloids which led to the availability of particles with highly specific features such as well-defined shapes and surface properties together with the ability to manipulate them by external forces and fields. An example for such particles are patchy particles or Janus particles which depict a variation of their surface properties in dependence on the position. They can even be stimuli responsive or react to external magnetic and electric fields, light or changes in the properties of the surrounding fluids. Attached to a fluid interface, these abilities render them interesting candidates to create interfaces which adopt to the surrounding liquid species or can be switched by means of external fields. For example, due to external forces, a collection of microscale Janus particles with hydrophobic and hydrophilic hemispheres might rotate at the interface and thus dynamically change the macroscale wetting properties of the interface. Alternatively, these particles might be let rotate freely at the interface so that they can optimize the wetting properties by simply minimizing their surface energy. We will investigate such systems systematically by simulating the spreading and wetting dynamics of droplets on various interfaces: A pure liquid interface, an interface covered with particles with defined homogeneous wettability and geometry, and particles with anisotropic shape and wetting properties. At last, we will investigate how to "switch" particle-laden interfaces by means of external fields.

**Antragstyp** Schwerpunktprogramm - Einzelantrag - Neuantrag

**Type of Proposal** Priority Programme - Individual Proposal - New Proposal

**Antragsdauer / Requested Duration** 36 Monate / 36 months

**Fach** Polymermaterialien

**Subject Area** Polymer Materials

**Rahmenprojekt / Framework Project** SPP 2171

**Titel** **Dynamisch kovalente Polymere als schaltbare Substrate für schaltbares Benetzen / Entnetzen**

**Title** **Dynamic covalent polymers as switchable substrates for changing the wetting/dewetting behavior on demand**

**Geschäftszeichen / Reference No.** **HA 6306/9-1**

**Antragsteller / Applicant** **Dr. Martin Hager**  
Friedrich-Schiller-Universität Jena  
Institut für Organische Chemie und Makromolekulare Chemie  
Jena

**Geschäftszeichen / Reference No.** **PO 563/43-1**

**Antragsteller / Applicant** **Professor Dr. Jürgen Popp**  
Universität Jena  
Chemisch-Geowissenschaftliche Fakultät  
Institut für Physikalische Chemie  
Lehrstuhl für Physikalische Chemie II  
Jena

**Beantragte Mittel / Budget Request:**

	Beantragt / Requested		
<b>Dauer [Monate] / Duration [Months]</b>	<b>36</b>		
<b>HA 6306/9-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>132.195</b>		
<b>Dr. Martin Hager</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>109.645</b>
Postdoktorandin/Postdoktorand und Vergleichbare 50 % / Postdoctoral Researcher or Comparable 50 %	1	36	104.900

Hilfskräfte / Support Staff			4.745
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>22.550</b>
Geräte bis 10.000 Euro, Software und Verbrauchsmaterial / Equipment up to EUR 10,000, Software and Consumables			18.000
Reisen / Travel			4.550
<b>PO 563/43-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>			<b>131.350</b>
<b>Professor Dr. Jürgen Popp</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>104.900</b>
Postdoktorandin/Postdoktorand und Vergleichbare 50 % / Postdoctoral Researcher or Comparable 50 %	1	36	104.900
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>26.450</b>
Geräte bis 10.000 Euro, Software und Verbrauchsmaterial / Equipment up to EUR 10,000, Software and Consumables			21.000
Publikationen / Publications			2.250
Reisen / Travel			3.200
<b>Gesamtsumme / Total</b>			<b>263.545</b>

**Bewilligungen der letzten vier Jahre zu anderen Projekten (seit 15.10.2014 ) /  
DFG Project Funding Over the Last Four Years (since 15.10.2014):**

<b>Datum / Date Gz / Ref</b>		<b>Euro</b>
	<b>Dr. Martin Hager</b>	<b>210.200</b>
12.03.2018 HA 6306/7-1	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal Mechanophore in selbstheilenden Polymeren: Einfluss der mechanischen Aktivierung von Bindungen auf die Selbstheilung von Polymeren / Mechanophores in self-healing polymers: Influence of mechanical bond activation on the self-healing performance of polymers	210.200
	<b>Professor Dr. Jürgen Popp</b>	<b>3.930.005</b>
24.05.2018 INST 40/589-1	SFB/Transregio: Einzelantrag / CRC/Transregio: Individual Proposal Multispektroskopische Korrelationsanalyse elektronischer und struktureller Änderungen während der homogenen und heterogenen Katalyse / Multi- spectroscopic Correlation Analysis of Electronic and Structural Changes During Homogenous and Heterogeneous Catalytic Activity	643.700
23.05.2018 INST 275/329-2	Sonderforschungsbereich: Serviceprojekt / Collaborative Research Centres: Service Project Analyse von Naturstoffen in komplexen Biosystemen – Untersuchungen mittels multimodalen photonischen Technologien, Metabolomics und MALDI- Imaging / Analysis of Natural Products in Complex Biosystems - Multimodal Photonic-Based Investigations, Metabolomics and MALDI-Imaging	671.800
01.06.2017 INST 275/293-2	Sonderforschungsbereich: Einzelantrag / Collaborative Research Centres: Individual Proposal Reaktion der mikrobiellen Gemeinschaft auf den Eintrag von Oberflächensignalen in Grundwässer des Hainich CZE / Microbial Responses to Pulsed Infiltration Inputs into Groundwater of the Hainich CZE	952.300
01.06.2017	Sonderforschungsbereich: Einzelantrag / Collaborative Research Centres:	798.300

Datum / Date Gz / Ref		Euro
INST 275/382-1	Individual Proposal Raman-spektroskopische Charakterisierung der Aufnahme- und Wechselwirkungsmechanismen von Nanopartikeln und Wirkstoffen mit hepatischen Sternzellen / Raman spectroscopic characterization of the linkage- and interaction mechanism of nano-particles and drugs with hepatic stellate cells	
11.05.2017 PO 563/41-1	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal Studium von Biofilmen mittels der oberflächen-verstärkten Raman-Spektroskopie / Study of Bacterial Biofilms by Surface-enhanced Raman Microscopy	11.550
16.12.2016 PO 563/36-1	Internationale Zusammenarbeit: Tagungsförderung / International Cooperation: Conference Funding ECONOS2017 - 16th European Conference on Non-Linear Optical Spectroscopy / ECONOS2017 - 16th European Conference on Non-Linear Optical Spectroscopy	30.500
13.10.2016 PO 563/35-1	Internationale Strategiemeasures: Personen-Maßnahme / International Strategy Measures: Individual Measures TWAS-Gastaufenthalt Sudan	8.550
29.04.2016 PO 563/30-1	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal Multimodale Musteranalysen zur Abbildung der Entzündung bei Patienten mit Colitis ulcerosa - Beschreibung der Krankheitsaktivität und Vorhersage einer klinischen Remission / Multimodal pattern analysis to characterize inflammation in patients with ulcerative colitis - Imaging disease activity and predicting clinical remission	153.500
19.01.2016 PO 563/32-1	Internationale Zusammenarbeit: Tagungsförderung / International Cooperation: Conference Funding Scientific Meeting: Raman 4 Clinics - New Approaches in Future Diagnostics / Scientific Meeting: Raman 4 Clinics - New Approaches in Future Diagnostics	14.600
23.12.2015 PO 563/29-1	Gerätezentren: Einzelantrag / Core Facilities: Individual Proposal Jena Biophotonic and Imaging Laboratory / Jena Biophotonic and Imaging Laboratory	460.000
20.02.2015 PO 563/17-2	Forschergruppe: Einzelantrag / Research Units: Individual Proposal Ex-vivo und in-vivo spektroskopische Charakterisierung und Detektion von Häm und Hämabbauprodukten / Ex-vivo and in-vivo spectroscopic characterization and detection of heme and heme degradation products	185.205

## Zusammenfassung

Dynamische Polymere basierend auf reversiblen kovalenten Vernetzungen erlauben die gezielte Beeinflussung des Benetzungsverhaltens von verschiedenen Flüssigkeiten. Durch gezielte Beeinflussung von Außen (d.h. Temperatur, pH-Wert der benetzenden Flüssigkeit) können die reversiblen Vernetzer gezielt geöffnet und geschlossen werden. Auf diese Weise kann die Polarität der Polymere / der Oberflächen geschaltet werden. Die im Projekt verwendeten Vernetzungseinheiten basieren auf Oximen, Acylhydrazonen sowie Iminen – welche jeweils unterschiedlichen Stabilitäten aufweisen. Weiterhin können die Eigenschaften der Copolymere noch zusätzlich durch die Wahl der entsprechenden Comonomere gezielt eingestellt werden. Im Rahmen des Vorhabens wird das Benetzungsverhalten auf molekularer und makroskopischer Ebene mittels CARS (coherent anti-Stokes Raman scattering) Mikroskopie aufgeklärt. Auf diese Weise können die reversiblen Änderungen im Material (d.h. Öffnen und Schliessen der Bindungen) sowie die Benetzung mit einer Flüssigkeit (z.B. Wasser) simultan zeit- und orts aufgelöst untersucht werden. Es wird somit eine Kinetik der „Reaktion“ („reactive wetting“) unabhängig von der Kinetik der Benetzung erhalten.

## Summary

Dynamic polymers based on reversible covalent crosslinks allow the switchable wetting behavior of different liquids. By selectively influencing the outside (i.e., temperature, pH value of the wetting liquid), the reversible crosslinkers can be selectively opened and closed. In this way, the polarity of the polymers / the substrate can be switched. The crosslinking moieties utilized within the project are based on oximes, acylhydrazones and imines, which feature different stability. Furthermore, the properties of the copolymers can additionally be adjusted by the choice of the corresponding comonomers. Within the framework of the project, the wetting behavior of these materials is revealed on the molecular as well as macroscopic level by CARS (coherent anti-Stokes Raman scattering) microscopy. In this way, the reversible changes in the material (i.e., opening and closing of the bonds) as well as the wetting with a liquid (e.g., water) can be simultaneously resolved with temporal as well as spatial resolution. Thus, kinetics of the reaction ("reactive wetting") are obtained independently of the kinetics of wetting process.

**Antragstyp** Schwerpunktprogramm - Einzelantrag - Neuantrag

**Type of Proposal** Priority Programme - Individual Proposal - New Proposal

**Antragsdauer / Requested Duration** 36 Monate / 36 months

**Fach** Experimentelle Physik der kondensierten Materie

**Subject Area** Experimental Condensed Matter Physics

**Rahmenprojekt / Framework Project** SPP 2171

**Titel** Tropfenaufprall auf weiche (anpassungsfähige) Oberflächen

**Title** Drop Impact on Soft (Adaptive) Substrates

**Geschäftszeichen / Reference No.** HA 8467/2-1

DFG-Erstantrag / First-Time Applicant

**Antragstellerin / Applicant** Dr. Kirsten Harth  
Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg  
Institut für Experimentelle Physik  
Magdeburg

**Arbeitgeberzusage Statement by Employer** Die Erklärung zur Arbeitgeberfunktion liegt vor.  
A statement regarding employer status has been received.

**Beantragte Mittel / Budget Request:**

	Beantragt / Requested		
<b>Dauer [Monate] / Duration [Months]</b>	<b>36</b>		
<b>HA 8467/2-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>374.445</b>		
<b>Dr. Kirsten Harth</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>211.700</b>
Eigene Stelle 100 % / Temporary Position for Principal Investigator 100 %	1	36	209.700
Hilfskräfte / Support Staff			2.000
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>81.020</b>
Geräte bis 10.000 Euro, Software und Verbrauchsmaterial / Equipment up to EUR 10,000, Software and Consumables			56.100
Publikationen / Publications			2.250

Reisen / Travel			22.670
<b>Investitionsmittel / Instrumentation</b>			<b>81.725</b>
Faserlaser mit 4 Wellenlängen, min. 70 mW Output / Faserlaser mit 4 Wellenlängen, min. 70 mW Output			17.465
High-Speed Kamera mit hoher Sensitivität / High-Speed Kamera mit hoher Sensitivität			64.260

**Bewilligungen der letzten vier Jahre zu anderen Projekten (seit 15.10.2014) /  
DFG Project Funding Over the Last Four Years (since 15.10.2014):**

Datum / Date Gz / Ref		Euro
	<b>Dr. Kirsten Harth</b>	<b>55.100</b>
07.09.2017 HA 8467/1-1	Forschungsstipendium: Einzelantrag / Research Fellowship: Individual Proposal Tropfenaufprall auf heiße Oberflächen / Drop Impact on Hot Surfaces	55.100

**Zusammenfassung**

Alltäglich trifft man Situationen an, bei denen flüssige Tropfen auf weiche Materialien auftreffen, beispielsweise Wassertropfen auf der Haut, auf frische Farbe auftreffende Wassertropfen oder auf Blätter von Pflanzen aufschlagende Tropfen. Hingegen beschäftigt sich die bisherige Forschung hauptsächlich mit harten Oberflächen, tiefen Flüssigkeitsbecken oder mischbaren flüssigen Oberflächenschichten. Auf weichen Substraten findet man ein interessantes Spektrum neuer Phänomene, z. B. eine höhere Effizienz von Kondensationsprozessen oder die Messbarkeit der kleinen von Zellen auf die Unterlage ausgeübten Kräfte. Statische auf weichen Substraten sitzende Tropfen wurden schon viel untersucht und modelliert, auch langsame Kontaktlinienbewegungen wurden beschrieben. Hingegen existieren nur sehr wenige Untersuchungen der Wechselwirkungen weicher Substrate mit Kontaktlinien hoher Geschwindigkeit, wie sie z.B. beim Tropfenaufprall auftreten. In diesem Fall wurden fast nur globale Aufnahmen der Seitenansicht gemacht. Die Prozesse in der Nähe der 3-Phasen-Kontaktlinie oder unterhalb des Tropfens wurden bisher nicht untersucht.

In diesem Projekt soll der Tropfenaufprall auf weiche viskoelastische Gele untersucht um die Verbindung zwischen mikroskopischen und makroskopischen Prozessen der schnellen Kontaktlinienbewegung zu erklären. Durch spezielle Hochgeschwindigkeitsbildgebungstechniken in der Unteransicht können Deformationen und Spannungen im Substrat und Informationen über die Morphologie der Kontakte gewonnen werden, welche dann mit Seitenansichten korreliert werden.

Zuerst werde ich den Tropfenaufprall auf viskoelastische Gele untersuchen und dabei z.B. die Flüssigkeit des Tropfens, die rheologischen Eigenschaften des Substrates und die Schichtdicke des Gels variieren. Von meinem neuen, detaillierten Ansatz sind fundamentale neue Einblicke zu erwarten. Als zweites werde ich Oberflächen mit räumlich variierender Steifigkeit in Wechselwirkung mit 3-Phasen-Kontaktlinien untersuchen. Als drittes werde ich die Kontaktliniendynamik auf Substraten aus flexiblen Säulen untersuchen.

Mein experimenteller Aufbau und meine Fachkenntnisse werden anderen Gruppen im SPP-2171 in Kollaborationen zur Verfügung stehen, derzeit sind Kollaborationen zur Kontaktliniendynamik auf verschiedenen anpassungsfähigen Substraten geplant. Meine Experimente sollen in Zusammenarbeit mit Theoretikern sowohl numerisch als auch teilweise analytisch modelliert werden.



## Summary

Droplets impacting on soft materials are frequently encountered in everyday life, e.g. water drops on skin during showering, drops impacting on fresh paint or on plant leaves. However, research so far mainly focused on hard surfaces, liquid pools and miscible liquid surface layers. Soft substrates offer an interesting spectrum of new phenomena, e.g. increase of nucleation efficiency during condensation or the possibility of measuring the small traction forces exerted by cells. The coupled problem of static shapes of a droplet on visco-elastic substrates has been modeled extensively, and comparatively slow processes of contact line motion have been addressed. However, there are very few studies of the interaction of soft substrates with rapidly moving contact lines, as e.g. encountered during drop impact. In that case, almost exclusively global side view images were applied, the processes near the three phase contact line or under the drops have not been studied microscopically.

I propose to study drop impact on soft visco-elastic gels, in order to reveal the connection between the micro- and macro-scale processes related to rapid contact line motion. Side view imaging will be combined with a number of non-standard high-speed bottom view techniques, providing access to the substrate's deformations, strains or contact formation processes of the surface with the liquid. First, I will study drop impact on visco-elastic gels, varying parameters as the drop liquid, the substrate's rheological properties and layer thickness. I expect fundamentally new insights from my detailed approach to the problem. Second, I will study substrates of spatially varying elasticity in interaction with liquid drops. This will also include static and slowly moving contact lines. Third, I will study contact line motion on substrates covered by flexible pillars.

My setup and expertise will be available to the other participating groups of SPP-2171 through collaboration, currently planned for several adaptive substrates. I will collaborate with theoreticians on analytical and numerical modeling of my experiments.

**Antragstyp** Schwerpunktprogramm - Einzelantrag - Neuantrag

**Type of Proposal** Priority Programme - Individual Proposal - New Proposal

**Antragsdauer / Requested Duration** 36 Monate / 36 months

**Fach** Strukturierung und Funktionalisierung

**Subject Area** Structuring and Functionalisation

**Rahmenprojekt / Framework Project** SPP 2171

**Titel** **Untersuchung von Tropfenform und Dynamik der Dreiphasenkontaktlinie auf dynamisch schaltbaren Spiropyran Oberflächen**

**Title** **Evaluation of droplet shape and three-phase contact line movement on dynamically switchable spiropyran surfaces**

**Geschäftszeichen / Reference No.** **HE 8451/1-1**

DFG-Erstantrag / First-Time Applicant

**Antragstellerin / Applicant** **Dr. Dorothea Helmer**  
Albert-Ludwigs-Universität Freiburg  
Institut für Mikrosystemtechnik (IMTEK)  
Freiburg

**Kooperationspartnerinnen und Kooperationspartner / Cooperation Partners** Professor Dr. Moran Bercovici  
Technion - Israel Institute of Technology  
Faculty of Mechanical Engineering  
Haifa  
Israel

**Beantragte Mittel / Budget Request:**

	Beantragt / Requested		
<b>Dauer [Monate] / Duration [Months]</b>	<b>36</b>		
<b>HE 8451/1-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>199.812</b>		
<b>Dr. Dorothea Helmer</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>160.262</b>
Doktorandin/Doktorand und Vergleichbare 75 % / Doctoral Researcher or Comparable 75 %	1	36	145.100
Hilfskräfte / Support Staff			15.162

<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>39.550</b>
Geräte bis 10.000 Euro, Software und Verbrauchsmaterial / Equipment up to EUR 10,000, Software and Consumables			29.200
Publikationen / Publications			2.250
Reisen / Travel			8.100

## Zusammenfassung

Die Benetzung von Oberflächen mit Flüssigkeiten ist ein Prozess, der in vielen Bereichen der Wissenschaft und des täglichen Lebens von Interesse ist. Die Oberflächenbeschaffenheit hat eine große Auswirkung auf das Benetzungsverhalten von Flüssigkeiten: Bereiche mit unterschiedlicher Benetzbarkeit und unterschiedlicher Oberflächenstruktur verändern das Benetzungsverhalten. Für das Verhalten von Tropfen auf Oberflächen und die messbaren Kontaktwinkel spielt die Dreiphasenkontaktklinie eine herausragende Rolle: Oberflächen-Heterogenität wirkt sich nur auf das Verhalten des Tropfens aus, wenn sie sich unter dieser Linie befinden. Die experimentelle Untersuchung der Dynamik der Dreiphasenkontaktklinie ist daher von großem Interesse.

In der Natur sind viele Benetzungsprozesse durch die dynamischen Eigenschaften der Oberfläche charakterisiert. In diesem Projekt soll der Einfluss der Substratdynamik auf das Verhalten von Tropfen auf Oberflächen untersucht werden. Ein besonderer Fokus liegt auf der Untersuchung der Dreiphasenkontaktklinie. Im Rahmen des Projektes werden dynamische, zwischen unterschiedlichen Zuständen der Oberflächenenergie (hydrophil/hydrophob) oder Viskosität schaltbare Substrate auf Spiropyran-Basis hergestellt und auf ihre Schaltbarkeit hin untersucht. Die hydrophoben Bereiche erscheinen farblos, während geschaltete, hydrophile Bereiche violett erscheinen. Für die Herstellung der Oberflächen kann auf die Herstellung von mikro-/nanostrukturieren Polymerschäumen und das Photobleichen zur Anbringung von Molekülen an der Oberfläche zurückgegriffen werden. Aber auch neuartige Spiropyran-Copolymere und Polymere mit Spiropyran-Crosslinkern sollen erzeugt werden. Es wird eine Messplattform bestehend aus zwei Hochgeschwindigkeitskameras in Kombination mit einer maskenlosen Lithographieanlage zur Generierung von Schaltungsmustern aufgebaut, um die Tropfen während und nach dem Schaltvorgang zu untersuchen. Tropfenform und Bewegung in Abhängigkeit der Schaltungsmuster unterhalb der Dreiphasenkontaktklinie sollen untersucht werden. Protonierung durch Säure führt zu Grünfärbung der Spiropyrane wodurch die Dreiphasenkontaktklinie auch unter stärker hydrophoben Tropfen sichtbar gemacht werden soll.

Im Rahmen dieses Schwerpunktprogramms sollen die Benetzungseigenschaften von schaltbaren, flexiblen und adaptiven Substraten experimentell und theoretisch untersucht werden. Das vorliegende Projekt bietet Oberflächen aus jeder dieser Kategorien und wird durch Echtzeit-Untersuchung von Tropfenbewegungen einen entscheidenden Beitrag zum Verständnis der Dynamik der Dreiphasenkontaktklinie unter veränderbaren Substrateigenschaften leisten. Es sind Kollaborationen mit experimentell arbeitenden Gruppen geplant, um die Eigenschaften und Dynamik der Oberflächen zu verbessern, sowie theoretische Kooperationen, die die bei diesem Projekt erhobenen experimentelle Daten zur Modellanpassung und Verbesserung verwenden sollen.

## Summary

Wetting, the spreading of liquids on solid surfaces is of high interest for many processes in science and everyday life. It is generally agreed, that the properties of the solid substrate have a significant influence on the wetting behaviour: chemical or topographic inhomogeneities, i.e. areas of different wettability or different surface structure cause significant changes in the

behaviour of liquids on surfaces. For the behaviour of droplets, the three-phase contact line, the line where liquid, solid and gas phase meet, plays a major role. Surface heterogeneity only impacts the macroscopic behaviour of the droplet if it is situated under the three-phase contact line. The experimental evaluation of the dynamics of this line is therefore of great interest.

In nature, many wetting processes are characterized by the dynamics of the solid substrate. In this project, the influence of substrate dynamics on the behaviour of droplets will be investigated. The main focus of this project is the analysis of the three-phase contact line. In the course of this project dynamic substrates which can be switched between different states of surface energy (hydrophilic/hydrophobic) based on spiropyrans will be generated and analysed in terms of their switching properties. Spiropyran surfaces are advantageous because the switch is directly visible due to a colour change from colourless (hydrophobic) to an intense magenta colouring (hydrophilic). For the fabrication of such substrates, processes for the generation of micro/nanostructured polymer foams in combination with spiropyran immobilization via photobleaching can be employed. Additionally, new spiropyran-copolymer mixtures and polymers with spiropyran-crosslinkers will be used. An imaging platform consisting of two highspeed cameras in combination with a maskless lithography setup for the generation of switching patterns will be set up for analysing the droplets during and after the switch. Droplet shape and movement dynamics in dependence of the switching patterns underneath the three-phase contact line will be investigated. Introduction of acidic droplets leads to a third, protonated spiropyran state which has an intense green colour. This way, the contact area between droplet and surface will be identified by colour and the three-phase contact line will also be visualized under strongly hydrophobic droplets.

This Schwerpunktprogramm aims at experimental and theoretical analysis of wetting phenomena on switchable, flexible and adaptive surfaces. This project offers substrates of each of these categories and will make a significant contribution to understanding the dynamics of the three-phase contact line under changing substrate dynamics. Collaborations with experimental groups to improve the properties and dynamics of the surfaces as well as with theoretically oriented groups to utilize experimental data for the improvement and adaption of theoretical models are planned.

**Antragstyp** Schwerpunktprogramm - Einzelantrag - Neuantrag

**Type of Proposal** Priority Programme - Individual Proposal - New Proposal

**Antragsdauer / Requested Duration** 36 Monate / 36 months

**Fach** Physikalische Chemie von Festkörpern und Oberflächen,  
Materialcharakterisierung

**Subject Area** Physical Chemistry of Solids and Surfaces, Material Characterisation

**Rahmenprojekt / Framework Project** SPP 2171

**Titel** Hochlokalisierte Herstellung, Anpassung und Charakterisierung von flüssigkeit-infundierten Oberflächen zum besseren Verständnis von Ent-/Benetzungsdynamiken

**Title** Highly localized preparation, tuning, and characterization of liquid-infused surfaces for a better understanding of (de)wetting dynamics

**Geschäftszeichen / Reference No.** HI 1724/4-1

**Antragsteller / Applicant** Dr. Michael Hirtz  
Karlsruher Institut für Technologie (KIT)  
Institut für Nanotechnologie  
Eggenstein-Leopoldshafen

**Beantragte Mittel / Budget Request:**

	Beantragt / Requested		
<b>Dauer [Monate] / Duration [Months]</b>	<b>36</b>		
HI 1724/4-1			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>183.150</b>		
Dr. Michael Hirtz			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>145.100</b>
Doktorandin/Doktorand und Vergleichbare 75 % / Doctoral Researcher or Comparable 75 %	1	36	145.100
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>38.050</b>
Geräte bis 10.000 Euro, Software und Verbrauchsmaterial / Equipment up to EUR 10,000, Software and Consumables			30.400
Publikationen / Publications			2.250
Reisen / Travel			5.400

**Bewilligungen der letzten vier Jahre zu anderen Projekten (seit 15.10.2014) / DFG Project Funding Over the Last Four Years (since 15.10.2014):**

Datum / Date Gz / Ref		Euro
	<b>Dr. Michael Hirtz</b>	<b>147.400</b>
23.07.2015 HI 1724/3-1	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal Funktionalisierte optomechanische Schaltkreise aus Diamant für Infrarotspektroskopie und Gassensorik / Functionalized diamond optomechanical circuits for infrared spectroscopy and site-specific gas sensing applications	147.400

### Zusammenfassung

Unser Projekt zielt darauf ab mikro- und mesoskopische Mechanismen im Zusammenhang mit nicht-gleichgewichts Be-/Entnetzungs-dynamiken von Flüssigkeitstropfen auf flüssigkeitsinfundierten Oberflächen aufzuklären, als ein Beispiel für adaptive, flexible und potentiell schaltbare Substrate. Um dies zu ermöglichen werden wir eine neue Methode, basierend auf einem FluidFM Aufbau, entwickeln. Diese Methode wird statische und dynamische Kraftmessungen während der Benetzung und dem Flüssigkeitsaustausch in flüssigkeitsinfundierten Oberflächen ermöglichen. In einem gemeinschaftlichen Ansatz werden die erhobenen Daten zusammen mit Theoriegruppen zur Einarbeitung in ihre theoretischen Modelle aufbereitet.

### Summary

The project proposal aims to elucidate the micro-/mesoscopic dynamics and mechanisms associated with the non-equilibrium (de)wetting dynamics of droplets on liquid-infused surfaces (LIS) as an example for an adaptive, flexible and potentially switchable substrate. For this, we will develop a new method, based on a FluidFM setup, to allow static and dynamic force measurements during wetting and liquid exchange in LIS and – in a collaborative approach – deliver the obtained data to theory groups for incorporation in their models.

**Antragstyp** Schwerpunktprogramm - Einzelantrag - Neuantrag

**Type of Proposal** Priority Programme - Individual Proposal - New Proposal

**Antragsdauer / Requested Duration** 36 Monate / 36 months

**Fach** Statistische Physik, Weiche Materie, Biologische Physik, Nichtlineare Dynamik

**Subject Area** Statistical Physics, Soft Matter, Biological Physics, Nonlinear Dynamics

**Rahmenprojekt / Framework Project** SPP 2171

**Titel** **Dynamische Benutzungsverhalten von flexiblen geladenen Substratoberflächen**

**Title** **Dynamical Wetting Behavior of Flexible Charged Substrates**

**Geschäftszeichen / Reference No.** **HO 1108/29-1**

**Antragsteller / Applicant** **Professor Dr. Christian Holm**  
Universität Stuttgart  
Fachbereich Physik  
Institut für Computerphysik (ICP)  
Stuttgart

**Mitverantwortlicher / Co-Applicant** Dr.-Ing. Kartik Jain  
Universität Stuttgart  
Fachbereich Physik  
Institut für Computerphysik (ICP)  
Stuttgart

**Beantragte Mittel / Budget Request:**

	Beantragt / Requested		
<b>Dauer [Monate] / Duration [Months]</b>	<b>36</b>		
<b>HO 1108/29-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>189.750</b>		
<b>Professor Dr. Christian Holm</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>163.100</b>
Doktorandin/Doktorand und Vergleichbare 75 % / Doctoral Researcher or Comparable 75 %	1	36	145.100
Hilfskräfte / Support Staff			18.000
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>26.650</b>

Geräte bis 10.000 Euro, Software und Verbrauchsmaterial / Equipment up to EUR 10,000, Software and Consumables			9.400
Publikationen / Publications			2.250
Reisen / Travel			15.000

**Bewilligungen der letzten vier Jahre zu anderen Projekten (seit 15.10.2014 ) /  
DFG Project Funding Over the Last Four Years (since 15.10.2014):**

Datum / Date Gz / Ref		Euro
	<b>Professor Dr. Christian Holm</b>	<b>4.589.900</b>
22.05.2018 INST 41/1075-1	Sonderforschungsbereich: Einzelantrag / Collaborative Research Centres: Individual Proposal Ein multiskaler Simulationsansatz zur Optimierung molekularer heterogener Katalyse in eingeschränkten Geometrien / A multi-scale simulation approach for optimizing molecular heterogeneous catalysis in confined geometries	439.400
21.12.2017 HO 1108/28- 1	Literaturversorgung und Information: E-Research-Technologien / Library Services and Information: E-Research-Technologies Der Aufbau einer Internationalen Community zur nachhaltigen Entwicklung des ESPResSo Programmpaketes. / Fostering an international community to sustain the development of the ESPResSo software package	319.950
20.12.2017 HO 1108/23- 3	Schwerpunktprogramm: Einzelantrag / Priority Programmes: Individual Proposal Eigenschaften von magnetischen Hybridmaterialien - ein mikroskopischer Simulationszugang / Properties of magnetic hybrid materials - a microscopic simulational approach	140.800
30.11.2017 INST 41/1044-1	Sonderforschungsbereich: Einzelantrag / Collaborative Research Centres: Individual Proposal Untersuchungen der Zweiphasenströmung von Elektrolytlösungen in porösen Medien mit Morphologieänderungen und variabler Oberflächenbenetzung basierend auf der Gitter-Boltzmann Methode / A Lattice-Boltzmann investigation of two-phase electrolyte flow in porous structures with morphology alterations and tunable interfacial wetting behaviour	348.700
21.04.2017 HO 1108/24- 2	Schwerpunktprogramm: Einzelantrag / Priority Programmes: Individual Proposal Kooperatives Verhalten von Mikroschwimmern: Der Einfluss ionischer und reaktiver Abschirmung auf die hydrodynamischen Wechselwirkungen in komplexen Fluiden / Cooperative Motion of Microswimmers: The Influence of Ionic and Reactive Screening on Hydrodynamic Interactions in Complex Fluids	196.100
19.10.2015 HO 1108/23- 2	Schwerpunktprogramm: Einzelantrag / Priority Programmes: Individual Proposal Eigenschaften von magnetischen Hybridmaterialien - ein mikroskopischer Simulationszugang / Properties of magnetic hybrid materials - a microscopic simulational approach	169.300
28.01.2015 HO 1108/26- 1	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal Ionenverteilung in geladenen Hydrogelen im Gleichgewicht und unter dem Einfluss externer Stimuli / Distribution of low-molecular weight ions in charged hydrogels in equilibrium and under the application of external stimuli	188.950
25.11.2014 INST 41/682- 3	Sonderforschungsbereich: Einzelantrag / Collaborative Research Centres: Individual Proposal Zentrale Aufgaben des Sonderforschungsbereichs / Management and Office	2.486.400
25.11.2014 INST 41/780-	Sonderforschungsbereich: Einzelantrag / Collaborative Research Centres: Individual Proposal Makromolekularer Transport durch nanoskalige Poren / Macromolecular	300.300



Datum / Date Gz / Ref		Euro
3	transport through nanoscale pores	

## Zusammenfassung

In diesem Projekt planen wir die Untersuchung von adaptiven, flexiblen, geladenen Oberflächen, die aus partiell geladenen Makromolekülen bestehen, und in Kontakt mit einem Wassertropfen unterschiedliche Elektrolytkonzentration stehen. Die makromolekulare Oberfläche kann aus dünnen Filmen von Polyelektrolyten, Bürsten, Mikrogelen, Hydrogelen, Nano-Gras oder komplizierteren makromolekularen Strukturen wie amphiphilen Conetzwirken bestehen. Die Oberfläche, auf der diese Filme aufgebracht sind, kann selbst nanostrukturiert sein, und als solche zum Beispiel hydrophile oder hydrophobe Domänen oder Oberflächenrauheiten auf der Nanoskala aufweisen. Die Oberflächeneigenschaften können entweder durch von außen angelegte elektrischer Felder oder durch die Variation des pH-Wertes des Wassers moduliert werden; die Stärke dieser Wechselwirkungen hat auch einen Einfluss auf die Dynamik der Benetzungseigenschaften. Unsere Simulationsmethode kombiniert einen Kontinuumszugang über die elektrokinetischen Gleichungen, die wir mittels des Gitter-Boltzmann-Algorithmus (LB) berechnen, mit expliziten geladenen Polymerteilchen, die alle miteinander koppeln müssen. Wir benutzen einen effizienten GPU-basierten Gitter-Boltzmann-Löser für einen einphasiges Fluid und wissen bereits, wie wir feste dielektrische Grenzflächen und sich bewegende Randbedingungen für große Kolloidteilchen umsetzen. Ungelöst ist allerdings das Problem, wie geladenen Polymere an den LB-EK gekoppelt werden können, dabei dennoch noch korrekt elektrostatisch wechselwirken und die korrekten Skalierungseigenschaften aufweisen. Diese Art der Kopplung existiert noch nicht in der Literatur und ist ein zentrales Entwicklungsarbeitspaket in diesem Antrag. Um Wasser im Kontakt mit Dampf und der festen Oberfläche zu untersuchen, werden wir ein multiphasiges Shan-Chen-Modell implementieren. Der Einfluss des pH-Wertes muss in doppelter Weise berücksichtigt werden. Im LB-EK wird der pH-Wert mittels einer geeignet modifizierten Randwertbedingung beeinflusst. Die Ladungsfluktuationen und Dissoziationsreaktionen auf den expliziten Polymerkugeln werden über das Reaktionsensemble simuliert. Als externe Felder werden sowohl AC- wie auch DC-Felder angelegt, die Einfluss auf die Ionenverteilung, und damit gleichzeitig auf die Dissoziationsreaktionen haben. Dies sollte auch die Quellung der funktionalisierten Oberfläche, und damit das Benetzungsverhalten beeinflussen. Wir erwarten, dass die Änderung der Oberflächeneigenschaften sich in interessanten Änderungen der dynamischen Benetzungseigenschaften niederschlagen wird.

## Summary

We plan to study the dynamic wetting properties of adaptive, flexible, charged surfaces that are made of partially charged macromolecules in contact with aqueous droplets of different electrolyte concentrations. The macromolecular surfaces can be thin films composed of polyelectrolyte brushes, polyelectrolyte multilayers, microgels, hydrogels, nano-grass, or other more complicated macromolecular structures like amphiphilic co-networks. The solid surface supporting the thin film of macromolecules itself can also be nano-structured, in terms of preferentially hydrophobic or hydrophilic domains, or a surface corrugation on the nanometre scale. The switching of surface properties can be induced by various methods. We plan to study the effects on the wetting dynamics caused by electric fields and

variations of the pH value of the aqueous solution. Our method combines continuum approaches, like solving the electrokinetic equations, with a responsive fluid-structure coupling of charged macromolecules. The continuum electrokinetics will be modelled via a lattice Boltzmann-based electrokinetic (LB-EK) solver. A single-phase version of this solver exists as a highly efficient GPU-based implementation in our software package ESPResSo. We already know how to couple fixed dielectric boundaries and moving boundaries to the LB-EK, a method useful for the study of charged colloid-sized objects. However, the question of how to couple charged polymers to the LB-EK such that they retain their correct electrostatic interactions, and thus their scaling properties, is an unsolved problem. To study water in contact with air and solids, we will extend the LB-EK to incorporate Shan-Chen multiphase flow model. The inclusion of pH-dependant effects has to be done in a two-fold way. In the LB-EK, a change in pH is modelled via a suitable boundary conditions, as is routinely done in the Poisson-Boltzmann equation. On the other hand, the charge fluctuations and dissociation reactions on the polymer beads can be taken into account via the reaction ensemble. As external stimuli we will apply DC or AC electric fields that change the ion distribution, and hence have an influence on the charge regulation. Moreover, the fields change the behaviour of the functionalized surface, swelling or deswelling them, or modulating the wettability. We expect that the change in surface properties will also give rise to interesting effects in the wetting dynamics.

**Antragstyp** Schwerpunktprogramm - Einzelantrag - Neuantrag

**Type of Proposal** Priority Programme - Individual Proposal - New Proposal

**Antragsdauer / Requested Duration** 36 Monate / 36 months

**Fach** Experimentelle Physik der kondensierten Materie

**Subject Area** Experimental Condensed Matter Physics

**Rahmenprojekt / Framework Project** SPP 2171

**Titel** **Dynamische Elektrobenetzung an Nanoporösen Oberflächen: Schaltbare Tropfenspreitung, Imbibition und Elastokapillarität**

**Title** **Dynamic Electrowetting at Nanoporous Surfaces: Switchable Spreading, Imbibition, and Elastocapillarity**

**Geschäftszeichen / Reference No.** **HU 850/12-1**

**Antragsteller / Applicant** **Professor Dr. Patrick Huber**  
Technische Universität Hamburg  
Studiendekanat Maschinenbau  
Institut für Werkstoffphysik und Werkstofftechnologie  
Hamburg

**Beantragte Mittel / Budget Request:**

	Beantragt / Requested		
<b>Dauer [Monate] / Duration [Months]</b>	<b>36</b>		
<b>HU 850/12-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>173.840</b>		
<b>Professor Dr. Patrick Huber</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>145.100</b>
Doktorandin/Doktorand und Vergleichbare 75 % / Doctoral Researcher or Comparable 75 %	1	36	145.100
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>28.740</b>
Geräte bis 10.000 Euro, Software und Verbrauchsmaterial / Equipment up to EUR 10,000, Software and Consumables			19.000
Publikationen / Publications			1.880
Reisen / Travel			7.860

**Bewilligungen der letzten vier Jahre zu anderen Projekten (seit 15.10.2014 ) / DFG Project Funding Over the Last Four Years (since 15.10.2014):**

Datum / Date Gz / Ref		Euro
	<b>Professor Dr. Patrick Huber</b>	<b>1.582.550</b>
15.10.2018 HU 850/11-1	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal Veränderung der Eigenschaften mehrphasiger Flüssigkeiten durch geometrische Beschränkung in modernen mesoporösen Materialien / Property Changes of Multiphase Fluids by Geometrical Confinement in Advanced Mesoporous Materials	278.250
09.05.2018 HU 850/10-1	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal Thermoelektrische Hybridmaterialien basierend auf porösem Silizium: der Zusammenhang zwischen makroskopischen Transportphänomenen und mikroskopischer Struktur und elementaren Anregungen / Hybrid Thermoelectric Materials Based on Porous Silicon: Linking Macroscopic Transport Phenomena to Microscopic Structure and Elementary Excitations	215.700
31.05.2017 HU 850/9-1	Paketantrag: Einzelantrag / Package Proposals: Individual Proposal Oxidische 3d-Gerüststrukturen für benetzungsvermittelte Formgebung von Polymeren und benetzungsvermittelter Herstellung von Fügeverbindungen mit Polymeren / Oxidic 3d scaffold structures for wetting-assisted shaping and bonding of polymers	273.600
02.06.2016 INST 153/147-1	Sonderforschungsbereich: Einzelantrag / Collaborative Research Centres: Individual Proposal Polymere in grenzflächenbestimmten Geometrien: Struktur, Dynamik und Funktion an planaren und in porösen Hybridsystemen / Polymers in interfacial-dominated geometries: Structure, dynamics and function in planar and in porous hybrid systems	637.400
29.06.2015 HU 850/5-1	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal Diskotische Flüssigkristalle in Nanoporösen Festkörpern: Von der Struktur und Dynamik zum lokalen Ladungstransport / Discotic Liquid Crystals in Nanoporous Solids: From the Structure and Dynamics to Local Charge Transport	177.600

## Zusammenfassung

Elektrisch leitfähige Substrate, wie nanoporöse Metalle und Halbleiter, erlauben eine Kontrolle von Benetzungsenergien von Elektrolyten durch elektrische Felder. Dadurch ist es möglich, Tropfenformen und die Spreitdynamik von Flüssigkeitsfilmen auf Oberflächen zu kontrollieren. Auch die Imbibitionskinetik in den Porenraum ist über elektrisch steuerbare Krümmungen der Flüssigkeitsmenisken im Porenraum einer externen Kontrolle zugänglich und damit prinzipiell schaltbar. Weiterhin führen die enormen Laplace-Drücke, wie sie typischerweise in nanoporösen Medien in Anwesenheit von Flüssigkeiten auftreten, zu merklichen Deformationen der porösen Festkörper und damit im Falle von Elektrobenetzung zu einer potentialabhängigen Kopplung der Kapillarität der Flüssigkeit mit der Elastizität des Festkörpers, also elektrisch schaltbarer Elastokapillarität. Das komplexe Wechselspiel dieser Phänomenologien (Tropfenformdynamik, Infiltrationsdynamik und Deformationsverhalten) ist bis heute kaum erforscht. In diesem Projekt soll unter kontrollierten äußeren elektrischen Potentialen die Benetzungsdynamik von wässrigen Elektrolyten und die damit eng verknüpfte Deformationskinetik an maßgeschneiderten Siliziumoberflächen, die von parallelen tubularen Nanoporen durchzogen sind, experimentell erforscht werden. Sowohl direkte als auch Elektrobenetzung mit Dielektrikum durch teilweise Oxidierung der Porenwände sollen untersucht werden. Die Existenz von Precursorfilmen im Porenraum, das Tropfenspreiten, die Imbibitionskinetik und die makroskopische (Substrat-) und mikroskopische (atomare) Deformation des einkristallinen Siliziums soll mit Hilfe von zeitabhängigen Tropfenformanalysen, opto-fluidischer Interferometrie, Dilatometrie und Synchrotron-basierter Röntgendiffraktion studiert werden, bei systematischer Variation der Porendurchmesser und

der Porosität. Diese Experimente sollen in enger Kooperation mit Projekten dieses Schwerpunkts analysiert werden, die sich mit mesoskopischer Modellierung und Simulation der Flüssigkeitsdynamik, Elektrokinetik, Imbibition und Elastokapillarität an planaren und porösen Oberflächen befassen. Das übergeordnete Ziel ist hierbei, ein prädikatives, fundamentales Verständnis der elektrisch schaltbaren statischen und dynamischen Benetzung an nanoporösen Festkörpern zu gewinnen.

## Summary

Electrically conductive substrates, such as surfaces of nanoporous metals and semiconductors allow one to control the wetting energies of electrolytes by electrical potentials. Thereby, it is possible to tune droplet shape and liquid spreading dynamics at surfaces, however also the imbibition into the porous surface is under external control via electrical potential-dependent curvatures of the liquid menisci within the nanopores. Moreover, the enormous Laplace pressures and fluid-solid interfacial stresses, typical of nanopore-confined liquids, induce noticeable deformations of the porous solids, and thus result in the case of electrowetting in a potential-dependent coupling of liquid capillarity with solid elasticity, i.e. electrically switchable elastocapillarity. The complex interplay of these phenomenologies (droplet shape dynamics, imbibition and deformation behaviour) have been barely explored to date. Here, it is proposed to explore experimentally the wetting dynamics of aqueous electrolytes at tailored, single-crystalline silicon surfaces traversed by a parallel array of tubular nanopores along with the intimately related elastic deformation of the solids under electrical potential control of the solid-liquid interfacial tension. Both direct and electrowetting with dielectric oxide layers at the nanopore surfaces shall be studied. The existence of precursor films, droplet spreading and imbibition dynamics as well as the deformation on the microscopic (atomic silicon lattice) and macroscopic (substrate) scale will be scrutinized by time-dependent droplet shape analysis, opto-fluidic interferometry, dilatometry and synchrotron-based in-situ x-ray diffraction under variation of the mean pore diameter and porosity of the surface. The experiments shall be analysed in close cooperation with projects in this priority program focusing on computational modelling and mesoscopic phenomenological theories for liquid spreading, imbibition and elastocapillarity at planar and porous surfaces. The overarching objective of this project is a fundamental, predictive understanding of electrically switchable static and dynamic wetting at nanoporous surfaces.

<b>Antragstyp</b>	Schwerpunktprogramm - Einzelantrag - Neuantrag
<b>Type of Proposal</b>	Priority Programme - Individual Proposal - New Proposal
<b>Antragsdauer / Requested Duration</b>	36 Monate / 36 months
<b>Fach</b>	Experimentelle und Theoretische Polymerphysik
<b>Subject Area</b>	Experimental and Theoretical Physics of Polymers
<b>Rahmenprojekt / Framework Project</b>	SPP 2171
<b>Titel</b>	<b>Rekonfigurierbare Oberflächen mit schaltbarer und adaptiver Benetzbarkeit basierend auf formverändernden Polymeren</b>
<b>Title</b>	<b>Reconfigurable surfaces with switchable and adaptive wettability based on shape-changing polymers</b>
<b>Geschäftszeichen / Reference No.</b>	<b>IO 68/15-1</b>
<b>Antragsteller / Applicant</b>	<b>Professor Dr. Leonid Ionov</b> Universität Bayreuth Fakultät für Ingenieurwissenschaften Lehrstuhl für Biomaterialien Bayreuth
<b>Kooperations- partnerinnen und Kooperations- partner / Cooperation Partners</b>	Dr. Günter K. Auernhammer Leibniz-Institut für Polymerforschung Dresden e.V. Institut Physikalische Chemie und Physik der Polymere Dresden  Dr. Rüdiger Berger Max-Planck-Institut für Polymerforschung Mainz  Professor Dr. Hans-Jürgen Butt Max-Planck-Institut für Polymerforschung Mainz  Dr. Svetlana Gurevich Westfälische Wilhelms-Universität Münster Fachbereich 11 - Physik Institut für Theoretische Physik Münster  Dr. Kirsten Harth Universiteit Twente Faculty Science and Technology Physics of Fluids Enschede Niederlande / Netherlands

Dr. Stefan Karpitschka  
 Max-Planck-Institut für Dynamik und Selbstorganisation  
 Abteilung Dynamik komplexer Fluide  
 Göttingen

Professor Dr. Uwe Thiele  
 Westfälische Wilhelms-Universität Münster  
 Fachbereich 11 - Physik  
 Institut für Theoretische Physik  
 Münster

**Beantragte Mittel / Budget Request:**

	<b>Beantragt / Requested</b>		
<b>Dauer [Monate] / Duration [Months]</b>	<b>36</b>		
<b>IO 68/15-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>223.811</b>		
<b>Professor Dr. Leonid Ionov</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>163.100</b>
Doktorandin/Doktorand und Vergleichbare 75 % / Doctoral Researcher or Comparable 75 %	1	36	145.100
Hilfskräfte / Support Staff			18.000
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>40.650</b>
Geräte bis 10.000 Euro, Software und Verbrauchsmaterial / Equipment up to EUR 10,000, Software and Consumables			30.000
Publikationen / Publications			2.250
Reisen / Travel			8.400
<b>Investitionsmittel / Instrumentation</b>			<b>20.061</b>
Drop Shape Analyzer für Kontaktwinkelmessungen / Drop Shape Analyzer für Kontaktwinkelmessungen			20.061

**Bewilligungen der letzten vier Jahre zu anderen Projekten (seit 12.10.2014 ) /  
 DFG Project Funding Over the Last Four Years (since 12.10.2014):**

<b>Datum / Date Gz / Ref</b>		<b>Euro</b>
	<b>Professor Dr. Leonid Ionov</b>	<b>425.150</b>
02.05.2018 IO 68/10-1	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal Fabrikation von Mikrofasern mit komplexem Interieur durch formverändernde Polymere / Fabrication of Microfibers with Complex Interior by Shape- Changing Polymers	218.500
14.02.2018 IO 68/11-1	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal Reversible Semicrystalline Polymeric Actuators / AReversible Semicrystalline Polymeric Actuators	206.650

**Zusammenfassung** Oberflächen mit schaltbarer / adaptiver Benetzung sind von großem Interesse für eine Vielzahl von Anwendungen, einschließlich Mikrofluidik, Sensoren, funktionelle Beschichtungen, logische Vorrichtungen sowie für die

Biotechnologie. Bislang lag der Schwerpunkt der Forschung auf der Untersuchung von Oberflächen mit schaltbarer chemischer Zusammensetzung wie Polymerbürsten, Metalloxiden und selbstorganisierten Monolagen. Oberflächen mit schaltbarer Topographie blieben aber außerhalb des Forschungsbereiches. Sie sind jedoch sehr interessant, weil sie eine verbesserte und komplexe (anisotrope) Schaltung der Benetzung ermöglichen. Ihre Entwicklung und das Verständnis ihrer Benetzung während der Änderung sind jedoch weiterhin kaum entwickelt und nicht ausreichend nachvollziehbar.

Das Projekt zielt darauf ab, Oberflächen mit schaltbarer Topographie unter Verwendung von formändernden Polymeren zu entwickeln und die Dynamik der Änderung ihrer Benetzung zu verstehen. Die Hauptaufgabe des Projekts besteht darin, Effekte der Änderung der Topographie, der mechanischen Eigenschaften und der Hydrophilie / Hydrophobie beim Umschalten der Benetzungseigenschaften getrennt aufzuklären. Die erste Projektphase konzentriert sich auf die Untersuchung der Effekte zweier von drei Faktoren – die Änderung der mechanischen Eigenschaften der Materialien und die Änderung der Topographie.

Zunächst werden wir generische Methoden zur Herstellung von Oberflächen mit schaltbaren mechanischen Eigenschaften sowie Oberflächen mit aktiven topographischen Elementen entwickeln. Als nächstes werden die Effekte des Schaltens der mechanischen Eigenschaften der Oberflächen auf Änderung der Benetzung untersucht. Schließlich wird der Effekt der Änderung der Topographie auf die Änderung der Benetzungseigenschaften von Oberflächen aus zwei Arten von Polymeren und Oberflächen mit magnetischen Partikeln untersucht. Das ultimative Ziel des Projektes ist es, neue Horizonte für das Design einer neuen Generation aktiver Materialien für verschiedene Anwendungen, einschließlich der Medizin, Robotik und anderen, zu erschließen.

## Summary

Surfaces with switchable/adaptive wetting are of strong interest for a variety of applications including microfluidics, sensors, functional coatings, logical devices as well as for biotechnology. Till now most research in this field was focused on investigation of surfaces with switchable chemical composition such as polymer brushes, metal oxides and self-assembled monolayers. Surface with switchable topography remained out of main scope of research. They are, however, highly interesting because they must allow enhanced and yet complex (anisotropic) switching of wetting. Their development and understanding of their wetting during switching remains underdeveloped and poorly understood.

The project aims to develop surfaces with switchable topography using shape-changing polymers and to understand dynamics of switching of their wetting properties. The main challenge of project is to separately elucidate effects of change of topography, mechanical properties and hydrophilicity/hydrophobicity on switching of wetting properties. In first application period we will focus on investigation of effect two out of three factors – switching of mechanical properties of materials and switching of topography. First, we will develop generic methods for fabrication of surfaces with switchable mechanical properties as well as surfaces with active topographic elements. Next, we will investigate effects of switching of mechanical properties of surfaces on switching of wetting. Finally, effect of switching of topography on switching of wetting properties of surfaces made of two kinds of polymers and surfaces with magnetic particles will be investigated. The ultimate goal is to open new horizons for the design of a new generation of active materials for different applications including medicine, robotics and others.



**Antragstyp** Schwerpunktprogramm - Einzelantrag - Neuantrag

**Type of Proposal** Priority Programme - Individual Proposal - New Proposal

**Antragsdauer / Requested Duration** 36 Monate / 36 months

**Fach** Festkörper- und Oberflächenchemie, Materialsynthese

**Subject Area** Solid State and Surface Chemistry, Material Synthesis

**Rahmenprojekt / Framework Project** SPP 2171

**Titel** **Dynamische Benetzung von flexiblen, adaptiven und schaltbaren Polymerteppichen**

**Title** **Dynamic Wetting on Flexible, Adaptive and Switchable Polymer Carpets**

**Geschäftszeichen / Reference No.** **JO 287/13-1**

**Antragsteller / Applicant** **Professor Dr. Rainer Jordan**  
Technische Universität Dresden  
Fakultät Chemie und Lebensmittelchemie  
Professur für Makromolekulare Chemie  
Dresden

**Beantragte Mittel / Budget Request:**

	Beantragt / Requested		
<b>Dauer [Monate] / Duration [Months]</b>	<b>36</b>		
<b>JO 287/13-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>209.470</b>		
<b>Professor Dr. Rainer Jordan</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>159.500</b>
Doktorandin/Doktorand und Vergleichbare 75 % / Doctoral Researcher or Comparable 75 %	1	36	145.100
Hilfskräfte / Support Staff			14.400
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>49.970</b>
Geräte bis 10.000 Euro, Software und Verbrauchsmaterial / Equipment up to EUR 10,000, Software and Consumables			33.000
Publikationen / Publications			2.250
Reisen / Travel			14.720

## **Zusammenfassung**

Ziel des Projekts ist die Synthese schaltbarer, adaptiver und flexibler Polymerteppiche (gepfropfte Polymerbürsten auf flexiblen ultradünnen Nanoschichten) mittels definierter oberflächeninitiiert Polymerisation und das Studium der dynamischen Benetzung auf den adaptiven Polymerteppichen. Abhängig von der Polymerpfropfungsdichte und -schichtdicke sowie dem Quellungsverhalten der Polymerbürsten in Lösemitteln reagieren flexible Polymerteppiche mit deutlicher Faltung aufgrund der mechanochemischen Kräfte der gebundenen Polymerbürste. Die starke Topographieänderung führt zu einer signifikanten Änderung der Benetzungsverhaltens der Polymerteppiche. In diesem Projekt werden die Bereiche, die Dynamik und die Reversibilität des Benetzungsverhaltens von adaptiven Polymerteppichen als Funktion der Pfropfungsdichte, Schichtdicke und Zusammensetzung der Polymerbürsten sowie der Einfluss externer Stimuli (Temperatur, Lösemittel, pH) untersucht. Ebenso werden strukturierte Polymerteppiche und Gradienten synthetisiert und untersucht da Heterogenitäten eine gerichtete Faltung verursacht die möglicherweise eine starke Anisotropie der Benetzung zur Folge hat.

## **Summary**

In the proposed work, we will synthesize stimuli-responsive polymer carpets (covalently grafted polymer brushes on flexible, ultrathin nanosheets) by means of a defined surface-initiated polymerization technique and investigate the wetting dynamics on the adaptive surfaces. Depending on the brush grafting density and thickness, as well as on its swelling by liquids, the mechanochemical forces of the attached brush induces strong buckling of the entire polymer carpet and dramatically changes the morphology of the composite (strong buckling). This in turn, dramatically changes the wetting behavior of liquids on such surfaces. We will investigate the range, dynamics and reversibility of the morphology change and thus, wetting behavior on these composites as a function of polymer brush parameters (grafting density, thickness), type of polymer and stimulus (temperature, pH, solvent). Furthermore, graded and patterned polymer brushes will be investigated as patterning induces directed buckling that should result in a strong anisotropic and dynamic wetting behavior.

**Antragstyp** Schwerpunktprogramm - Einzelantrag - Neuantrag

**Type of Proposal** Priority Programme - Individual Proposal - New Proposal

**Antragsdauer / Requested Duration** 36 Monate / 36 months

**Fach** Statistische Physik, Weiche Materie, Biologische Physik, Nichtlineare Dynamik

**Subject Area** Statistical Physics, Soft Matter, Biological Physics, Nonlinear Dynamics

**Rahmenprojekt / Framework Project** SPP 2171

**Titel** **Dynamik Flüssig-Flüssig-Elastischer Dreiphasenlinien**

**Title** **Dynamics of Liquid-Liquid-Elastic Three Phase Lines**

**Geschäftszeichen / Reference No.** **KA 4747/2-1**

**Antragsteller / Applicant** **Dr. Stefan Karpitschka**  
Max-Planck-Institut für Dynamik und Selbstorganisation  
Abteilung Dynamik komplexer Fluide  
Göttingen

**Beantragte Mittel / Budget Request:**

	Beantragt / Requested		
<b>Dauer [Monate] / Duration [Months]</b>	<b>36</b>		
<b>KA 4747/2-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>204.050</b>		
<b>Dr. Stefan Karpitschka</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>170.900</b>
Doktorandin/Doktorand und Vergleichbare 75 % / Doctoral Researcher or Comparable 75 %	1	36	145.100
Hilfskräfte / Support Staff			25.800
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>33.150</b>
Geräte bis 10.000 Euro, Software und Verbrauchsmaterial / Equipment up to EUR 10,000, Software and Consumables			16.500
Publikationen / Publications			2.250
Reisen / Travel			14.400

**Zusammenfassung** Die dynamische Benetzung von starren Oberflächen wird durch ein Gleichgewicht zwischen Kapillarkräften und viskoser Dissipation im Inneren der Flüssigkeit bestimmt. Auf weichen Oberflächen ist die

Benetzungsdynamik jedoch typischerweise von ganz anderem physikalischen Ursprung. Kapillarkräfte an der Dreiphasenlinie verformen den weichen Festkörper zu einem scharfen Benetzungsgrat. Eine Spreitbewegung der Flüssigkeit bewirkt eine dynamische Veränderung dieser Deformation. Die damit verbundene Verlustleistung im Festkörper und nicht die viskose Flüssigkeitsströmung kontrolliert die Benetzungsdynamik. Ein vollständig quantitatives Verständnis der Benetzungsdynamik auf weichen Oberflächen bleibt schwer fassbar, da sich die verfügbaren Theorien auf lineare Viskoelastizitätslehre beschränken, die zugehörigen Experimente mit Flüssigkeits-Gas Grenzflächen ein stark nichtlineares Verhalten zeigen. Der Ursprung der experimentell beobachteten Nichtlinearitäten liegt in den starken Kräften die von Flüssigkeits-Gas Grenzflächen auf weiche Festkörper ausgeübt werden und zu Scherungen von 100% und mehr führen. In dem vorgeschlagenen Projekt wollen wir flüssig-flüssig Kontaktlinien auf weichen Festkörpern verwenden, um die Benetzungsdynamik der weichen Oberflächen zu untersuchen. Auf diese Weise können die Kapillarkräfte reduziert und sogar gezielt eingestellt werden, da die Art der äußeren Phase zusätzlich gesteuert werden kann. In der Nähe eines kritischen Punktes kann die Oberflächenspannung beliebig klein werden. Dadurch wird das Regime der linearen Viskoelastizitätslehre auch in Experimenten zugänglich. Eine systematische Erhöhung der Oberflächenspannung steuert daraufhin die Amplitude verschiedener Quellen nichtlinearen Verhaltens und erlaubt damit die Unterscheidung der einzelnen beitragenden Phänomene. Dieses Wissen würde den Weg ebnen um Kontaktlinien als ideale Mikrorheometer zu verwenden, da Flüssigkeitsoberflächen eine der schärfsten bekannten Linienkräfte auf ihrem Substrat ausüben. In engem Zusammenhang mit dem Fall der weichen Benetzung von flüssig-flüssig Kontaktlinien steht auch die Frage, wie eine flüssig-flüssig Phasenseparation in Kontakt mit weichen Oberflächen verläuft. Der kürzlich entdeckte Sinkmodus kleiner Tröpfchen könnte die Keimbildung erleichtern. Das kapillare Zusammenspiel von Tropfenensembles auf weichen Oberflächen könnte zu einer neuartigen Vergrößerungsdynamik führen. Wir wollen einen Referenzfall mit einfachen Flüssigkeiten und weichen Feststoffen etablieren, der sich auch für die Phasentrennung in der Zellbiologie als aufschlussreich erweisen könnte, wo sich membranlose Organellen, derzeit ein sehr aktives Forschungsthema, häufig in Kontakt mit elastischen Zellmaterialien bilden.

## Summary

The dynamical wetting of rigid surfaces is governed by a balance of capillary forces and viscous dissipation inside the liquid. On soft surfaces however, spreading dynamics typically stem from quite different physics. Capillary forces at the three phase line deform the soft solid into a sharp wetting ridge. A spreading motion of the liquid causes a dynamical change of this deformation. The associated dissipation in the solid, and not the viscous liquid flow, governs the spreading motion. A fully quantitative understanding of the wetting dynamics on soft surfaces remains elusive because available theories are limited to the regime of linear viscoelasticity, but experiments with liquid-vapor-soft solid contact lines show strong nonlinear behavior. The origin of the experimentally observed nonlinearities lies in the strong tractions that liquid-vapor interfaces exert on soft solids, deforming them to strains of order unity and larger. In the proposed research we want to use liquid-liquid-soft solid contact lines to study soft wetting dynamics. This way, the capillary traction can be reduced and even tuned, due to the additional control over the nature of the outer phase. Close to a critical point, surface tension may become arbitrarily small. Hence the regime of linear viscoelastic response will become accessible also in experiments. A systematic increase of the surface tension will control the amplitude of various sources of nonlinear behavior, and thereby disentangle their contributions. Such knowledge would pave the way for using contact lines as near-ideal microrheometers, since liquid surfaces exert one of the sharpest known line

tractions onto their substrate. Intimately related to the liquid-immersed case of soft wetting is the question of how liquid-liquid phase separation proceeds in contact with soft surfaces. The previously discovered sinking mode of small droplets could facilitate nucleation. The capillary interaction of ensembles of droplets on soft surfaces could lead to a new kind of coarsening dynamics. We want to establish a reference case using simple liquids and soft solids, which could prove insightful also for phase separation in cell biology where membraneless organelles, a highly active research topic at the moment, form frequently in contact with elastic materials in the cell.

**Bemerkung der  
Geschäftsstelle /**

**Comment by the DFG  
Head Office**

Es liegt ein befristeter Arbeitsvertrag vor, der am 30.04.2022 ausläuft.  
The applicant's fixed-term contract will expire on 30.04.2022 .

**Antragstyp** Schwerpunktprogramm - Einzelantrag - Neuantrag

**Type of Proposal** Priority Programme - Individual Proposal - New Proposal

**Antragsdauer / Requested Duration** 36 Monate / 36 months

**Fach** Physikalische Chemie von Molekülen, Flüssigkeiten und Grenzflächen - Spektroskopie, Kinetik

**Subject Area** Physical Chemistry of Molecules, Interfaces and Liquids - Spectroscopy, Kinetics

**Rahmenprojekt / Framework Project** SPP 2171

**Titel** **Zusammenhang zwischen Quelfähigkeit / Quellkinetik und dynamischer Benetzung von adaptiven Polyelektrolytoberflächen**

**Title** **Relation between swelling ability / swelling kinetics and dynamic wetting of adaptive polyelectrolyte surfaces**

**Geschäftszeichen / Reference No.** **KL 1165/29-1**

**Antragstellerin / Applicant** **Professorin Dr. Regine von Klitzing**  
Technische Universität Darmstadt  
Fachbereich Physik  
Fachgebiet Weiche Materie an Grenzflächen  
Darmstadt

**Mitverantwortlicher / Co-Applicant** Dr. Olaf Soltwedel  
Technische Universität Darmstadt  
Fachbereich Physik  
Fachgebiet Weiche Materie an Grenzflächen  
Darmstadt

**Beantragte Mittel / Budget Request:**

	Beantragt / Requested		
<b>Dauer [Monate] / Duration [Months]</b>	<b>36</b>		
<b>KL 1165/29-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>204.350</b>		
<b>Professorin Dr. Regine von Klitzing</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>151.100</b>
Doktorandin/Doktorand und Vergleichbare 75 % / Doctoral Researcher or Comparable 75 %	1	36	145.100
Hilfskräfte / Support Staff			6.000
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>53.250</b>

Geräte bis 10.000 Euro, Software und Verbrauchsmaterial / Equipment up to EUR 10,000, Software and Consumables			38.500
Publikationen / Publications			2.250
Reisen / Travel			12.500

**Bewilligungen der letzten vier Jahre zu anderen Projekten (seit 16.10.2014 ) /  
DFG Project Funding Over the Last Four Years (since 16.10.2014):**

Datum / Date Gz / Ref		Euro
	<b>Professorin Dr. Regine von Klitzing</b>	<b>1.720.524</b>
16.05.2018 KL 1165/28-1	Paketantrag: Einzelantrag / Package Proposals: Individual Proposal Skalenübergreifende Charakterisierung der Wechselwirkung von Cellulosegrenzflächen mit Polymeren / Multi-Scale Characterisation of Interactions between Cellulose Interfaces and Polymers	229.000
07.05.2018 KL 1165/27-1	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal Rheologie und Grenzflächenstrukturen von Protein- und Partikelstabilisierten Schäumen - ein Multiskalenansatz / Rheology and structural properties of protein and particle-stabilized foams - a multi-scale approach	221.400
13.12.2017 KL 1165/26-1	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal Mechanische Verstärkung von Polymer-Hydrogelen durch den Zusatz von Nanopartikeln / Stabilization Impact of Nano-particles to Polymeric Hydrogels	254.100
01.12.2017 INST 131/680-2	SFB/Transregio: Einzelantrag / CRC/Transregio: Individual Proposal Design von Pickering-Emulsionen zur Auftrennung von Produkten unterschiedlicher Polarität / Design of Pickering emulsions for the separation of products with different polarity	691.700
18.09.2017 KL 1165/24-1	Schwerpunktprogramm: Einzelantrag / Priority Programmes: Individual Proposal Überlagerung von Partikelwechselwirkungen und Hydratationseffekten auf die Rheologie von beschleunigten Systemen / Superposing particle interactions and hydration effects on the rheology of accelerated cementitious systems (SPHERE)	173.350
04.05.2015 KL 1165/12-3	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal Licht-getriggerte Polymerdiffusion durch anisotrope Multizonenfilme / Light- triggered polymer diffusion in anisotropic multizone films	150.974

**Zusammenfassung**

Das Projekt befasst sich mit dem Zusammenhang zwischen der Quellfähigkeit bzw. -Kinetik und dynamischer Benetzung adaptiver Polyelektrolytoberflächen in Gegenwart von Wasser. Um die Verdunstung von Benetzungseffekten trennen zu können, müssen gut definierte Versuchsbedingungen gewährleistet sein. Für Verdampfungsstudien mit Wasser werden Experimente in einer offenen Zelle durchgeführt. Experimente, die eine Verdampfung ausschließen sollen, werden in einer geschlossenen Zelle in gesättigtem Dampf durchgeführt. Dies ist mit einer Vorquellung der Polymerbeschichtung verbunden. Daher wird auch Glycerin als Benetzungsflüssigkeit verwendet. Die Polyelektrolytschichten können im Glycerin quellen, es ist aber bei Raumtemperatur schwerflüchtig. Die offensichtlichste Frage im Zusammenhang mit unseren Vorarbeiten ist, warum bestimmte Polyelektrolytschichten das gleiche Quellverhalten in gesättigter Dampfatmosfera und gegen flüssiges Wasser aufweisen und andere unter beiden Bedingungen einen unterschiedlichen Quellgrad zeigen. Hat das etwas mit dem off-even-Effekt, mit Ladungseffekten oder mit der Schwellungsfähigkeit zu tun? Daher werden verschiedene Polyelektrolytbeschichtungen, d.h. PEM- und PNIPAM-Mikrogelschichten mit

unterschiedlicher Ladungsdichte und Ladungszeichen, unterschiedlicher Quellfähigkeit und unterschiedlichem hydrophilen/hydrophoben Gleichgewicht hergestellt. Bei PNIPAM-Mikrogelen wird die Quellfähigkeit über die Temperatur gesteuert. Daher wird ihre dynamische Benetzung unterhalb und oberhalb des VPTT untersucht.

Die Relaxationszeit, die durch die Abscheidung eines festsitzenden Tropfens auf das Substrat bestimmt wird, wird untersucht. Die Relaxationszeit bezieht sich auf den vor- und zurückgehenden Winkel, der beim Saugen und Pumpen eines Tropfens oder bei einem sich bewegenden Tropfen auftritt. Daher wird ein zusätzliches Szenario zur Realisierung von vor- und zurückgehenden Kontaktwinkeln (G. Auernhammer) verwendet. Die Relaxationszeit des Kontaktwinkels und die Differenz zwischen vorrückendem und rückläufigem Kontaktwinkel wird mit der Änderung der Molekularstruktur an der Polymeroberfläche korreliert (B. Braunschweig, M. Sega). Die Dissipationsenergie der Änderung der Molekularstruktur wird aus den dynamischen Benetzungsdaten bestimmt.

Elektrokinetische Effekte werden durch Änderung der Oberflächenladung (Ladungsmenge während der Synthese, pH-Wert) und durch Änderung der Salzkonzentration der benetzenden wässrigen Lösung (C. Holm) untersucht. Um die Komplexität zu erhöhen, wird ein Wasser-Ethanol-Gemisch als benetzende Flüssigkeit untersucht. Der Co-Nonsolvenzeffekt bei PNIPAM führt zu unterschiedlichen Schwellungen, die wahrscheinlich zu einer Änderung des Benetzungsverhaltens führen werden.

Für Anwendungen werden unsere Polymerbeschichtungen mit Lipidvesikeln (M. Tanaka) benetzt und als Modellsysteme zum besseren Verständnis dynamischer Benetzungsprozesse im Fasernetzwerk eingesetzt. (M. Biesalski).

## Summary

The project addresses the relation between swelling ability / kinetics and dynamic wetting of adaptive polyelectrolyte surfaces in presence of water. In the present project adaptation refers to swelling of the polymer coating caused by the (partial) uptake of water.

In order to separate evaporation from wetting effects, well-defined experimental conditions have to be ensured. For evaporation studies with water experiments in an open cell will be carried out. Experiments which should exclude evaporation are carried out in a closed cell in saturated vapor. This is inherently connected to a pre-swelling of the polymer coating. Therefore, also glycerol will be used as wetting liquid. The polyelectrolyte layers can swell in glycerol, but it is almost not volatile at room temperature. Glycerol gives the opportunity to place a droplet onto a polyelectrolyte surface without evaporation and without pre-swelling of the polyelectrolyte layer.

The most obvious question related to our preliminary work is, why certain polyelectrolyte layers have the same swelling ratio in saturated vapor and against liquid water (under the droplet) and others show a different swelling degree under both conditions. Is that related to the odd-even effect, to charge effects or the swelling ability? Therefore different polyelectrolyte coatings, i.e. PEM and PNIPAM microgel layers of different charge density and sign of charge, different swelling ability and different hydrophilic/hydrophobic balance will be prepared. In case of PNIPAM microgels the swelling ability is controlled via temperature. Therefore their dynamic wetting will be studied below and above the VPTT.

The relaxation time determined by deposition of a sessile drop onto the substrate and will be studied. The relaxation time will be related to the advancing/receding angle which occur during sucking and pumping a droplet or at a moving droplet. Therefore additional scenario will be used to realize advancing and receding contact angles (G. Auernhammer). The relaxation time of the contact angle and the difference in advancing and receding contact angle will be correlated to the change in molecular structure at the polymer surface (B. Braunschweig, M. Sega). The dissipation energy of the



change in molecular structure will be determined from the dynamic wetting data.

Electrokinetic effects will be studied by changing the surface charge (amount of charge during synthesis, pH) and by changing the salt concentration of the wetting aqueous solution (C. Holm).

In order to increase the complexity a water--ethanol mixture will be studied as wetting liquid. The co-nonsolvency effect in case of PNIPAM will lead to different swollen states which probably will lead to a change in wetting behavior.

Towards applications, our polymer coatings will be wetted by lipid vesicles (M. Tanaka}) and they will be used as model systems for a better understanding of dynamic wetting processes in the fibrous network. (M. Biesalski).

**Antragstyp** Schwerpunktprogramm - Einzelantrag - Neuantrag

**Type of Proposal** Priority Programme - Individual Proposal - New Proposal

**Antragsdauer / Requested Duration** 36 Monate / 36 months

**Fach** Strömungsmechanik

**Subject Area** Fluid Mechanics

**Rahmenprojekt / Framework Project** SPP 2171

**Titel** **Hochgenaue numerische Simulation von Benetzung, Entnetzung und Flüssigkeitsteilung zwischen elastischen Oberflächen**

**Title** **Highly accurate numerical simulation of wetting, dewetting and fluid-splitting phenomena between elastic surfaces**

**Geschäftszeichen / Reference No.** **KU 2719/5-1**

**Antragsteller / Applicant** **Dr. Florian Kummer**  
Technische Universität Darmstadt  
Fachbereich Maschinenbau  
Fachgebiet für Strömungsdynamik  
Darmstadt

**Beantragte Mittel / Budget Request:**

	Beantragt / Requested		
<b>Dauer [Monate] / Duration [Months]</b>	<b>36</b>		
<b>KU 2719/5-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>251.670</b>		
<b>Dr. Florian Kummer</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>241.020</b>
Doktorandin/Doktorand und Vergleichbare 100 % / Doctoral Researcher or Comparable 100 %	1	36	193.500
Hilfskräfte / Support Staff			47.520
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>10.650</b>
Geräte bis 10.000 Euro, Software und Verbrauchsmaterial / Equipment up to EUR 10,000, Software and Consumables			1.000
Publikationen / Publications			2.250
Reisen / Travel			7.400

**Bewilligungen der letzten vier Jahre zu anderen Projekten (seit 15.10.2014 ) /  
DFG Project Funding Over the Last Four Years (since 15.10.2014):**

Datum / Date Gz / Ref		Euro
	<b>Dr. Florian Kummer</b>	<b>8.808</b>
19.11.2014 KU 2719/3-1	Forschungsstipendium: Rückkehrstipendium / Research Fellowship: Return Grant Rückkehrstipendium / Rückkehrstipendium	8.808

**Zusammenfassung**

Gegenstand der numerischen Simulation in diesem Projekt ist die Untersuchung von sogenannten flexographischen Druckverfahren, bei welchen die Druckplatte aus einem flexiblen Material besteht. Der Hauptvorteil des Flexodrucks besteht darin, dass umweltfreundliche, wasserbasierte Farben anstelle von Farben auf Mineralölbasis verwendet werden können wie sie etwa für den Offsetdruck unumgänglich sind. Die Verwendung eines flexiblen Materials für die Druckwalze bzw. die Druckplatte ist unumgänglich: Das Plattenmaterial bildet in Kombination mit der Farbe ein – vermutlicherweise – selbst-regulierendes System, wodurch ungewünschte Druckartefakte (viskose Finger) beim Ablösen der Platte vom Substrat teilweise vermieden oder reduziert werden können. Für viele Anwendungen, etwa im Bereich gedruckter Schaltungen, ist jedoch eine höhere Präzision notwendig. Die zugrundeliegenden physikalischen Prinzipien, insbesondere das Strömungsverhalten im Druckspalt sowie die Interaktion der Flüssigkeit mit der Druckplatte beim Ablösen derselben (Flüssigkeitsspaltung) sind jedoch weitgehend unverstanden. Das Ziel dieses Projekts ist, die zugrundeliegenden physikalischen Phänomene, insbesondere das Zusammenspiel von flexiblen Materialien und Fluiden bei Be- und Entnetzungsvorgängen durch numerische Simulationen zu untersuchen. Eine Herausforderung sind dabei vor allem die extremen Bedingungen im Walzenspalt, gegeben durch die hohe Druckgeschwindigkeit sowie die erwarteten hohen Drücke. Das zu entwickelnde Simulationsverfahren basiert dabei auf einer von den Antragstellern entwickelten numerischen Methode für Zweiphasenströmungen. Dies sind Gemengen zweier nicht-mischbarer Fluide, im vorliegenden Fall eben die Druckfarbe sowie die Umgebungsluft. Dieses Setup wird nun um eine dritte Phase, d.h. einen flexiblen Festkörper ergänzt. Treffen Luft, Farbe sowie Festkörper aufeinander, so spricht man von einer Dreiphasen-Kontaktlinie. Die numerische Methode in diesem Projekt ist ein sogenanntes erweitertes diskontinuierliches Galerkin Verfahren, welches speziell entwickelt wurde um Zweiphasenströmungen mit Kontaktlinien hochgenau zu simulieren. Dabei können insbesondere die Grenzflächen zwischen Luft und Flüssigkeit, sowie die Dreiphasen-Kontaktlinie hochgenau verfolgt werden. Für die gegebene Problemstellung muss das Verfahren mit einer Simulationemethode für Festkörper kombiniert werden. Sobald dies implementiert, sowie die Gesamtmethode zufriedenstellen verifiziert und validiert ist, werden in der zweiten Projektphase, in Zusammenarbeit mit Druckexperten, Parameterstudien durchgeführt, welche physikalische Aufschlüsse über das flexographische Druckverfahren liefern sollen.

**Summary**

The subject of numerical simulation in this project is the investigation of so-called flexographic printing processes, in which the printing plate consists of a flexible material. The main advantage of flexographic printing is that environmentally friendly, water-based inks can be used instead of mineral oil-based inks, which are indispensable for offset printing. The use of a flexible material for the printing roller or printing plate is indispensable: the

plate material in combination with the ink forms - presumably - a self-regulating system, whereby unwanted printing artifacts (viscous fingers) when the plate is detached from the substrate can be partially avoided or reduced. However, for many applications, such as printed circuit boards, higher precision is required. However, the underlying physical principles, in particular the flow behaviour in the printing nip and the interaction of the liquid with the printing plate when it is detached (liquid splitting) are largely not understood.

The aim of this project is to investigate the underlying physical phenomena, in particular the interaction of flexible materials and fluids during wetting and dewetting processes by numerical simulations. The extreme conditions in the nip, given by the high printing speed and the expected high pressures, are a particular challenge.

The simulation procedure to be developed is based on a numerical method for two-phase flows, which has been developed by the applicants. These flows are mixtures of two immiscible fluids, in this case the printing ink and the ambient air. This setup is now supplemented by a third phase, i.e. a flexible solid. When air, color and solids meet, this is referred to as a three-phase contact line.

The numerical method in this project is a so-called extended discontinuous Galerkin method, which was specially developed to simulate two-phase flows with contact lines with high precision. Especially the interfaces between air and liquid as well as the three-phase contact line can be followed with high accuracy. For the given problem, the method must be combined with a simulation method for solids.

As soon as this has been implemented and the overall method has been verified and validated, parameter studies will be carried out in the second project phase, in cooperation with printing experts, to provide physical information about the flexographic printing process.

**Antragstyp** Schwerpunktprogramm - Einzelantrag - Neuantrag

**Type of Proposal** Priority Programme - Individual Proposal - New Proposal

**Antragsdauer / Requested Duration** 36 Monate / 36 months

**Fach** Physikalische Chemie von Festkörpern und Oberflächen,  
Materialcharakterisierung

**Subject Area** Physical Chemistry of Solids and Surfaces, Material Characterisation

**Rahmenprojekt / Framework Project** SPP 2171

**Titel** **Untersuchung dynamischer Benetzung an schaltbaren Oberflächen im Mikro- und Makrobereich**

**Title** **Study of dynamic wetting on switchable surfaces at the micro and macroscale**

**Geschäftszeichen / Reference No.** **LE 2936/11-1**

**Antragsteller / Applicant** **Privatdozent Dr. Pavel Levkin**  
Karlsruher Institut für Technologie (KIT)  
Institut für Toxikologie und Genetik (ITG)  
Karlsruhe

**Beantragte Mittel / Budget Request:**

	Beantragt / Requested		
<b>Dauer [Monate] / Duration [Months]</b>	<b>36</b>		
<b>LE 2936/11-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>237.310</b>		
<b>Privatdozent Dr. Pavel Levkin</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>213.750</b>
Postdoktorandin/Postdoktorand und Vergleichbare 100 % / Postdoctoral Researcher or Comparable 100 %	1	36	209.700
Hilfskräfte / Support Staff			4.050
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>23.560</b>
Geräte bis 10.000 Euro, Software und Verbrauchsmaterial / Equipment up to EUR 10,000, Software and Consumables			13.790
Publikationen / Publications			2.250
Reisen / Travel			7.520

## Wissenschaftliche Preise / Scientific Prizes:

Datum / Date		Euro
	<b>Privatdozent Dr. Pavel Levkin</b>	<b>20.000</b>
02.06.2015	Heinz Maier-Leibnitz-Preis / Heinz Maier-Leibnitz Prize	20.000

### Zusammenfassung

Intelligente Oberflächen mit dynamisch-schaltbarer Benetzbarkeit ziehen großes Interesse auf sich aufgrund ihrer potentiellen Anwendungen. Dennoch wird die Benetzbarkeit einer Oberfläche, trotz intensiver Untersuchungen an schaltbaren und speziell benetzbaren Oberflächen, hauptsächlich durch Messungen des Kontaktwinkels im Makromaßstab charakterisiert und wurde unseres Wissens nach noch nie auf der Mikroebene untersucht, um die Reaktivität der Mikrostrukturen mit denen der Makroebene zu verbinden.

Die Benetzung einer Oberfläche ist von Natur aus ein Phänomen, das auf mehreren Größenebenen definiert wird: Durch physikalisch-chemische Wechselwirkungen im Mikromaßstab und durch die fest-flüssig Grenzflächen im Makromaßstab. Es ist daher von großer Wichtigkeit, Änderungen der Benetzbarkeit von schaltbaren Oberflächen nicht nur auf der makroskopischen Längenskala durch Kontaktwinkel und Abrutschwinkel zu messen, sondern auch mikroskopisch, um die enge Verbindung zwischen mikro- und makroskopischen Dynamiken zu verstehen.

In diesem Antrag ist es unser Ziel, systematisch die Dynamiken der Adhäsion von Tropfen an Mikrostrukturen mit definierten dreidimensionalen Formen, die mit Hilfe des häufig benutzten thermoresponsiven Polymers wie poly(N-isopropylacrylamide) (polyNIPAAm) hergestellt werden, zu untersuchen.

Um die Benetzbarkeit und deren Dynamik im Mikromaßstab zu untersuchen, werden wir die neu entwickelte Technologie der „scanning droplet adhesion microscopy (SDAM)“ verwenden und diese Ergebnisse mit den makroskopisch bestimmten voran- und zurückschreitenden Kontaktwinkeln auf größeren flachen und strukturierten Oberflächen vergleichen. Diese Studie hat mehrere Ziele: Zuerst möchten wir verstehen, wie die Benetzbarkeit zwischen Mikrostrukturen und großen Oberflächen aus dem gleichen Material variieren. Weiterhin wollen wir den Einfluss der geometrisch unterschiedlichen Mikrostrukturen und der Zusammensetzung des Polymers auf die mikro- und makroskopischen Benetzbarkeit untersuchen. Schließlich wollen wir die dynamischen Prozesse der Benetzung von schaltbaren Oberflächen mit einer Flüssigkeit im Mikro- und Makromaßstab verbinden. Um Array-Systeme mit „re-entrant“-Geometrie-Mikrostrukturen herzustellen, die aus polyNIPAAm mit definierter polymerischer Komposition bestehen, werden wir die direkte Laser-Schreibung (DLW) Technik adaptieren. Durch DLW können Mikrostruktur-Arrays mit genau kontrollierter räumlich chemischer Beschaffenheit und definierter 3D-Geometrie (Merkmale mit einer Auflösung von bis zu 100 nm) einfach fabriziert werden. Dies wird uns erlauben systematisch die reaktionsfähige Benetzbarkeit als Funktion von sowohl der Polymer-Beschaffenheit und der Mikrostruktur-3D-Formen und -Größe zu studieren, was – soweit uns bekannt ist – bisher noch nicht publiziert wurde wegen der Schwierigkeit, die darin liegt Mikrostrukturen mit solcher Komplexität herzustellen und zu charakterisieren.

### Summary

Smart surfaces with switchable dynamic wettabilities attract great interest because of their potential applications. However, despite the extensive studies on switchable surfaces and surfaces with special wettability, the switching of surface wettability is mostly characterized by standard contact angle measurements at the macroscale and, to the best of our knowledge,

has never been investigated at the microscale in order to correlate the responsive properties of microstructures with the macroscopic responsiveness. As wetting is inherently a multi-scale phenomenon, physico-chemical interactions at the micro-scale solid-liquid interface determine dynamics of wettability at the macroscale. Therefore, it is of great importance to investigate wetting variations on switchable surfaces not only at the macroscopic length scale, for example, by measuring contact angles or sliding angles, but also on microscopic length scale to understand the intimate relationship between the micro and macroscale wetting dynamics. In this proposal, we aim to systematically investigate the dynamics of droplet adhesion to microstructures with defined 3D shapes build from a responsive polymer, such as poly(N-isopropylacrylamide) (polyNIPAAm) as a commonly used temperature responsive polymer material. In order to study wettability and its dynamics at the microscale, we will use a newly developed scanning droplet adhesion microscopy (SDAM) and compare these results with the macroscopic advancing and receding contact angle measurements on corresponding large flat as well as structured surfaces. There are several goals of this study. First of all, we would like to understand how the wettability switching can vary when microstructures are compared with large surfaces made of the same materials. We want to study the influence of different microstructure geometrical features as well as composition of the polymer microstructures on both micro- and macroscopic wettability. Finally, we want to bridge the dynamic liquid wetting processes on switchable surfaces at micro- and macro-length scales. Aiming at revealing microscale spatial wetting heterogeneity on superhydrophobic or superoleophobic surfaces, SDAM's unique advantage is that it can be used to characterize dynamic wetting events on individual microposts by measuring droplet adhesion force (snap-in and pull-off forces) with spatial resolution down to 10  $\mu\text{m}$  and force sensitivity down to 5 nN. The SDAM technology has been recently developed by R. Ras and Q. Zhou at Aalto University. To fabricate arrays of microstructures with reentrant geometry and made of polyNIPAAm of defined polymeric composition, we will adopt the direct laser writing (DLW) technique. This will enable us to systematically investigate the responsive wettability as a function of both polymer composition and microstructure 3D shape and size.

**Antragstyp** Schwerpunktprogramm - Einzelantrag - Neuantrag

**Type of Proposal** Priority Programme - Individual Proposal - New Proposal

**Antragsdauer / Requested Duration** 36 Monate / 36 months

**Fach** Strömungsmechanik

**Subject Area** Fluid Mechanics

**Rahmenprojekt / Framework Project** SPP 2171

**Titel** **Direkte numerische Simulation von aufprallenden Tropfen auf elastischen Grenzflächen**

**Title** **Direct numerical simulation of droplet impacts with an elastic fluidic interface**

**Geschäftszeichen / Reference No.** **LE 3303/4-1**

**Antragsteller / Applicant** **Dr. Gregory Lecrivain, Ph.D.**  
Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf (HZDR)  
Institut für Fluidodynamik  
Dresden

**Beantragte Mittel / Budget Request:**

	Beantragt / Requested		
<b>Dauer [Monate] / Duration [Months]</b>	<b>36</b>		
<b>LE 3303/4-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>158.043</b>		
<b>Dr. Gregory Lecrivain, Ph.D.</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>149.793</b>
Doktorandin/Doktorand und Vergleichbare 75 % / Doctoral Researcher or Comparable 75 %	1	36	145.100
Hilfskräfte / Support Staff			4.693
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>8.250</b>
Geräte bis 10.000 Euro, Software und Verbrauchsmaterial / Equipment up to EUR 10,000, Software and Consumables			1.000
Publikationen / Publications			2.250
Reisen / Travel			5.000



## **Zusammenfassung**

Das Aufprallen eines Tropfens mit niedriger kinetischer Energie auf ein elastisches Substrat tritt in vielen industriellen Anwendungen, wie beispielsweise beim Tintenstrahldruckverfahren und bei der Geweberekonstruktion durch „Tissue Engineering“, auf. Die Dynamik von aufprallenden Tropfen auf einem harten Substrat ist inzwischen gut verstanden und wurde mithilfe von direkten numerischen Simulationen berechnet. Der Tropfenaufprall auf ein elastisches Substrat ist dagegen bis heute kaum untersucht worden. Ziel des Vorhabens ist es, die dynamische Wechselwirkung zwischen aufprallenden Tropfen und einem fluidischen, elastischen Substrat zu modellieren und zu simulieren. Der Tropfenaufprall auf Oberflächen, die mit einem dünnen Flüssigkeitsfilm bedeckt sind, wie z.B. mit Öl versetzte texturierte Materialoberflächen (eng. lubricant-infused surfaces), sowie auf freistehenden smektischen Filmen, werden im Rahmen dieses Schwerpunktprogramms von Partnern experimentell untersucht. Dabei sorgt das flüssige Substrat für eine elastisch rückwirkende Kraft und die Viskosität des umgebenden Fluids für eine dämpfende Kraft. Ein Dreiphasenmodell, basierend auf der Phasenfeldtheorie, wird weiterentwickelt und soll für die Simulation von einzelnen und mehreren oszillierenden Tropfen angewendet werden. Mithilfe von direkten numerischen Simulationen wird ein substantieller Beitrag zum besseren Verständnis der Dynamik von aufprallenden Tropfenensembles auf einem elastischen Substrat geleistet.

## **Summary**

The low-energy impact of a liquid droplet with an elastic substrate is a ubiquitous phenomenon occurring in various industrial applications. Notable examples include ink-jet printing and tissue engineering. The droplet impact with a hard substrate is now well understood and has been studied for over a century. Various direct numerical simulations have also been performed. The numerical investigation of a droplet impacting with an elastic substrate has, however, received much less attention. This project aims at simulating the complex interaction between impacting droplets and an elastic fluidic substrate. Hard surfaces covered by a thin liquid film, such as oil-infused surfaces, and freestanding smectic films, will be considered. The droplet impact with such substrates will also be investigated experimentally by partners involved in this priority programme. In such experiments, the fluidic substrate acts as restoring force, while the viscosity of the ambient fluid acts as a damping force. The further development of a ternary fluid model, based on the phase field theory, will allow the direct numerical simulation of single and multiple oscillating droplets. Results of this study will contribute to a better understanding of the dynamics of droplet ensembles impacting with an elastic substrate.

**Antragstyp** Schwerpunktprogramm - Einzelantrag - Neuantrag

**Type of Proposal** Priority Programme - Individual Proposal - New Proposal

**Antragsdauer / Requested Duration** 36 Monate / 36 months

**Fach** Herstellung und Eigenschaften von Funktionsmaterialien

**Subject Area** Synthesis and Properties of Functional Materials

**Rahmenprojekt / Framework Project** SPP 2171

**Titel** **Anisotrope Oberflächenspannung für adaptive Selbstfaltungsprozesse**

**Title** **Anisotropic surface tension for adaptive self-folding processes**

**Geschäftszeichen / Reference No.** **LO 1986/5-1**

**Antragsteller / Applicant** **Dr. Pierre Lorenz**  
Leibniz-Institut für Oberflächenmodifizierung e.V. (IOM)  
Leipzig

**Kooperationspartnerinnen und Kooperationspartner / Cooperation Partners** Dr. Gregory Lecrivain, Ph.D.  
Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf (HZDR)  
Institut für Fluidodynamik  
Dresden

**Beantragte Mittel / Budget Request:**

	<b>Beantragt / Requested</b>		
<b>Dauer [Monate] / Duration [Months]</b>	<b>36</b>		
<b>LO 1986/5-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>349.600</b>		
<b>Dr. Pierre Lorenz</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>307.200</b>
Doktorandin/Doktorand und Vergleichbare 75 % / Doctoral Researcher or Comparable 75 %	2	36	290.200
Hilfskräfte / Support Staff			17.000
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>42.400</b>
Geräte bis 10.000 Euro, Software und Verbrauchsmaterial / Equipment up to EUR 10,000, Software and Consumables			26.000
Publikationen / Publications			2.000

Reisen / Travel			14.400
-----------------	--	--	--------

**Zusammenfassung** Die Wechselwirkung von Flüssigkeitstropfen mit flexiblen und vorstrukturierten Polymerfilm-Oberflächen ermöglicht die Erzeugung von 3D-Strukturen mittels eines Selbstfaltungsprozesses. Die adaptive Variation der Oberflächeneigenschaften ermöglicht die Einstellung des Kontaktwinkels eines Flüssigkeitstropfens auf der modifizierten Oberfläche bzw. der Oberflächenspannung. Neben der Veränderung der Oberflächeneigenschaften erlaubt die Modifikation der Volumeneigenschaften der verwendeten Polymerfilme die Erzeugung anisotroper mechanischer Eigenschaften. Ziel des Projektes ist die Herstellung von selbstfaltenden 3D Strukturen und die Ermittlung der erreichbaren Geometrien mittels Selbstfaltung unter Verwendung von anisotropen adaptiven Oberflächen und Volumeneigenschaften der verwendeten Polymerfilme. Das Projekt ist in zwei Phasen unterteilt. Die erste Phase konzentriert sich auf die Untersuchung der Flüssig-Festkörperoberflächen-Wechselwirkung (L-S-I) und die zweite Phase auf die Erzeugung von 3D-Strukturen mittels Selbstfaltung. In der Phase I wird der Einfluss von additiven und subtraktiven Mikro- und Nanostrukturen sowie chemische Modifikationen auf die L-S-I untersucht. Die L-S-I wird simuliert, wobei die Implementierung des Simulationsmodells von Dr. Lecrivain (Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf) im Rahmen des SPP 2171 unterstützt wird. Ausgehend von dem Vergleich der theoretischen Vorhersagen mit den experimentellen Ergebnissen u.a. Kontaktwinkelmessung und Messung der L-S-I induzierten Kräfte wird die physikalische Beschreibung ggf. angepasst um eine bessere Vorhersage zu erreichen. Die optimierte Simulation wird zur Verbesserung der Oberflächen- und Volumeneigenschaften verwendet. Basierend auf den Ergebnissen von PHASE I, konzentriert sich PHASE II auf die Herstellung selbstfaltender 3D-Strukturen mit geeigneten und optimierten Substrat- und Oberflächenmodifikationen. Um den Faltprozess zu verstehen, wird der Prozess zeitaufgelöst mit einem neu konzipierten Messaufbau untersucht. Unter Verwendung der optimierten physikalischen Beschreibung des L-S-I in PHASE I wird eine Simulation des Faltungsprozesses durchgeführt und die Simulationsergebnisse werden verwendet, um die Polymerfilmmodifikationen zu optimieren. Die gezielte Anpassung des L-S-I mittels Oberflächen- und Substratmodifikationen ermöglicht die Erzeugung verschiedenster 3D-Selbstfaltungsstrukturen.

**Summary** The interaction of liquid droplets with surfaces of flexible and pre-structured polymer films allows the generation of 3D structures by a self-folding process. The adaptive variation of the surface properties allows the adjustment of the contact angle of a liquid droplet on the modified surface and in consequence the adjustment of the surface tension induced by the liquid – solid surface interaction (L-S-I). Beside the modification of the surface tension the adjustment of the volume properties of the polymer films used allows the generation of anisotropic mechanical properties. The aim of the project is the evaluation of theoretically and experimentally achievable 3D structures by self-folding processes using adaptive surface and volume properties. Therefore, the project is divided into two phases. The first phase focuses on the investigation of the L-S-I, and the second phase on the generation of 3D self-folding structures. In PHASE I, the influence of additive and subtractive micro- and nanostructures, as well as chemical modification on the L-S-I are investigated. The L-S-I will be simulated whereby the implementation of the simulation model will be supported by Dr. Lecrivain (Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf) in the scope of the SPP 2171. The experimental and theoretical results will be combined and a physical description will be adapted. The optimized simulation will be used for the improvement of the

surface and volume properties.

Based on the results of PHASE I, PHASE II focus on the fabrication of self-folding 3D structures., Suitable substrate and surface modifications will be selected adapted and optimized based on the results from PHASE I. In order to understand the folding process, the process will be time-resolved studied using a new designed measurement setup.

Using the optimized physical description of the L-S-I in PHASE I, a simulation of the convolution process will be performed and the simulation results is used to optimize the polymer film modification. The targeted adjustment of the L-S-I by means of surface and substrate modifications allows the generation of various 3D self-folding structures.

**Bemerkung der  
Geschäftsstelle /  
Comment by the DFG  
Head Office**

Es liegt ein befristeter Arbeitsvertrag vor, der am 31.12.2018 ausläuft.

Eine Weiterbeschäftigung ist beabsichtigt.

The applicant's fixed-term contract will expire on 31.12.2018.

A continued employment is intended.

**Antragstyp** Schwerpunktprogramm - Einzelantrag - Neuantrag

**Type of Proposal** Priority Programme - Individual Proposal - New Proposal

**Antragsdauer / Requested Duration** 36 Monate / 36 months

**Fach** Mathematik

**Subject Area** Mathematics

**Rahmenprojekt / Framework Project** SPP 2171

**Titel** **Steuerbare Substrate: Von mikroskopischen zu makroskopischen Modellen**

**Title** **Switchable substrates: From micro to macro models**

**Geschäftszeichen / Reference No.** **ME 5355/1-1**

DFG-Erstantrag / First-Time Applicant

**Antragsteller / Applicant** **Dr. Stefan Metzger**  
Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg  
Department Mathematik  
Lehrstuhl für Angewandte Mathematik I  
Erlangen

**Kooperations-partnerinnen und Kooperations-partner / Cooperation Partners** Professor Dr. Günther Grün  
Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg  
Department Mathematik  
Lehrstuhl für Angewandte Mathematik I  
Erlangen

**Beantragte Mittel / Budget Request:**

	Beantragt / Requested		
<b>Dauer [Monate] / Duration [Months]</b>	<b>36</b>		
<b>ME 5355/1-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>186.969</b>		
<b>Dr. Stefan Metzger</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>164.369</b>
Doktorandin/Doktorand und Vergleichbare 75 % / Doctoral Researcher or Comparable 75 %	1	36	145.100
Personal (pauschal) / Other Staff			19.269
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>22.600</b>

Gäste / Visiting Researchers			3.000
Reisen / Travel			19.600

### **Zusammenfassung**

Durch das Aufbringen von Beschichtungen lassen sich die Benetzungseigenschaften von Oberflächen verändern. Da sich die Mikrostruktur in den Beschichtungen durch externe Felder beeinflussen lassen können, lassen sich schaltbare Oberflächen realisieren. Ziel dieses Projekts im Rahmen des Schwerpunktprogramms 2171 ist die Modellierung solcher Beschichtungen und ihrer Wechselwirkungen mit benetzenden Filmen. In einem ersten Schritt sollen die Beschichtungen mikroskopisch als nematische Fluide modelliert werden. Dies erzeugt verschiedene räumliche und zeitliche Skalen in den Modellgleichungen. Durch Trennung der verschiedenen Skalen sollen anschließend die Modelle vereinfacht werden. Zielsetzung ist die Herleitung neuer, effektiver Modelle, die die wichtigsten Wechselwirkungen zwischen den Beschichtungen, den externen Felder und dem benetzenden Fluiden erfassen ohne die Mikrostruktur komplett auflösen zu müssen.

Neben der analytischen Behandlung der Modelle ist eine numerische Validierung geplant. Dazu sollen die effektiven Modelle sowohl mit den im ersten Schritt erarbeiteten mikroskopischen Modellen, als auch mit den experimentellen Resultaten unserer Kooperationspartner verglichen werden.

### **Summary**

The wetting properties of substrates can be changed by coating layers. As the microstructure of such coating layers may be influenced by external fields, switchable substrates become technically feasible. It is the scope of this project to model such kind of layers together with their interactions with wetting fluid films. In the first part of the project, we plan to describe these layers as nematic liquid crystals. This gives rise to different spatial and temporal scales in the modeling equations. By an appropriate separation of scales, a simplification of the models is envisaged. The scope is to derive novel, effective models which capture the dominant interactions between the coating layers, the external fields and the wetting fluids without requiring a complete resolution of microstructures.

Besides analytical studies of the newly derived models, we focus on their numerical validation. For this purpose, the effective models shall be compared both with the complete microscopic models and with the experimental results of our cooperation partners.

### **Bemerkung der Geschäftsstelle / Comment by the DFG Head Office**

Es liegt ein befristeter Arbeitsvertrag vor, der am 20.08.2020 ausläuft.  
Eine Weiterbeschäftigung ist beabsichtigt.  
The applicant's fixed-term contract will expire on 20.08.2020 .  
A continued employment is intended.

**Antragstyp** Schwerpunktprogramm - Einzelantrag - Neuantrag

**Type of Proposal** Priority Programme - Individual Proposal - New Proposal

**Antragsdauer / Requested Duration** 36 Monate / 36 months

**Fach** Physikalische Chemie von Molekülen, Flüssigkeiten und Grenzflächen - Spektroskopie, Kinetik

**Subject Area** Physical Chemistry of Molecules, Interfaces and Liquids - Spectroscopy, Kinetics

**Rahmenprojekt / Framework Project** SPP 2171

**Titel** **Theoretische und experimentelle Bewertung von Magentostiktion und Elektrostiktion durch steuerbare Fest-Flüssig-Grenzflächen.**

**Title** **Theoretical and experimental evaluation of magentostiction and electrostiction through controllable solid-liquid interfaces.**

**Geschäftszeichen / Reference No.** **MO 2196/6-1**

**Antragsteller / Applicant** **Professor Dr. Gareth Monkman, Ph.D.**  
Ostbayerische Technische Hochschule Regensburg  
Fakultät Elektro- und Informationstechnik  
Labor Mechatronik und Robotik  
Regensburg

**Mitverantwortlicher / Co-Applicant** Professor Dr.-Ing. Valter Böhm  
Ostbayerische Technische Hochschule Regensburg  
Fakultät Maschinenbau  
Regensburg

**Beantragte Mittel / Budget Request:**

	Beantragt / Requested		
<b>Dauer [Monate] / Duration [Months]</b>	<b>36</b>		
<b>MO 2196/6-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>193.317</b>		
<b>Professor Dr. Gareth Monkman, Ph.D.</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>166.160</b>
Doktorandin/Doktorand und Vergleichbare 75 % / Doctoral Researcher or Comparable 75 %	1	36	145.100
Hilfskräfte / Support Staff			21.060
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>27.157</b>

Geräte bis 10.000 Euro, Software und Verbrauchsmaterial / Equipment up to EUR 10,000, Software and Consumables			17.757
Publikationen / Publications			1.400
Reisen / Travel			8.000

**Bewilligungen der letzten vier Jahre zu anderen Projekten (seit 12.10.2014 ) /  
DFG Project Funding Over the Last Four Years (since 12.10.2014):**

Datum / Date Gz / Ref		Euro
	<b>Professor Dr. Gareth Monkman, Ph.D.</b>	<b>212.602</b>
20.12.2017 MO 2196/2-2	Schwerpunktprogramm: Einzelantrag / Priority Programmes: Individual Proposal Dielektrisches Verhalten von magnetischen Hybridmaterialien. / Dielectric behaviour of magnetic hybrid materials.	113.000
19.10.2015 MO 2196/2-1	Schwerpunktprogramm: Einzelantrag / Priority Programmes: Individual Proposal Steuerung magnetoaktiver Elastomere durch self-sensing (MECS) / Magenetoactive Elastomer Control through self-sensing (MECS)	99.602

**Zusammenfassung**

Stiction represents the forces due to static friction which manifests itself as a cohesion force threshold which must be overcome to enable relative motion between otherwise stationary objects in contact. Following the onset of movement, resistance to motion is provided exclusively by dynamic friction. Stiction is related to inter molecular viscoelastic effects and both are influenced by surface roughness. Magnetostiction and electrostiction pertain to the control of friction through a magnetic or electric field respectively.

Both magnetically and electrically switchable surfaces are to be theoretically and experimentally investigated. Examples include fluid-polymer surface imbibition due to surface capillary, electrolytic and visco-elastic effects. The enhancement of surface adhesion through magnetoadhesive and electroadhesive effects are to be considered as the basis of controllable tribology through wetting and dewetting of surfaces.

**Summary**

Stiction stellt die Kräfte aufgrund der Haftreibung dar, die sich als Kohäsionskraftschwelle manifestiert, die überwunden werden muss, um eine Relativbewegung zwischen ansonsten stationären Objekten in Kontakt zu ermöglichen. Nach Beginn der Bewegung wird der Bewegungswiderstand ausschließlich durch Gleitreibung erreicht. Die Haftung steht im Zusammenhang mit intermolekularen viskoelastischen Effekten und wird durch die Oberflächenrauigkeit beeinflusst. Magnetostiktion und Elektrostiktion beziehen sich auf die Kontrolle der Reibung durch ein magnetisches bzw. elektrisches Feld.

Sowohl magnetisch als auch elektrisch schaltbare Oberflächen sollen theoretisch und experimentell untersucht werden. Beispiele sind die Aufnahme von Fluid-Polymer-Oberflächen durch Oberflächenkapillare, elektrolytische und viskoelastische Effekte. Die Verbesserung der Oberflächenadhesion durch magnetadhäsive und elektroadhäsive Effekte ist als Grundlage der kontrollierbaren Tribologie durch Benetzung und Entnetzung von Oberflächen zu betrachten.



**Antragstyp** Schwerpunktprogramm - Einzelantrag - Neuantrag

**Type of Proposal** Priority Programme - Individual Proposal - New Proposal

**Antragsdauer / Requested Duration** 36 Monate / 36 months

**Fach** Experimentelle und Theoretische Polymerphysik

**Subject Area** Experimental and Theoretical Physics of Polymers

**Rahmenprojekt / Framework Project** SPP 2171

**Titel** **Benetzung von bio-inspirierten, stimulus-reagierenden Polymeroberflächen durch Lipidvesikel**

**Title** **Wetting of bio-inspired, stimulus-responsive polymer surfaces by lipid vesicles**

**Geschäftszeichen / Reference No.** **MU 1674/17-1**

**Antragsteller / Applicant** **Professor Dr. Marcus Müller**  
Georg-August-Universität Göttingen  
Institut für Theoretische Physik  
Göttingen

**Geschäftszeichen / Reference No.** **TA 259/14-1**

**Antragsteller / Applicant** **Professor Dr. Motomu Tanaka**  
Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg  
Physikalisch-Chemisches Institut  
Heidelberg

**Beantragte Mittel / Budget Request:**

	Beantragt / Requested		
<b>Dauer [Monate] / Duration [Months]</b>	<b>36</b>		
<b>MU 1674/17-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>163.350</b>		
<b>Professor Dr. Marcus Müller</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>145.100</b>
Doktorandin/Doktorand und Vergleichbare 75 % / Doctoral Researcher or Comparable 75 %	1	36	145.100
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>18.250</b>

Gäste / Visiting Researchers			3.750
Publikationen / Publications			1.000
Reisen / Travel			13.500
<b>TA 259/14-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>218.291</b>		
<b>Professor Dr. Motomu Tanaka</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>145.100</b>
Doktorandin/Doktorand und Vergleichbare 75 % / Doctoral Researcher or Comparable 75 %	1	36	145.100
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>73.191</b>
Gäste / Visiting Researchers			3.750
Geräte bis 10.000 Euro, Software und Verbrauchsmaterial / Equipment up to EUR 10,000, Software and Consumables			54.941
Publikationen / Publications			1.000
Reisen / Travel			13.500
<b>Gesamtsumme / Total</b>	<b>381.641</b>		

**Bewilligungen der letzten vier Jahre zu anderen Projekten (seit 15.10.2014 ) /  
DFG Project Funding Over the Last Four Years (since 15.10.2014):**

<b>Datum / Date Gz / Ref</b>		<b>Euro</b>
	<b>Professor Dr. Marcus Müller</b>	<b>3.102.100</b>
30.05.2017 INST 186/1062-2	Sonderforschungsbereich: Einzelantrag / Collaborative Research Centres: Individual Proposal Thermischer Transport in Polymernanostrukturen / Thermal transport in polymeric nanostructures	480.700
23.11.2016 INST 186/801-3	Sonderforschungsbereich: Einzelantrag / Collaborative Research Centres: Individual Proposal Die Rolle von Proteinen bei der Fusion und Fission: Computersimulation von vergrößerten Modellen / The role of proteins on fusion and fission: computer simulation of coarse-grained models	344.300
24.11.2014 INST 186/885-2	Sonderforschungsbereich: Einzelantrag / Collaborative Research Centres: Individual Proposal Dynamik und Nicht-Gleichgewichtszustände von zufällig vernetzten Block-Copolymeren / Dynamics and non-equilibrium states of randomly cross-linked block copolymer melts	847.900
24.11.2014 INST 186/888-2	Sonderforschungsbereich: Einzelantrag / Collaborative Research Centres: Individual Proposal Membranstruktur unter starker Krümmung / Membrane organization under strong curvature	858.400
24.11.2014 INST 186/886-2	Sonderforschungsbereich: Einzelantrag / Collaborative Research Centres: Individual Proposal Polymerbürsten in Bewegung / Polymer brushes in motion	570.800
	<b>Professor Dr. Motomu Tanaka</b>	<b>1.155.500</b>
23.05.2018	Sonderforschungsbereich: Einzelantrag / Collaborative Research Centres: Individual Proposal	586.400

Datum / Date Gz / Ref		Euro
INST 35/1166-2	Schutz vor Malaria durch Hämoglobin S und C: Eine quantitative Untersuchung der Cyto-Adhesion / Protection of malaria by haemoglobin S and C: A quantitative understanding of the cytoadhesion behavior	
23.05.2018 INST 35/962-3	Sonderforschungsbereich: Einzelantrag / Collaborative Research Centres: Individual Proposal Quantifizierung von dynamischen Funktionen der Knochenmarknische in der Interaktion mit hä-matopoetischen und leukämischen Stammzellen / Mechanism of dynamic homing and migration of human hematopoietic stem cells in the bone marrow niche using quantitative tools	380.500
07.11.2014 TA 259/12-1	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal Hierarchische Strukturbildung von der molekularen Selbstorganisation 2 / Patterns of Hierarchical Molecular Self-Assemblies 2	188.600

## Zusammenfassung

Die Herstellung von schaltbaren Verbindungen zwischen weichen, biologischen Objekten und harten Substraten ist eine große Herausforderung, um Wechselwirkungen an Grenzflächen dynamisch zu regulieren. Die Antragsteller kombinieren ihre komplementäre Expertise in experimenteller (Tanaka) und theoretischer (Müller) Physik der weichen Materie, um die Benetzung von schaltbaren Polymersubstraten durch Lipidvesikel zu untersuchen. In Analogie zur Benetzung durch Flüssigkeitstropfen wird die Form eines Vesikels durch das eingeschlossene Volumen, die Membrane-Substrat-Wechselwirkung (Grenzflächenpotential) und die Eigenschaften der Grenzfläche (Membran) zwischen dem Inneren und Äußeren des Vesikels bestimmt. Neben der Membranspannung ist jedoch auch deren Biegesteifigkeit von Bedeutung.

Die Tanaka-Gruppe wird schaltbare Polymerbürsten, welche durch natürlich vorkommende Pflanzenproteine inspiriert sind, herstellen und charakterisieren. Das Schalten der Polymerkonfigurationen hat eine Änderung der Benetzungseigenschaften zur Folge. Durch Kombination verschiedener experimenteller Methoden wird die Tanaka-Gruppe die Dynamik der globalen Vesikelform - spezifiziert durch den Kontaktwinkel und die Größe der Kontaktzone mit dem Substrat -, die Abstandsfluktuationen zwischen Lipidmembran und Substrat, welche Informationen über das Grenzflächenpotential liefern, sowie die hydrodynamische Strömung im Inneren des Vesikels untersuchen. Diese Untersuchung wird auf das dynamische Benetzen von heterogenen Substraten aus schaltbaren und inerten Bürsten und auf das zeitlich periodische Schalten der Benetzungseigenschaften erweitert.

Die Müller-Gruppe wird diese Experimente durch Simulationen der dynamischen Benetzung von Lipidvesikel auf schaltbaren und deformierbaren Polymersubstraten komplementieren. Um die experimentellen Skalen zu erreichen, wird die schaltbare Bürste im Rahmen eines hoch-vergrößerten Teilchenmodells modelliert während das Vesikel als eine triangulierte Fläche im Rahmen des Helfrich-Hamiltonians dargestellt wird. Aus der Gleichgewichtsform des Vesikels werden das Grenzflächenpotential und der effektive Kontaktwinkel bestimmt, die für eine Beschreibung im Rahmen von Kontinuumsmodellen notwendig sind, außerdem werden durch den Vergleich mit den experimentellen Daten die Modellwechselwirkungen angepasst. Danach wird die Formänderung nach dem Schalten und der zeitlich periodischen Modulation der Benetzungseigenschaften studiert, welche sich durch eine starke Kopplung zwischen der reversiblen Änderung der Benetzbarkeit des Polymersubstrats, der Dynamik der Lipidmembran und der Hydrodynamik des Lösungsmittels ergibt. Mittels einer systematischen Untersuchung der Größenabhängigkeit

der Dissipationsmechanismen werden die Simulationsergebnisse von (kleinen) Vesikeln mit den experimentellen Daten verglichen.

## Summary

The fabrication of switchable interlayers between soft, biological objects and hard solids is one of the major challenges to dynamically regulate the interfacial interactions. In the proposed project, the applicants with strong expertise in theoretical (Müller) and experimental (Tanaka) soft-matter physics will investigate the wetting of bio-inspired, stimulus-responsive polymer substrates by lipid vesicles. In analogy to the wetting by liquid drops, the shape of a vesicle is dictated by the enclosed volume, the membrane-substrate interaction (interface potential), and the properties of the interface (membrane) between the interior and exterior. Unique to wetting by flexible vesicles is the importance of the membrane's bending rigidity in addition to its tension.

The Tanaka group will fabricate and characterize stimulus-responsive substrates based on polymer brushes inspired by naturally occurring proteins in plants. The abrupt change in polymer conformation is followed by dynamic changes in the wetting behavior of lipid vesicles. By the combination of various experimental techniques, the Tanaka group will experimentally monitor the dynamic changes in the global shape of the vesicles (apparent contact angle), vesicle footprint (contact zone), membrane height fluctuations (interfacial potential), and hydrodynamics inside the vesicles. This line of study will be extended to the dynamic wetting on heterogeneous substrates displaying stimulus-responsive and stimulus-inert brushes and the time-periodic switching of the substrate.

The Müller group will complement these experiments by simulations of the dynamic wetting of switchable, deformable polymer substrates by lipid vesicles. To reach the spatio-temporal scales of the experiments, the switchable polymer brush is modelled by a highly coarse-grained particle model whereas the vesicle membrane will be represented by a triangulated sheet within the framework of the Helfrich Hamiltonian. Studying the equilibrium shape of the vesicle, we will determine the interface potential and apparent contact angle, which is required as input into continuum models and will serve to adjust the model parameters to the experiment. Then, we will study the shape change after switching and time-periodic modulation of the wetting properties, which results from a strong coupling between the reversible changes of the substrate wettability, the dynamics of the lipid membrane, and the hydrodynamics of the solvent. Systematically studying the size-dependence of the different dissipation mechanisms we will compare the simulation results of (small) vesicles with the experimental data.

**Antragstyp** Schwerpunktprogramm - Einzelantrag - Neuantrag

**Type of Proposal** Priority Programme - Individual Proposal - New Proposal

**Antragsdauer / Requested Duration** 36 Monate / 36 months

**Fach** Strukturierung und Funktionalisierung

**Subject Area** Structuring and Functionalisation

**Rahmenprojekt / Framework Project** SPP 2171

**Titel** **Dynamische Benetzung laserinduzierter periodischer Oberflächenstrukturen**

**Title** **Dynamic wetting of laser-induced periodic surface structures**

**Geschäftszeichen / Reference No.** **MU 1803/21-1**

**Antragsteller / Applicant** **Professor Dr.-Ing. Frank. A. Müller**  
Friedrich-Schiller-Universität Jena  
Otto-Schott-Institut für Materialforschung (OSIM)  
Lehrstuhl für Oberflächen- und Grenzflächentechnologien  
Jena

**Beantragte Mittel / Budget Request:**

	Beantragt / Requested		
<b>Dauer [Monate] / Duration [Months]</b>	<b>36</b>		
<b>MU 1803/21-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>194.550</b>		
<b>Professor Dr.-Ing. Frank. A. Müller</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>145.100</b>
Doktorandin/Doktorand und Vergleichbare 75 % / Doctoral Researcher or Comparable 75 %	1	36	145.100
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>49.450</b>
Geräte bis 10.000 Euro, Software und Verbrauchsmaterial / Equipment up to EUR 10,000, Software and Consumables			35.500
Publikationen / Publications			2.250
Reisen / Travel			9.200
Sonstiges / Other			2.500

**Zusammenfassung** Unser Forschungsvorhaben konzentriert sich auf die dynamische Benetzung

von flexiblen Polymersubstraten. Zu diesem Zweck werden wir spezifische Mikro- und Nanostrukturen auf der Oberfläche von dehnbaren Polymeren realisieren. Das Benetzungsverhalten wird durch die Oberflächenfunktionalisierung und verschiedene externe Auslöser gesteuert. Die Mikro- und Nanostrukturen werden auf einem metallischen Mastersubstrat in Form von sogenannten laserinduzierten periodischen Oberflächenstrukturen (LIPSS) mit Hilfe eines fs-Lasers hergestellt. Anschließend wird das LIPSS-Modell in einem Replika-Gießverfahren auf flexible und dehnbare Polymerproben übertragen. In einem ersten Ansatz werden hydrophile und hydrophobe Oberflächengruppen durch ein sequentielles Verfahren mittels Hydroxylierung und selektiver Silanisierung an die strukturierte Oberfläche gekoppelt. Im Kontakt mit Wasser zeigen die so vorbereiteten Proben superhydrophobes Verhalten aufgrund von rauigkeitsinduzierten Lufteinschlüssen. Das Strecken der Probe reduziert den Kontaktwinkel, da die Rauheit reduziert wird und eine zunehmende Anzahl hydrophiler Funktionsgruppen mit dem Wassertropfen in Kontakt kommt. Bei anhaltender Dehnung wird die Oberfläche durch die zunehmende spezifische Menge an polaren Gruppen hydrophil. Auf diese Weise kann die Benetzbarkeit des Polymers durch mechanische Verformung über einen weiten Bereich reversibel eingestellt werden. Unser zweiter Ansatz basiert auf der Elektrobenetzung von polarisierten ferroelektrischen Polymeren. Hier kann der Kontaktwinkel durch eine externe Spannung zwischen dem Wassertropfen und dem Substrat gesteuert werden. Basierend auf dem Pyro- bzw. Piezoeffekt des ausgewählten Polymers kann der Kontaktwinkel durch Temperatur oder mechanische Belastung als externer Auslöser eingestellt werden. Der Startpunkt des Kontaktwinkels und damit der maximale Arbeitsbereich wird durch das LIPSS-Modell festgelegt, das durch den Replika-Gießprozess auf die Polymere übertragen wird.

## Summary

Our research proposal focuses on the dynamic wetting of flexible polymer substrates. For this purpose we will realize specific micro- and nanostructures on the surface of stretchable polymers. The wetting behavior is controlled by surface functionalization and various external triggers. The micro- and nanostructures are produced on a metallic master substrate in the form of so-called laser-induced periodic surface structures (LIPSS) using an fs-laser. The LIPSS model is then transferred to flexible and stretchable polymer samples in a replica casting process.

In a first approach, hydrophilic and hydrophobic surface groups are coupled to the structured surface by a sequential process of hydroxylation and selective silanization. In contact with water the prepared samples show superhydrophobic behaviour due to roughness induced air inclusions. Stretching the specimen reduces the contact angle as roughness is reduced and an increasing number of hydrophilic functional groups come into contact with the water drop. With prolonged elongation, the surface becomes hydrophilic due to the increasing specific amount of polar groups. In this way, the wettability of the polymer can be reversibly adjusted over a wide range by mechanical deformation.

Our second approach is based on the electro-wetting of polarized ferroelectric polymers. Here the contact angle can be controlled by an external voltage between the water drop and the substrate. Based on the pyro or piezoelectric effect of the selected polymer, the contact angle can be adjusted by temperature or mechanical stress as an external trigger. The starting point of the contact angle and thus the maximum working range is determined by the LIPSS model, which is transferred to the polymer by the replica casting process.

**Antragstyp** Schwerpunktprogramm - Einzelantrag - Neuantrag

**Type of Proposal** Priority Programme - Individual Proposal - New Proposal

**Antragsdauer / Requested Duration** 36 Monate / 36 months

**Fach** Strömungsmechanik

**Subject Area** Fluid Mechanics

**Rahmenprojekt / Framework Project** SPP 2171

**Titel** **Optimierung von Mikrosäulent Teppichen für reversible Benetzung mithilfe gitterfreier Simulationen**

**Title** **Optimization of micropillar carpets for reversible wetting using meshless simulations**

**Geschäftszeichen / Reference No.** **NA 1436/3-1**

**Antragsteller / Applicant** **Dr. Prapanch Nair**  
Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg  
Department Chemie- und Bioingenieurwesen  
Lehrstuhl für Multiskalensimulation  
Erlangen

**Arbeitgeberzusage Statement by Employer** Die Erklärung zur Arbeitgeberfunktion liegt noch nicht vor.  
A statement regarding employer status has not yet been received.

**Beantragte Mittel / Budget Request:**

	Beantragt / Requested		
<b>Dauer [Monate] / Duration [Months]</b>	<b>36</b>		
<b>NA 1436/3-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>303.800</b>		
<b>Dr. Prapanch Nair</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>291.200</b>
Eigene Stelle 100 % / Temporary Position for Principal Investigator 100 %	1	36	209.700
Sonst. wiss. Mitarbeiterin/Sonst. wiss. Mitarbeiter 50 % / Other Research Assistant 50 %	1	36	81.500
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>12.600</b>
Geräte bis 10.000 Euro, Software und Verbrauchsmaterial / Equipment up to EUR 10,000, Software and Consumables			3.000

Publikationen / Publications			3.000
Reisen / Travel			6.600

## Zusammenfassung

Die Gestaltung und Entwicklung von Mikrostrukturen mit hohem Aspektverhältnis (HAR) für hydrophobe Substrate wird bislang durch Heuristiken vorangetrieben und durch die vorliegende Lithographietechnik limitiert. Theoretisches Verständnis für das dynamische Benetzungsverhalten von HAR-Mikrostrukturen fehlt jedoch. Ein entscheidender Grund dafür ist die begrenzte optische Auflösung bei der experimentellen Beobachtungen von dynamischen Vorgängen. Daher ist der Einfluss von Biegesteifigkeit und Morphologie der HAR-Mikrostrukturen auf die Hydrophobizität sowie auf die Reversibilität des Benetzungsvorgangs nicht systematisch verstanden.

Ziel des Projekts ist die Optimierung von HAR-Mikrostruktursubstraten (auch bekannt als Mikrosäulen) unter Verwendung von dreidimensionalen gitterfreien Partikelsimulationen. Optimierungsziel ist eine erhöhte Hydrophobizität sowie die Verringerung der Hysterese. Als Designvariablen werden Dichte, Aspektverhältnis und Biegesteifigkeit der Säulen herangezogen. Die Interaktion zwischen der inkompressiblen Flüssigkeit (mit einer freien Oberfläche) und dem komplex geformten, festen Substrat wird durch eine gitterfreie Diskretisierung des Kontinuums simuliert. Die Kapillarkräfte werden simuliert, indem das Kontinuum mit paarweise interpartikulären Kräften überlagert wird. Mit diesen Simulationen können quantitative Beziehungen zwischen den mechanischen Eigenschaften der Mikrostruktur und den dynamischen Kontaktwinkeln hergestellt werden. Darüber hinaus beabsichtigen wir optimale HAR-Mikrostrukturdesigns für verschiedene Benetzungsregime vorzuschlagen. Als Teil eines Schwerpunktprogramms hat dieses Projekt den Vorteil, dass die Simulationen gegen experimentell hergestellte Oberflächen getestet und validiert werden können. Darüber hinaus unterstützt die Kollaboration mit Experimentatoren bei der Berücksichtigung von Fertigungseinschränkungen, so dass die, in der Simulation untersuchten Systeme, so realistisch wie möglich gehalten werden können.

Das Projekt beinhaltet drei Bearbeitungsschwerpunkte. Der erste Schwerpunkt umfasst eine Reihe von Validierungsfällen, bei denen zwei- und dreidimensionale Tropfen auf starren HAR-Mikrostrukturen mit Theorie und Experiment verglichen werden. In diese Studien wird auch die Auswirkung von Viskosität und Trägheit auf den scheinbaren Kontaktwinkel differenziert betrachtet. Im zweiten Schwerpunkt wird die Biegesteifigkeit als Parameter zur Identifizierung unterschiedlicher Benetzungsregime eingeführt. Der dritte Schwerpunkt wird zudem die Aggregation der Mikrosäulen während der Tropfenbewegung sowie die Tropfenverdampfung untersuchen.

## Summary

The design and development of high aspect ratio (HAR) microstructures for hydrophobic substrates are driven by heuristics and limited to the lithography technique at hand. Theoretical understanding of the dynamic wetting of HAR microstructures is lacking, primarily due to limitations in the resolution of experimental observations in dynamic scenarios. Therefore the role of flexural stiffness and morphology of the HAR microstructures on hydrophobicity and wetting reversibility is not fully understood.

The project aims at optimizing HAR microstructure (also known as micropillar) substrates, using three dimensional particle based meshless simulations. The goals of the optimization are increased hydrophobicity and reduced hysteresis with the pillar density, aspect ratio of pillars and flexural strength of the substrate material as the parameters. Incompressible single



component fluid (with a free surface) interacting with deformable, complex shaped solid substrates will be simulated by meshless discretization of the continuum description. The capillary forces will be simulated by superimposing pairwise inter-particle forces on the continuum domain. The simulations will provide quantitative relationships between microstructure mechanical properties and the dynamic contact angles. Further, we aim to propose optimal HAR microstructure designs for different wetting regimes. As part of a priority program this project has the advantage of testing and validating the simulations against fabricated experimental surfaces. Also, the collaborations with experimental research groups would serve as a guide to keep the simulations as realistic as possible.

The project aims at three groups of deliverables. The first is a set of validations of two and three dimensional drops on rigid HAR microstructures against theory and experiments. This group of studies would also differentiate between the effect of viscosity and inertia on the apparent contact angle. The second group of deliverables will introduce flexural stiffness as a parameter to identify different wetting regimes. The third group of deliverables will investigate micropillar aggregation during drop motion as well as drop evaporation.

<b>Antragstyp</b>	Schwerpunktprogramm - Einzelantrag - Neuantrag
<b>Type of Proposal</b>	Priority Programme - Individual Proposal - New Proposal
<b>Antragsdauer / Requested Duration</b>	36 Monate / 36 months
<b>Fach</b>	Strömungsmechanik
<b>Subject Area</b>	Fluid Mechanics
<b>Rahmenprojekt / Framework Project</b>	SPP 2171
<b>Titel</b>	<b>Dynamik und Interaktion der Drei-Phasen-Kontaktlinie mit elektrokinetischen und elektrochemischen Prozessen auf schaltbaren Oberflächen</b>
<b>Title</b>	<b>Dynamics of the coupled interaction of the three-phase contact line with electrokinetic and electrochemical processes on switchable surfaces</b>
<b>Geschäftszeichen / Reference No.</b>	<b>OE 220/21-1</b>
<b>Antragsteller / Applicant</b>	<b>Professor Dr. Egbert Oesterschulze</b> Technische Universität Kaiserslautern Fachbereich Physik Arbeitsgruppe Physik und Technologie der Nanostrukturen Kaiserslautern
<b>Geschäftszeichen / Reference No.</b>	<b>SCHO 1782/1-1</b>  DFG-Erstantrag / First-Time Applicant
<b>Antragstellerin / Applicant</b>	<b>Dr.-Ing. Clarissa Schönecker</b> Technische Universität Kaiserslautern Fachbereich Maschinenbau und Verfahrenstechnik Lehrstuhl für Mikrofluidmechanik Kaiserslautern
<b>Kooperations- partnerinnen und Kooperations- partner / Cooperation Partners</b>	Professor Dr.-Ing. Sergiy Antonyuk Technische Universität Kaiserslautern Fachbereich Maschinenbau und Verfahrenstechnik Lehrstuhl für Mechanische Verfahrenstechnik Kaiserslautern  Professor Dr. Hans-Jürgen Butt Max-Planck-Institut für Polymerforschung Mainz  Professor Dr.-Ing. Hans Hasse

Technische Universität Kaiserslautern  
 Fachbereich Maschinenbau und Verfahrenstechnik  
 Lehrstuhl für Thermodynamik  
 Kaiserslautern

Professor Dr. Christian Holm  
 Universität Stuttgart  
 Fachbereich Physik  
 Institut für Computerphysik (ICP)  
 Stuttgart

Professor Dr. Patrick Huber  
 Technische Universität Hamburg  
 Studiendekanat Maschinenbau  
 Institut für Werkstoffphysik und Werkstofftechnologie  
 Hamburg

Dr. Kaloian Koynov  
 Max-Planck-Institut für Polymerforschung  
 Mainz

Dr.-Ing. Kai Langenbach  
 Technische Universität Kaiserslautern  
 Fachbereich Maschinenbau und Verfahrenstechnik  
 Lehrstuhl für Thermodynamik  
 Kaiserslautern

Professor Dr.-Ing. Ralf Müller  
 Technische Universität Kaiserslautern  
 Fachbereich Maschinenbau und Verfahrenstechnik  
 Lehrstuhl für Technische Mechanik  
 Kaiserslautern

**Beantragte Mittel / Budget Request:**

	<b>Beantragt / Requested</b>		
<b>Dauer [Monate] / Duration [Months]</b>	<b>36</b>		
<b>OE 220/21-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>204.160</b>		
<b>Professor Dr. Egbert Oesterschulze</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>160.100</b>
Doktorandin/Doktorand und Vergleichbare 75 % / Doctoral Researcher or Comparable 75 %	1	36	145.100
Hilfskräfte / Support Staff			15.000
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>44.060</b>
Geräte bis 10.000 Euro, Software und Verbrauchsmaterial / Equipment up to EUR 10,000, Software and Consumables			28.610
Publikationen / Publications			2.250
Reisen / Travel			6.000
Sonstiges / Other			7.200

<b>SCHO 1782/1-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>232.750</b>		
<b>Dr.-Ing. Clarissa Schönecker</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>208.500</b>
Doktorandin/Doktorand und Vergleichbare 100 % / Doctoral Researcher or Comparable 100 %	1	36	193.500
Hilfskräfte / Support Staff			15.000
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>24.250</b>
Geräte bis 10.000 Euro, Software und Verbrauchsmaterial / Equipment up to EUR 10,000, Software and Consumables			14.000
Publikationen / Publications			2.250
Reisen / Travel			8.000
<b>Gesamtsumme / Total</b>	<b>436.910</b>		

**Bewilligungen der letzten vier Jahre zu anderen Projekten (seit 15.10.2014 ) /  
DFG Project Funding Over the Last Four Years (since 15.10.2014):**

<b>Datum / Date Gz / Ref</b>		<b>Euro</b>
	<b>Professor Dr. Egbert Oesterschulze</b>	<b>616.792</b>
30.06.2017 OE 220/17-2	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal Chemisch selektiver Mikroresonator durch imprägnierte Hydrogele / Ultrasensitive microresonator based on molecular imprinted hydrogels	107.450
19.08.2016 OE 220/19-1	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal Temperaturbeständige elektrochrome Mikro-Iriden mit farbneutralem Spektralverhalten zur schnellen Bildadaption in Miniaturkameras für medizinische Applikationen / Temperature resistant electrochromic micro-iris with neutral color for quick image adaptation in micro-cameras for medical applications	329.942
22.10.2014 OE 220/17-1	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal Chemisch selektiver Mikroresonator durch imprägnierte Hydrogele / Ultrasensitive microresonator based on molecular imprinted hydrogels	179.400

**Zusammenfassung**

Das Ziel dieses Projektes ist das fundamentale Verständnis der Wechselwirkungen an der Drei-Phasen-Kontaktlinie von Tropfen einfacher Flüssigkeiten wie Wasser, die mittels äußerer Felder durch elektrokinetische und elektrochemische Prozesse hervorgerufen werden. Diese Art von Phänomenen verändert die Randbedingungen an der Flüssigkeits-Festkörper-Grenzfläche durch die sich einstellenden Flüssigkeitsströme oder die Erzeugung von Gasblasen. Zusätzlich können diese direkt auf die Drei-Phasen-Kontaktlinie wirken. Bei diesen Vorgängen spielen dynamische Prozesse, die mit der Erzeugung der Gasblasen, dem Fluss innerhalb des Tropfens und dem Benetzungsverhalten der sich bewegenden Kontaktlinie in Verbindung stehen, eine wesentliche Rolle. Um diese Effekte kontrollieren zu können, werden spannungsbeaufschlagte Elektroden benutzt, auf welchen der Tropfen in direktem Kontakt aufsitzt. Die elektrischen Felder zwischen den Elektroden können zu elektrokinetischen Phänomenen führen. Wir möchten die Rolle von Elektrokinetik auf die Kontaktlinienbewegung besser verstehen.

Insbesondere werden die schaltbaren Oberflächen zur elektrolytischen Gaserzeugung an der Flüssigkeits-Elektrodenrenzfläche benutzt, indem Wasser elektrolytisch zersetzt wird. Die Gasblasen werden einen signifikanten Einfluss auf Form und Mobilität der Drei-Phasen-Kontaktlinie haben, da diese ein scheinbares Gleiten ermöglichen. Durch gezielte elektrische Aktuierung kann dieser Vorgang im Idealfall sehr genau kontrolliert und verändert werden ohne dass die Topographie der Oberfläche verändert wird. Hier ist insbesondere die Interaktion der äußeren Kontaktlinie eines Tropfens mit seinen inneren Kontaktlinien von Interesse. Im Fall gleitender Tropfen muss die Gasschicht unter dem Tropfen auf den Elektroden dynamisch erzeugt werden. Die Benetzung hängt somit von mehreren Prozessen mit verschiedenen Zeitkonstanten (Zeitkonstante der Gaserzeugung, Zeitkonstante des Entnetzungs Vorgangs etc.) als auch räumlichen Skalenlängen (Schlupflänge, mittlere Tropfengröße, Dicke der Doppelschicht an der Grenzfläche) ab. Hier soll untersucht werden, wie dynamisch erzeugte Gasblasen das Benetzungsverhalten des Tropfens verändern und beeinflussen und welche Bedeutung dies für die Kontaktlinienreibung hat.

Besonders interessant ist eine elektrochemische Kontrolle des Benetzungsverhaltens, wenn sich ein Tropfen auf einer superhydrophoben Oberfläche im Cassie-Baxter Zustand befindet, da durch den Gaserzeugungs- oder -vernichtungsprozess potentiell die lokale Grenzfläche kontinuierlich verändert werden kann. Damit ist die Möglichkeit geboten, durch lokale Gaserzeugung die Gleitlänge/Dicke der Gasschicht gezielt einzustellen. Es ist zu erwarten, dass mit einer geeigneten Wahl der Elektrodenkonfiguration eine gezielte Kontrolle der Benetzung erreicht werden kann, z.B in Form von Benetzungsbarrieren, einem großflächigen Entnetzen benetzter Oberflächen oder einem vereinfachten Abrollen von Tropfen.

## Summary

The project goal is the fundamental understanding of the interaction of the dynamics of the three-phase contact line with electrokinetic and electrochemical phenomena induced by electric fields in droplets of simple liquids like water. Such phenomena change the boundary conditions at the surface-droplet interface by generating gas bubbles via electrolysis or by inducing flows. Additionally, they may directly act on the contact line. This problem involves dynamical processes related to the gas bubble generation, the flow inside the droplet, and the wetting dynamics of the moving contact line. To create these effects, we employ controllable surfaces electrode structures that are in direct contact with the droplet.

Electrokinetic phenomena arise from the electric field between the surface electrodes. Additionally, electrical charges are generated on the distinct drop interfaces that will vary dynamically upon (de)wetting of areas. We will investigate the mutual interaction of the flow fields and contact line dynamics to understand the role of electrokinetics in contact line motion.

Surface electrodes are also used to provoke electrochemical gas generation processes at the electrode interface. Gas generation is obtained from the electrolytic decomposition of water. This will significantly change the conformation as well as the mobility at the boundary since it introduces an apparent slip at the bubbles surface. This controlled actuation will ideally allow to continuously vary the slip length by electrical means without changing the surface topography. We are interested in the interaction of the outer contact line with the interior contact lines of a single drop.

In case of a moving droplet the gas layer has to be dynamically generated. Hence, the wetting behavior will depend on the interplay of physical processes with different time scales (time constant of electrolytic gas generation, time scale of (de)wetting dynamics, etc.) and different length scales (e.g. slip length, mean drop size, double layer thickness). We like to understand whether dynamically created bubbles can lift and manipulate the contact line and to what extent contact line friction is varied.

Electrochemical control is in particular promising for the wetting of superhydrophobic structured surfaces that already support the Cassie-Baxter state. Such surfaces decorated with electrodes will potentially allow a continuous control of both (de)wetting and transport of individual drops by in-/decreasing the local gas layer thickness on top of the surface microstructure and thus the slip length, respectively. With an appropriate electrode configuration, wetting control is envisioned for drops and advancing wetting fronts, e.g. switchable wetting barriers or a massive dewetting of wetted surfaces by facilitating roll-off by reduction of the water-surface contact area.

**Bemerkung der  
Geschäftsstelle /  
Comment by the DFG  
Head Office**

Es liegt ein befristeter Arbeitsvertrag vor, der am 31.05.2020 ausläuft. Eine Weiterbeschäftigung ist beabsichtigt.  
The applicant's fixed-term contract will expire on 31.05.2020. A continued employment is intended.

**Antragstyp** Schwerpunktprogramm - Einzelantrag - Neuantrag

**Type of Proposal** Priority Programme - Individual Proposal - New Proposal

**Antragsdauer / Requested Duration** 36 Monate / 36 months

**Fach** Statistische Physik, Weiche Materie, Biologische Physik, Nichtlineare Dynamik

**Subject Area** Statistical Physics, Soft Matter, Biological Physics, Nonlinear Dynamics

**Rahmenprojekt / Framework Project** SPP 2171

**Titel** **Dynamische Benetzungsphänomene in Gittermodellen für Flüssigkristalle in der Nähe von schaltbaren Oberflächen**

**Title** **Dynamic wetting phenomena in lattice models for nematic fluids/liquid crystals near switchable substrate potentials**

**Geschäftszeichen / Reference No.** OE 285/6-1

**Antragsteller / Applicant** **Professor Dr. Martin Oettel**  
Eberhard Karls Universität Tübingen  
Mathematisch-Naturwissenschaftliche Fakultät  
Institut für Angewandte Physik  
Tübingen

**Beantragte Mittel / Budget Request:**

	Beantragt / Requested		
<b>Dauer [Monate] / Duration [Months]</b>	<b>36</b>		
<b>OE 285/6-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>151.100</b>		
<b>Professor Dr. Martin Oettel</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>145.100</b>
Doktorandin/Doktorand und Vergleichbare 75 % / Doctoral Researcher or Comparable 75 %	1	36	145.100
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>6.000</b>
Reisen / Travel			6.000

**Bewilligungen der letzten vier Jahre zu anderen Projekten (seit 15.10.2014 ) / DFG Project Funding Over the Last Four Years (since 15.10.2014):**

Datum / Date Gz / Ref		Euro
	<b>Professor Dr. Martin Oettel</b>	<b>372.200</b>
17.07.2018 OE 285/5-1	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal Mikroskopische Zugänge zur nichtlinearen Mechanik defektreicher Kristalle / Microscopic approaches to the nonlinear mechanics of driven defect-rich crystals	195.700
23.03.2015 OE 285/3-1	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal Kristallines Dünnschichtwachstum in anisotropen Mischungen: ein übergreifender Zugang mittels Experiment, Theorie und Simulation / Crystalline thin film growth in anisotropic mixtures: a combined approach by experiment, theory and simulation	176.500

## Zusammenfassung

In diesem Projekt sollen Flüssigkristalle in der Nähe von schaltbaren Substraten mittels theoretischer Methoden und begleitender Simulationen untersucht werden. Von besonderem Interesse sind dabei das Verhalten bei Annäherung an einen Benetzungsübergang und bei Wechsel zwischen verschiedenen Benetzungszuständen.

Als Modellsystem betrachten wir Stäbchen auf einem Gitter mit kurzreichweitigen Attraktionen.

Wir haben klassische Dichtefunktionale für diese Modelle formuliert und werden diese verbessern sowie eine geeignete dynamische Dichtefunktionaltheorie ableiten.

Benetzungsphasendiagramme für nematisch geordnete Filme (senkrecht oder parallel) und smektische Filme (mit möglichen Schichtungsübergängen) sollen berechnet werden. Von besonderem Interesse ist dann die Dynamik einer smektischen Schichtbildung und die Schaltdynamik zwischen nematischen Benetzungszuständen verschiedener Orientierung. Bei diesen Prozessen ist nur ein geringer Massentransport involviert und deswegen erwarten wir, dass eine mit der Brownschen

Dynamik verwandten Gitterdynamik die Prozesse gut beschreibt.

Komplementäre Simulationen (großkanonische und kinetische Monte Carlo) sollen durchgeführt werden, um die theoretischen Resultate zu validieren. In Kollaborationen mit experimentellen Gruppen sollen die Resultate zur Zeitabhängigkeit von smektischer Schichtbildung und bei Schaltprozessen zwischen verschiedenen nematischen Benetzungszuständen getestet werden.

## Summary

Using theoretical methods and accompanying simulations, we will investigate liquid crystals near switchable substrates. Of particular interest is the approach to wetting transitions and switches between different wetting states.

As a model system, we consider lattice rods with short-range attractions.

We have developed and will further improve classical density functionals for these models as well as formulate a suitable dynamic density functional theory.

Wetting phase diagrams will be computed for nematically ordered (upright or lying-down) and smectic (with possible layering transitions) films. Of particular interest will be the dynamics of smectic layer formation and the switching dynamics between nematic wetting states of different orientation. In these processes, there is little mass transport involved and thus we expect that a lattice dynamics akin to Brownian dynamics can describe these well.

Complementary simulations of grand canonical and kinetic Monte Carlo type will be performed to gauge and validate the theoretical results. Through collaborations with experimental groups the results on time-dependence of smectic layering and of the switching between nematic wetting states shall be tested.



**Antragstyp** Schwerpunktprogramm - Einzelantrag - Neuantrag

**Type of Proposal** Priority Programme - Individual Proposal - New Proposal

**Antragsdauer / Requested Duration** 36 Monate / 36 months

**Fach** Theoretische Physik der kondensierten Materie

**Subject Area** Theoretical Condensed Matter Physics

**Rahmenprojekt / Framework Project** SPP 2171

**Titel** **Mathematische Modellierung und Simulation der Wechselwirkung von Substraten mit Strömungen durch verallgemeinerte Gradientenflüsse**

**Title** **Mathematical modeling and simulation of substrate-flow interaction using generalized gradient flows**

**Geschäftszeichen / Reference No.** **PE 1782/2-1**

**Antragsteller / Applicant** **Dr. Dirk Peschka**  
Weierstraß-Institut für Angewandte Analysis und Stochastik (WIAS)  
Forschungsgruppe Modellierung, Analysis u Skalenübergänge  
von Volumen-Grenzschicht-Prozessen  
Berlin

**Arbeitgeberzusage Statement by Employer** Die Erklärung zur Arbeitgeberfunktion liegt noch nicht vor.  
A statement regarding employer status has not yet been received.

**Beantragte Mittel / Budget Request:**

	Beantragt / Requested		
<b>Dauer [Monate] / Duration [Months]</b>	<b>36</b>		
<b>PE 1782/2-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>225.450</b>		
<b>Dr. Dirk Peschka</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>209.700</b>
Eigene Stelle 100 % / Temporary Position for Principal Investigator 100 %	1	36	209.700
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>15.750</b>
Gäste / Visiting Researchers			4.500
Publikationen / Publications			2.250
Reisen / Travel			9.000

## **Zusammenfassung**

Der Antrag im Schwerpunktprogramm „Dynamic Wetting of Flexible, Adaptive and Switchable Surfaces“ (SPP 2171) befasst sich mit der thermodynamisch konsistenten Behandlung von Strömungen auf Substraten, deren Dynamik stark an die Eigenschaften bzw. die Dynamik dieses Substrates gekoppelt ist. Methodisch konzentriert sich die Arbeit dabei auf sogenannte Gradientenflüsse, d.h. Modellbeschreibungen bei denen konservative Kräfte im optimalen Gleichgewicht mit dissipativen Reibungskräften stehen. Während solche Beschreibungen im klassischen Fall von quadratischer Dissipation im Volumen bereits relativ gut untersucht sind, ist das Ziel des vorliegenden Antrages die systematische Erweiterung dieser Ansätze auf nicht-quadratische Dissipation unter der Einbeziehung von Grenzflächen und Kontaktlinien. Insbesondere für Entnetzungsprozesse haben die Vorarbeiten des Antragstellers klar gezeigt, dass die Einbeziehung solcher Ansätze von essentieller Bedeutung für physikalisch realistische Beschreibungen ist.

In der theoretischen Beschreibung geht es hierbei vor allen Dingen um Kontinuumsmodelle mit scharfen Grenzflächen und bewegten Kontaktlinien, wobei hier sowohl (Navier)-Stokes Gleichungen als auch reduzierte Modelle für dünne Filme betrachtet werden sollen. Neben der Entwicklung von Modellstrukturen ist die Implementation entsprechender numerischer Verfahren auf Basis von finiten Elementen ein integraler Bestandteil dieses Antrages. Hier stehen besonders die Fragestellungen der numerischen Behandlung von verallgemeinerten Gradientenstrukturen mit Hysterese und die Bewegung von Gebieten mit sogenannten „Arbitrary Lagrangian Eulerian“ Verfahren im Vordergrund.

Die entwickelten Methoden sollen dann auf unterschiedlichen Anwendungsszenarien anderer Projekte des Schwerpunktprogramms übertragen werden: Naheliegend ist der Vergleich der numerischen Methoden mit unterschiedlichen numerischen Verfahren anderer Kollegen. Weiterhin erlaubt die energetische Formulierung die Beschreibung chemisch heterogener Substrate (z.B. energetischer Stufen), mit denen z.B. die Entnetzungsdynamik von Tropfen direkt beeinflusst werden kann. Die konkrete Entwicklung der Volumen/Grenzflächen/Kontaktlinien-Kopplung ist in Zusammenarbeit mit anderen Projekten geplant. Die Kopplung an Substrate mit einer eigenen Dynamik soll für poröse Substrate, Substrate mit „Surfactants“ und deformierbare Substrate erfolgen.

## **Summary**

The proposal in the priority program "Dynamic Wetting of Flexible, Adaptive and Switchable Surfaces" (SPP 2171) considers the thermodynamically consistent treatment of flows over substrates whose dynamics is strongly coupled to the properties or the dynamics of this substrate. Methodically, the work concentrates on so-called gradient flows, i.e. model descriptions in which conservative forces are in optimal equilibrium with dissipative friction forces. While such descriptions are already well studied in the classical case, i.e. quadratic dissipation in volume, the aim of the present proposal is the systematic extension of these approaches to non-quadratic dissipation and the inclusion of free interfaces and contact lines. Especially for dewetting processes, the preliminary work of the applicant has clearly shown that the inclusion of such approaches is of essential importance for physically realistic .

The theoretical description is mainly concerned with continuum models with sharp interfaces and moving contact lines, where both (Navier)-Stokes equations and reduced models for thin films will be considered. In addition to the development of model structures, the implementation of numerical methods based on finite elements is an integral part of this proposal. In particular, the numerical treatment of generalized gradient structures with

hysteresis and the movement of regions with so-called Arbitrary Lagrangian Eulerian methods are the main topics.

The developed methods will then be transferred to different applications of other projects in the priority program: Numerical methods will be compared with different approaches of other colleagues. Furthermore, the energetic formulation allows the description of chemically heterogeneous substrates (e.g. energetic steps), with which, e.g., the dewetting dynamics of droplets can be directly influenced. The concrete development of the volume/interface/contact line coupling is planned in cooperation with other projects. The coupling to substrates with their own dynamics will take place for porous substrates, substrates with "surfactants" and deformable substrates.

**Antragstyp** Schwerpunktprogramm - Einzelantrag - Neuantrag

**Type of Proposal** Priority Programme - Individual Proposal - New Proposal

**Antragsdauer / Requested Duration** 36 Monate / 36 months

**Fach** Statistische Physik, Weiche Materie, Biologische Physik, Nichtlineare Dynamik

**Subject Area** Statistical Physics, Soft Matter, Biological Physics, Nonlinear Dynamics

**Rahmenprojekt / Framework Project** SPP 2171

**Titel** **Adaptiver Transport von Tropfen durch gekoppelte Strömungswege**

**Title** **Adaptive Droplets Transport Through Coupled Flow Paths**

**Geschäftszeichen / Reference No.** **PF 375/6-1**

**Antragsteller / Applicant** **Dr. Thomas Pfohl**  
Albert-Ludwigs-Universität Freiburg  
Physikalisches Institut  
Lehrstuhl für Experimentelle Polymerphysik  
Freiburg

**Kooperations-partnerinnen und Kooperations-partner / Cooperation Partners** Professor Dr. Ullrich Steiner  
Université de Fribourg  
Adolphe Merkle Institute  
Fribourg  
Schweiz / Switzerland

**Beantragte Mittel / Budget Request:**

	Beantragt / Requested		
<b>Dauer [Monate] / Duration [Months]</b>	<b>36</b>		
<b>PF 375/6-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>215.350</b>		
<b>Dr. Thomas Pfohl</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>145.100</b>
Doktorandin/Doktorand und Vergleichbare 75 % / Doctoral Researcher or Comparable 75 %	1	36	145.100
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>70.250</b>
Geräte bis 10.000 Euro, Software und Verbrauchsmaterial / Equipment up to EUR 10,000, Software and Consumables			53.000
Publikationen / Publications			2.250

Reisen / Travel			15.000
-----------------	--	--	--------

**Zusammenfassung** Flexible und adaptive Materialsysteme mit ihrer Fähigkeit, dynamische Verformungen im Mikrobereich zu erzeugen, sind für eine Vielzahl spannender neuer Anwendungen relevant, wie z.B. in der „Tissue-Engineering“, adaptiven Optik, flexiblen Elektronik und weichen Robotik. Ziel dieses Projekts ist es, den Transport von Flüssigkeiten und Tröpfchen in Kanälen zu untersuchen und zu analysieren, die durch flexible Membranen in mikrofluidischer Umgebung miteinander verbunden sind. Der vorgeschlagene mikrofluidische Aufbau für mehrphasige Strömungsexperimente, bestehend aus zwei durch eine dünne flexible Membran getrennten Transportkanälen, ermöglicht eine definierte laminare Strömungskontrolle innerhalb der Transportkanäle, eine genaue Positionierung der Tröpfchen und die Möglichkeit, die Tröpfchenbewegungen und den Transport innerhalb der Kanäle zu analysieren und Kreuzkorrelationen zwischen den Kanälen zu bestimmen. Aufgrund der sich bewegenden Tröpfchen und der auf beide Seiten der Membran einwirkenden Strömung reagiert die dünne elastische Membran spezifisch und verformt sich lokal auf die sich bewegenden Kontaktlinien der Tröpfchen, strömungsinduzierte Druckdifferenzen und scherinduzierte Effekte, was einen starken Einfluss auf die Transporteigenschaften in beiden Kanälen hat. Darüber hinaus wird mit Hilfe der Elektro-Hydrodynamik (EHD), die zur Unterstützung der strömungsinduzierten Instabilitäten der Membranen und der Rückkopplung in beiden Transportkanälen eingesetzt wird, die Kopplung und Querkommunikation der fließenden Materialien und der Informationstransport verstärkt und spezifisch gestaltet. Diese membraninduzierte Wechselwirkung wird verwendet, um die Tröpfchenbewegung und spezifische Strömungen innerhalb von fluidischen Transportwegen zu bewegen, anzupassen, steuern, verschieben und stoppen und darüber hinaus Strömungsmuster mit Anpassungs- und Selbstregulierungsfähigkeiten sowie langfristige logische Verbindungen und Operationen innerhalb der Transportnetze einzuführen.

**Summary** Flexible and adaptive materials systems with their ability to create dynamic deformations on the microscale are relevant to a wide variety of exciting new applications such as in tissue engineering, adaptable optics, flexible electronics and soft robotics. The aim of this project is to study and analyze the transport of fluids and droplets in channels interfaced by flexible membranes in microfluidic environment. The proposed microfluidic setup for multiphase flow experiments, consisting of two transport channels separated by a thin flexible membrane, allows for a defined laminar flow-control within transport channels, an exact positioning of droplets and the opportunity to analyze droplet motion and transport within the channels and cross-correlation between the channels. Owing to the moving droplets and applied flow acting on both sides of the membrane, the thin elastic membrane will specifically respond and locally deform on the acting moving contact line, flow-induced pressure differences and shear-induced effects, having a strong impact on the transport properties in both channels. Moreover, using electro-hydrodynamics (EHD), which are going to be applied to interact with, stabilize and modify flow-induced instabilities of the membranes and the feedback in both transport channels, the coupling and cross-communication of the flowing materials and information transport will be amplified and specifically shaped. This membrane-initiated cross-communication will be used to move, adapt, govern, shift and stop droplet motion and specific flows within fluid transport routes and moreover to introduce flow patterns with adaption and self-regulation capabilities as well as on the long term logical links and operations within fluid transport networks.

**Bemerkung der  
Geschäftsstelle /  
Comment by the DFG  
Head Office**

Es handelt sich um einen Antrag in Kooperation zwischen Wissenschaftlern/Wissenschaftlerinnen aus Deutschland und der Schweiz im Rahmen eines „Lead Agency“-Abkommens, das die DFG mit den Partnerorganisationen aus Österreich (FWF) und der Schweiz (SNF) (DACH-Abkommen) sowie Luxemburg (FNR) geschlossen hat. In den Vereinbarungen zum Lead-Agency-Verfahren kommen die Partnerorganisationen überein, bi- und trilaterale Forschungsprojekte nur durch eine der beteiligten Förderorganisationen federführend begutachten zu lassen. Das Ergebnis der Begutachtung wird von den anderen Partnerorganisationen - vorbehaltlich der Zustimmung der jeweiligen Entscheidungsgremien - anerkannt. Die Finanzierung dieser Projektteile erfolgt dabei national getrennt nach den für die jeweilige Förderorganisation geltenden Regeln.

**Antragstyp** Schwerpunktprogramm - Einzelantrag - Neuantrag

**Type of Proposal** Priority Programme - Individual Proposal - New Proposal

**Antragsdauer / Requested Duration** 36 Monate / 36 months

**Fach** Physikalische Chemie von Molekülen, Flüssigkeiten und Grenzflächen - Spektroskopie, Kinetik

**Subject Area** Physical Chemistry of Molecules, Interfaces and Liquids - Spectroscopy, Kinetics

**Rahmenprojekt / Framework Project** SPP 2171

**Titel** **Dynamische Benetzung von selbstorganisierenden Monoschichten und Polymerbürsten mit photosteuerbaren Arylazopyrazolen**

**Title** **Dynamic wetting of self-assembled monolayers and polymer brushes functionalized with photoresponsive arylazopyrazoles**

**Geschäftszeichen / Reference No.** RA 1732/13-1

**Antragsteller / Applicant** **Professor Dr. Bart Jan Ravoo**  
Westfälische Wilhelms-Universität Münster  
Organisch-Chemisches Institut  
Münster

**Beantragte Mittel / Budget Request:**

	Beantragt / Requested		
<b>Dauer [Monate] / Duration [Months]</b>	<b>36</b>		
<b>RA 1732/13-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>183.350</b>		
<b>Professor Dr. Bart Jan Ravoo</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>145.100</b>
Doktorandin/Doktorand und Vergleichbare 75 % / Doctoral Researcher or Comparable 75 %	1	36	145.100
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>38.250</b>
Geräte bis 10.000 Euro, Software und Verbrauchsmaterial / Equipment up to EUR 10,000, Software and Consumables			30.000
Publikationen / Publications			2.250
Reisen / Travel			6.000

**Bewilligungen der letzten vier Jahre zu anderen Projekten (seit 15.10.2014) /**  
**DFG Project Funding Over the Last Four Years (since 15.10.2014):**

Datum / Date Gz / Ref		Euro
	<b>Professor Dr. Bart Jan Ravoo</b>	<b>2.103.100</b>
01.12.2017 INST 211/834-1	Sonderforschungsbereich: Einzelantrag / Collaborative Research Centres: Individual Proposal Selbstorganisierte Polymer-Nanokapseln – Stimulus-responsive Systeme für die kontrollierte Wirkstofffreisetzung und für die kooperative Katalyse / Self-Assembled Polymer Nanocontainers – Stimuli Responsive Systems for Controlled Drug Release and Cooperative Catalysis	770.000
01.12.2017 INST 211/655-2	Sonderforschungsbereich: Einzelantrag / Collaborative Research Centres: Individual Proposal Innovative Liganden an Nanopartikeln und Oberflächen / Innovative Ligands at Nanoparticles and at Surfaces	527.900
01.12.2017 INST 211/516-3	Sonderforschungsbereich: Einzelantrag / Collaborative Research Centres: Individual Proposal Biomimetische molekulare Erkennung von Kohlenhydraten und Peptiden / Biomimetic Molecular Recognition of Carbohydrates and Peptides	264.100
07.11.2016 RA 1732/9-1	Paketantrag: Einzelantrag / Package Proposals: Individual Proposal Herstellung und Selbstorganisation kolloidaler Moleküle / Synthesis and Self-Assembly of Colloidal Molecules	208.550
04.08.2016 RA 1732/7-1	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal Wirt-Gast-Komplexe von Cyclodextrinen und Nanodiamanten / Host-Guest Complexes of Cyclodextrins and Nanodiamonds	201.350
03.06.2016 INST 211/623-2	SFB/Transregio: Einzelantrag / CRC/Transregio: Individual Proposal Chemische Reaktionskontrolle mit plasmonischen Gap-Antennen / Chemical reaction control with plasmonic gap antennas	69.400
03.06.2016 INST 211/620-2	SFB/Transregio: Einzelantrag / CRC/Transregio: Individual Proposal Synthese und Selbstorganisation kolloidaler Moleküle / Synthesis and self-assembly of colloidal molecules	61.800

## Zusammenfassung

Molekulare Photoschalter sind einzigartige Verbindungen die durch Bestrahlung mit Licht zwischen zwei stabilen Isomeren (Molekülformen) hin und her geschaltet werden können. Da die Isomere unterschiedliche Eigenschaften aufweisen, führt die Integration von molekularen Photoschaltern in Materialien und Beschichtungen zu makroskopischen Effekten wie lichtschaltbare Stabilität, Permeabilität und Benetzbarkeit. In diesem Projekt untersuchen wir eine neue Klasse von Photoschaltern für die Herstellung von Oberflächen mit lichtsteuerbarer Benetzbarkeit. Aufgrund eines optimierten Moleküldesigns soll der Photoschalter in selbstorganisierenden Monoschichten sowie in Polymernanoschichten eine verstärkte dynamische Benetzbarkeit bewirken.

## Summary

Molecular photoswitches are a unique type of molecules that can be switched reversibly between two isomers (shapes) using irradiation with light. Since the two isomers of the molecular photoswitch have different properties, incorporation of photoswitches into materials and coatings can result in macroscopic effects such as photoswitchable stability, permeability, or wettability. In this project we will investigate a new type of molecular photoswitch to prepare surfaces with photoresponsive wettability. Due to optimized molecular design, the photoswitch can be self-assembled in monolayers or embedded in polymer nanofilms with enhanced dynamic wettability.



**Antragstyp** Schwerpunktprogramm - Einzelantrag - Neuantrag

**Type of Proposal** Priority Programme - Individual Proposal - New Proposal

**Antragsdauer / Requested Duration** 36 Monate / 36 months

**Fach** Physikalische Chemie von Festkörpern und Oberflächen, Materialcharakterisierung

**Subject Area** Physical Chemistry of Solids and Surfaces, Material Characterisation

**Rahmenprojekt / Framework Project** SPP 2171

**Titel** **Fotoschaltbare Oberflächentopographien basierend auf responsiven Hydrogelen mit eingepprägter Oberflächen-Nanostruktur für systematische Untersuchungen von Benetzungsdynamiken**

**Title** **Photoswitchable surface topographies based on responsive hydrogels with embossed surface nanostructure for the systematic investigation of wetting dynamics**

**Geschäftszeichen / Reference No.** **RE 3228/4-1**

**Antragsteller / Applicant** **Dr. Stefan Reinicke**  
Fraunhofer-Institut für Angewandte Polymerforschung (IAP)  
Potsdam

**Mitverantwortlicher / Co-Applicant** Professor Dr. Alexander Böker  
Universität Potsdam  
Institut für Chemie  
Lehrstuhl für Polymermaterialien und Polymertechnologie  
Potsdam

**Beantragte Mittel / Budget Request:**

	<b>Beantragt / Requested</b>		
<b>Dauer [Monate] / Duration [Months]</b>	<b>36</b>		
<b>RE 3228/4-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>204.700</b>		
<b>Dr. Stefan Reinicke</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>165.200</b>
Doktorandin/Doktorand und Vergleichbare 67 % / Doctoral Researcher or Comparable 67 %	1	36	129.600
Hilfskräfte / Support Staff			35.600
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>39.500</b>

Geräte bis 10.000 Euro, Software und Verbrauchsmaterial / Equipment up to EUR 10,000, Software and Consumables			30.000
Publikationen / Publications			2.500
Reisen / Travel			7.000

**Bewilligungen der letzten vier Jahre zu anderen Projekten (seit 15.10.2014 ) /  
DFG Project Funding Over the Last Four Years (since 15.10.2014):**

Datum / Date Gz / Ref		Euro
	<b>Dr. Stefan Reinicke</b>	<b>220.592</b>
16.08.2017 RE 3228/3-1	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal Temperaturgesteuerte Schaltung von Enzymaktivität mittels polymergebundener, thermosensitiver Inhibitormotive / Temperature triggered switching of enzymatic activity via polymer bound, thermoresponsive inhibitor motifs	220.592

**Zusammenfassung**

Das Vorhaben zielt darauf ab ein neues Konzept zur lichtgesteuerten Veränderung von Oberflächentopographien ohne gleichzeitige Veränderung weiterer Oberflächenparameter zu etablieren. Grundlage eines solchen Konzepts soll ein anisotrop quellender, photoresponsiver Hydrogelstreifen sein, in dessen Oberfläche spezifische, nanoskalige Faltenstrukturen eingepreßt sind, die im Zuge der lichtgesteuerten lateralen Aufquellung des Gelstreifens ihre Dimensionen bis hin zu ihrem völligen Verschwinden verändern.

Die Gelstreifen werden durch Abguss von oberflächenstrukturierten Vorlagen hergestellt die wiederum durch kontrolliertes Falten von PDMS-Substraten erhältlich sind.

Zusätzlich werden die Gelstreifen durch grafting-Techniken mit ultradünnen, nicht-responsiven Oberflächen versehen um eine Veränderung der Oberflächenhydrophilie des Gel im Zuge des reversiblen Quellvorgangs zu verhindern. Zusätzliche Maßnahmen wie das Einbringen von Füllmaterialien mit hohem Aspektverhältnis soll die anisotrope Quellung im Zuge des Einstrahlens von Licht gewährleisten. Basis für die Photoschaltbarkeit soll eine thermosensitive Polymermatrix sein, in Kombination mit photosensitiven Arylazopyrazol-Einheiten, die die Übergangstemperatur des Gels verschieben.

Die hergestellten Materialien sollen es erlauben, schnell, nicht-invasiv und periodisch zwischen extremen Benetzungszuständen hin- und herzuschalten um so systematisch Benetzungsdynamiken untersuchen zu können. Verschiedene Oberflächentopographien (uniaxiale Falten, radiale Falten, usw.) sowie -chemien sollen dabei ein breites Anwendungsspektrum gewährleisten. Durch orts- und zeitaufgelöste Einstrahlung von Licht soll zudem die Möglichkeit geschaffen werden, Flüssigkeitstropfen lichtgesteuert auf entsprechenden Oberflächen zu bewegen.

Verschiedene Fragestellungen zur Benetzungsdynamik einfacher Flüssigkeiten sollen als Anwendungsfall für unser neues Konzept demonstriert werden. Dazu gehören unter anderem die Benetzungsdynamik bei wiederholter Schaltung zwischen einer einfachen Falten- und einer glatten Oberfläche sowie die Ermittlung der Grenzkontaktwinkel bei einem Hysterese zeigendem Benetzungsverhalten.

## Summary

The proposed project aims at establishing a new concept for a light triggered change of surface topographies without additional change of other surface parameters. Basis for such a concept will be an anisotropically swellable, photoresponsive hydrogel stripe with a surface into which specific, nanoscaled wrinkle structures are embossed. These wrinkled surfaces are supposed to alter their dimension up to a complete diminishment of the nanofeatures upon the light triggered, lateral swelling of the gel stripe.

The gel stripes will be created by casting of precursor material onto wrinkled master specimens that in turn are available by controlled wrinkling of PDMS-substrates. Additionally, ultrathin, non-responsive top layers will be introduced by grafting techniques, in order to avoid a change of the surface hydrophilicity of the gel during its reversible swelling. Additional measures such as the introduction of filling material with high aspect ratio will ensure the anisotropy of the phototriggered swelling. The basis for photoswitchability will be a thermosensitive polymer matrix in combination with photosensitive arylazopyrazol units that shift the transition temperature of the gel.

The fabricated material is supposed to allow for a fast, non-invasive and periodic switching between extreme wetting cases in order to systematically study wetting dynamics. Different surface topographies (uniaxially oriented wrinkles, radially oriented wrinkles, etc.) as well as chemistries will ensure a broad application spectrum. By spatial and time resolved light irradiation we also want to create the possibility of a light steered motion of liquid droplets on respective surfaces.

Different research questions on the wetting dynamics of simple fluids will be addressed in order to demonstrate use cases for our new concept. This includes wetting dynamics during repeated switching between simple wrinkled and smooth surfaces as well as the detection of advancing/receding contact angle for contact angle hysteresis cases.

## Bemerkung der Geschäftsstelle / Comment by the DFG Head Office

Es liegt ein befristeter Arbeitsvertrag vor, der am 31.03.2021 ausläuft.  
The applicant's fixed-term contract will expire on 31.03.2021.

**Antragstyp** Schwerpunktprogramm - Einzelantrag - Neuantrag

**Type of Proposal** Priority Programme - Individual Proposal - New Proposal

**Antragsdauer / Requested Duration** 36 Monate / 36 months

**Fach** Physikalische Chemie von Molekülen, Flüssigkeiten und Grenzflächen - Spektroskopie, Kinetik

**Subject Area** Physical Chemistry of Molecules, Interfaces and Liquids - Spectroscopy, Kinetics

**Rahmenprojekt / Framework Project** SPP 2171

**Titel** **Benetzungskinetik von stimuli-responsiven Polymerschichten**

**Title** **Wetting kinetic of Stimuli-Responsive Polymer Carpets**

**Geschäftszeichen / Reference No.** **RI 529/18-1**

**Antragsteller / Applicant** **Privatdozent Dr. Hans Riegler**  
Max-Planck-Institut für Kolloid- und Grenzflächenforschung  
Wissenschaftspark Potsdam-Golm  
Potsdam

**Beantragte Mittel / Budget Request:**

	Beantragt / Requested		
<b>Dauer [Monate] / Duration [Months]</b>	<b>36</b>		
<b>RI 529/18-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>167.350</b>		
<b>Privatdozent Dr. Hans Riegler</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>145.100</b>
Doktorandin/Doktorand und Vergleichbare 75 % / Doctoral Researcher or Comparable 75 %	1	36	145.100
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>22.250</b>
Geräte bis 10.000 Euro, Software und Verbrauchsmaterial / Equipment up to EUR 10,000, Software and Consumables			15.000
Publikationen / Publications			2.250
Reisen / Travel			5.000

**Zusammenfassung** Ziel dieses Vorschlags ist die zeitaufgelöste Untersuchung der Reaktion von stimuli-reaktiven Schichten von Polymerteppichen (Polymerbürsten, die an flexible, ultradünne Nanoschichten gebunden sind) auf Veränderungen der Eigenschaften von Flüssigkeiten, die mit diesen Schichten in Kontakt

stehen. Änderungen des pH-Wertes der Flüssigkeit, ihrer Ionenzusammensetzung, ihrer Lösungsmittelzusammensetzung usw. können zu Schichtquellungen, Knicken und anderen strukturellen Veränderungen führen. Dies wiederum verändert das Benetzungsverhalten der Polymerteppiche. Wir werden die Reaktionen der Polymerlagen bzw. Polymerteppiche mit optischer Reflexionsinterferenzmikroskopie auf Zeitskalen zwischen Millisekunden und Minuten, auf lateralen Skalen von Mikrometern und auf vertikalen Skalen von Nanometern untersuchen.

## **Summary**

The aim of this proposal is the time-resolved investigation of the reaction of stimuli-responsive layers of polymer carpets (polymer brushes grafted to flexible, ultrathin nanosheets) to changes of the properties of liquids, which are in contact with these layers. Changes of the pH of the liquid, its ion composition, its solvent composition, etc., can induce layer swelling, buckling, other structural changes. This in turn changes the wetting behaviour of the polymer carpets. We will study the carpet responses with optical reflection interference microscopy on time scales between milliseconds and minutes, on lateral scales of micrometers, and on vertical scales of nanometers.

**Antragstyp** Schwerpunktprogramm - Einzelantrag - Neuantrag

**Type of Proposal** Priority Programme - Individual Proposal - New Proposal

**Antragsdauer / Requested Duration** 36 Monate / 36 months

**Fach** Herstellung und Eigenschaften von Funktionsmaterialien

**Subject Area** Synthesis and Properties of Functional Materials

**Rahmenprojekt / Framework Project** SPP 2171

**Titel** **Dynamisches Verhalten von Wassertropfen auf flexiblen, adaptiven und schaltbaren Oberflächen aus oberflächengebundenen Polymernetzwerken und Bürsten**

**Title** **Dynamic behavior of water droplets on flexible, adaptive and switchable surfaces generated using surface attached polymer networks and brushes**

**Geschäftszeichen / Reference No.** **RU 489/37-1**

**Antragsteller / Applicant** **Professor Dr. Jürgen Rühle**  
Albert-Ludwigs-Universität Freiburg  
Institut für Mikrosystemtechnik (IMTEK)  
Lehrstuhl Chemie und Physik der Grenzflächen  
Freiburg

**Mitverantwortlicher / Co-Applicant** Dr. Oswald Prucker  
Albert-Ludwigs-Universität Freiburg  
Institut für Mikrosystemtechnik (IMTEK)  
Freiburg

**Beantragte Mittel / Budget Request:**

	Beantragt / Requested		
<b>Dauer [Monate] / Duration [Months]</b>	<b>36</b>		
<b>RU 489/37-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>325.950</b>		
<b>Professor Dr. Jürgen Rühle</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>259.200</b>
Doktorandin/Doktorand und Vergleichbare 67 % / Doctoral Researcher or Comparable 67 %	2	36	259.200
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>66.750</b>

Geräte bis 10.000 Euro, Software und Verbrauchsmaterial / Equipment up to EUR 10,000, Software and Consumables			60.000
Publikationen / Publications			2.250
Reisen / Travel			4.500

**Bewilligungen der letzten vier Jahre zu anderen Projekten (seit 15.10.2014 ) /  
DFG Project Funding Over the Last Four Years (since 15.10.2014):**

Datum / Date Gz / Ref		Euro
	<b>Professor Dr. Jürgen Rühle</b>	<b>1.079.900</b>
18.07.2018 RU 489/34-1	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal Polymer-modifizierte Papiere - Vermeidung von Sensitivitätsverlusten in papierbasierten analytischen Verfahren. / Polymer modified paper - reducing sensitivity losses in paper-based analytical devices	211.400
16.05.2018 RU 489/33-1	Paketantrag: Einzelantrag / Package Proposals: Individual Proposal Thermische und photochemische Vernetzung von Papierfasern zur Erzeugung von nassfesten und multifunktionalen Papieren / Thermal and Photochemical Crosslinking of Paper Fibers for Generation of Paper Substrates Providing a High Wet Strength and Multiple Chemical Functions	202.300
29.11.2016 INST 187/543-2	SFB/Transregio: Serviceprojekt / CRC/Transregio: Service Project Polymersynthesen / Polymer synthesis	81.400
29.11.2016 INST 187/526-2	SFB/Transregio: Einzelantrag / CRC/Transregio: Individual Proposal Neuartige Polymermaterialien zur Herstellung von mikrooptischen Strukturen auf Folien / Novel polymer materials for the generation of micro-optical structures on foils	62.300
29.11.2016 INST 187/536-2	SFB/Transregio: Einzelantrag / CRC/Transregio: Individual Proposal Entwicklung eines neuartigen Reaktivlaminierprozesses zur Herstellung von funktionalisierten und strukturierten Folienverbunden für polymeroptische Anwendungen / Development of a novel reactive lamination process for the generation of functional and micro structured multilayer foils for polymer optical applications	139.700
11.05.2016 RU 489/31-1	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal Entwicklung einer miniaturisierten Analyseplattform zur quantitativen, zeitaufgelösten Hochdurchsatz-Analyse von AKT-mTOR-Signalnetzwerk- Kinetiken in Krebszellen / Development of a miniaturized analysis platform for quantitative and time-resolved high throughput-analysis of AKT-mTOR signaling kinetics in cancer cells	188.000
09.01.2015 RU 489/29-1	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal Molekulare Analyse mechanobiologischer Reaktionen von humanen mesenchymalen Stammzellen auf biomechanische Umgebungsreize induziert durch magnetisch aktuierebare Mikrostrukturen - $\mu$ MSC / Molecular analysis of mechanobiological reactions of human mesenchymal stem cells on biomechanical extracellular cues induced by magnetically actuated microstructures - $\mu$ MSC	194.800

**Zusammenfassung**

Übergeordnetes Ziel des Forschungsprojektes im Rahmen des SPP2171 ist es, Substratoberflächen mit einer maßgeschneiderten Chemie und Topographie zu erzeugen, die dynamisch auf Veränderungen in der Umgebung reagieren können, und das Benetzungsverhalten einfacher Flüssigkeiten auf solchen rekonfigurierbaren Oberflächen zu untersuchen. Ziel ist es, ein tieferes Verständnis in die Dynamik der Be- und Entnetzung solcher Flüssigkeiten auf schaltbaren Substraten zu erhalten. Wir werden uns vor allem auf experimentelle Methoden konzentrieren, aber

auch die Ergebnisse mit theoretischen Analysen in Zusammenarbeit mit Wissenschaftlern des Schwerpunktprogramms kombinieren. Wir wollen im Wesentlichen zwei Konzeptlinien verfolgen, die im Laufe des Projekts zusammengeführt werden: 1. Wir werden Substrate erzeugen, bei denen eine spezifische Oberflächentopographie gewählt und die Oberflächenchemie so angepasst wird, dass dynamische Veränderungen durch z.B. Isomerisierungsreaktionen möglich sind. Diese Isomerisierungen ändern die Oberflächenenergie und führen dann zu einer dynamischen Änderung des Benetzungsverhaltens. 2. Wir erzeugen Substrate, bei denen eine bestimmte Oberflächenchemie gewählt und die Oberfläche durch mikrotechnische Methoden rekonfigurierbar gemacht wird. Dabei kann die Oberflächentopographie entweder durch einen externen Stimulus von glatt auf rau geschaltet werden oder die Oberfläche verformt sich bei Flüssigkeitskontakt. In einigen Fällen wird der Schaltvorgang durch die Benetzungsflüssigkeit selbst ausgelöst, so dass ansprechbare/adaptive Oberflächen entstehen. Gegen Ende der Förderperiode werden die beiden Linien entweder durch die Erzeugung einer auf mehrere Reize ansprechenden Oberfläche zusammengeführt, wobei ein Reiz auf die Oberflächenchemie bzw. die Oberflächenpolarität und einer auf die Topographie wirkt. In anderen Fällen ist vorgesehen, die entwickelten Technologien als Werkzeugkasten zu nutzen, bei dem die Eigenschaften der Oberflächen in den beiden Projektlinien (stimulierte Oberflächenchemie und stimulierte Topographie) zu dynamisch rekonfigurierbaren Oberflächen kombiniert werden, wobei die dynamischen Veränderungen einen sehr starken Einfluss auf das Benetzungsverhalten haben.

## Summary

The overarching goal of the research project within the SPP2171 is to generate substrate surfaces with a tailor-made chemistry and topography which can respond dynamically to changes in the environment and to study the wetting behavior of simple liquids on such reconfigurable surfaces. We will aim to obtain a deeper insight into dynamics of wetting as well as dewetting of such liquids on switchable/ substrates. We will focus primarily on experimental methods but will also combine results with theoretical analyses in collaboration within the priority program. We will follow essentially two concept lines: 1. We will generate substrates where a specific surface topography is chosen and the surface chemistry is adjusted to allow dynamic changes through e.g. isomerization reactions which allow to change the surface energy and thus the wetting behavior in a dynamic way. 2. We will generate substrates, where a certain surface chemistry is chosen and the surface is made reconfigurable through microengineering tools, eg. the surface topography is systematically switched from smooth to rough through an external stimulus or where the surface is becoming deformed in the course of liquid contact. In some cases the switching process will be induced by the wetting liquid itself so that responsive/adaptive surfaces are obtained. Towards the end of the funding period the two lines will be brought together either by generating multiple-stimulus responsive surface, where one stimulus acts on the surface chemistry/ surface polarity and one on the topography. In other cases it is envisioned to use the developed technologies as a toolbox, where features of the surfaces in the two project lines (stimulus responsive surface chemistry and stimulus responsive topography) are combined to generate dynamically reconfigurable surfaces, where the dynamic changes have a very strong impact on the wetting behavior.



**Antragstyp** Schwerpunktprogramm - Einzelantrag - Neuantrag

**Type of Proposal** Priority Programme - Individual Proposal - New Proposal

**Antragsdauer / Requested Duration** 36 Monate / 36 months

**Fach** Polymermaterialien

**Subject Area** Polymer Materials

**Rahmenprojekt / Framework Project** SPP 2171

**Titel** **AzoDüne: Licht induzierte dynamisch schaltbare Benetzung auf azobenzolhaltigen, strukturierten Polymeroberflächen**

**Title** **AzoDune: Light switchable dynamic wetting on azobenzene containing structured polymer surfaces**

**Geschäftszeichen / Reference No.** **SA 1657/16-1**

**Antragstellerin / Applicant** **Professorin Dr. Svetlana Santer**  
Universität Potsdam  
Institut für Physik und Astronomie  
Potsdam

**Beantragte Mittel / Budget Request:**

	Beantragt / Requested		
<b>Dauer [Monate] / Duration [Months]</b>	<b>36</b>		
<b>SA 1657/16-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>192.950</b>		
<b>Professorin Dr. Svetlana Santer</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>145.100</b>
Doktorandin/Doktorand und Vergleichbare 75 % / Doctoral Researcher or Comparable 75 %	1	36	145.100
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>47.850</b>
Geräte bis 10.000 Euro, Software und Verbrauchsmaterial / Equipment up to EUR 10,000, Software and Consumables			37.000
Publikationen / Publications			2.250
Reisen / Travel			8.600

**Bewilligungen der letzten vier Jahre zu anderen Projekten (seit 15.10.2014 ) / DFG Project Funding Over the Last Four Years (since 15.10.2014):**

Datum / Date Gz / Ref		Euro
	<b>Professorin Dr. Svetlana Santer</b>	<b>523.190</b>
21.04.2017 SA 1657/9-2	Schwerpunktprogramm: Einzelantrag / Priority Programmes: Individual Proposal Lichtinduzierte Diffusioosmose: von der Manipulation über Eigenantrieb zu kollektivem Verhalten von Mikrokolloiden an flüssigfest Grenzflächen / Light-driven diffusioosmosis: from active manipulation over self-propulsion to collective behaviour of small particles at solid liquid interfaces	281.500
22.12.2016 SA 1657/15-1	Internationale Zusammenarbeit: Internationale Kooperationsanbahnung / International Cooperation: Initiation of Int. Collaboration Aufbau einer internationalen Kollaboration zur Untersuchung der optomechanischen Spannungen in azobenzolhaltigen Polymerfilmen - Projekt (USA) / Establishing of a bilateral collaboration in order to study the optomechanical forces generated within azobenzene containing polymer films	15.140
21.01.2016 SA 1657/13-1	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal Überbrückung molekularer Orientierung und des Isomerisierungszustandes mit der Makroverformung photoaktiver azobenzolhaltigen Materialien / Bridging molecular orientation and isomerization state with macro-deformation in photoactive azobenzene-containing materials	18.700
06.01.2016 SA 1657/13-1	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal Überbrückung molekularer Orientierung und des Isomerisierungszustandes mit der Makroverformung photoaktiver azobenzolhaltigen Materialien / Bridging molecular orientation and isomerization state with macro-deformation in photoactive azobenzene-containing materials	207.850

## Zusammenfassung

In diesem Projekt sollen die einzigartigen Eigenschaften azobenzolhaltiger, photosensitiver Polymere ausgenutzt werden, um strukturierte Oberflächen zu realisieren, mit denen Tröpfchen unter Anwendung weicher optischer Stimuli manipuliert werden können. Es ist bekannt das azobenzolhaltiger dünne Polymerfilme unter Bestrahlung mit optischen Interferenzmustern sogenannte Oberflächenreliefs ausbilden, die im einfachsten Fall das sinusförmige Interferenzmuster nachzeichnen. Die Amplitude kann dabei so groß werden wie die Dicke des ungestörten Films. Die Ausbildung des Reliefs erfolgt dabei ausschliesslich im Glaszustand. Ein speziell entwickelter experimenteller Aufbau, mit dem sich die Belichtungsbedingungen präzise steuern und gleichzeitig mit einem AFM in situ Topographieänderungen aufnehmen lassen, haben gezeigt, dass sich die topographischen Muster kontinuierlich bewegen lassen. Um etwa ein Streifenrelief ähnlich der Dünen einer Wüste wandern zu lassen, sind lediglich gezielte Polarisationsänderungen in den interferierenden Lichtstrahlen notwendig. Diese Art dynamisch-kontinuierlicher reversibler Anpassung von Polymerstrukturen soll in diesem Projekt auf spezielle mit photosensitiven Polymeren modifizierten Oberflächen angewandt werden. Wasserabweisende Oberflächen, die aus Feldern isolierter Säulen oder Posts bestehen, sollen lokal durch optische Stimuli in ihrer Hydrophobizität verändert werden, in dem die Form der Posts über variable Bereiche der Oberfläche mit Hilfe von Interferenzmustern angepasst wird. Da dies dynamisch und auf reversible Weise realisiert werden kann, lassen sich so adsorbierte Tröpfchen auf derartig kontrollierten Flächen im Prinzip bewegen, in ihrer Form verändern, teilen oder mit anderen mischen, wobei diese Prozesse lediglich mit Hilfe nichtdestruktiver optischer Stimuli erreicht wird.

## Summary

In this project we are going to realize photoswitchable functional surfaces, with which deposited droplets can be manipulated by applying gentle optical stimuli that locally, dynamically and reversibly alter the wettability of the substrate. This will be facilitated by exploiting the unique properties of photosensitive polymers. It is well known that when azobenzene containing

polymer films are irradiated with optical interference patterns the film topography changes drastically to form surface relief gratings: in the simplest case, the topography mimics the intensity distribution and deforms into a wave like, sinusoidal manner, the amplitude of the wave may be as large as the film thickness. This process takes places without softening in the glassy state. Recently we made an intriguing discovery regarding the dynamic formation of these structures under special illumination conditions. We had previously developed a novel setup combining the optical part for generating interference patterns and an AFM for in situ acquisition of topography changes. In this way we could show that these gratings can be “set in motion”, that is, be made to move like dunes in the desert by exploiting repetitive polarization changes in the two interfering beams. In the current project, we want to apply these optical stimuli to arrays of photosensitive posts in order to change the local hydrophobicity of the array in a dynamic, reconfigurable yet reversible way. Such a light-responsive, hydrophobic surface could potentially be made a conveyer or transport system to translocate, rearrange or reshape adsorbed liquid objects just by applying optical stimuli.

**Antragstyp** Schwerpunktprogramm - Einzelantrag - Neuantrag

**Type of Proposal** Priority Programme - Individual Proposal - New Proposal

**Antragsdauer / Requested Duration** 36 Monate / 36 months

**Fach** Statistische Physik, Weiche Materie, Biologische Physik, Nichtlineare Dynamik

**Subject Area** Statistical Physics, Soft Matter, Biological Physics, Nonlinear Dynamics

**Rahmenprojekt / Framework Project** SPP 2171

**Titel** **Dynamische Benetzungseigenschaften und Kontaktwinkelhysterese von Tropfen auf Polymerbürsten und Gelen**

**Title** **Dynamic wetting phenomena and contact angle hysteresis of drops on polymer brushes and gels**

**Geschäftszeichen / Reference No.** **SCHM 985/22-1**

**Antragstellerin / Applicant** **Professorin Dr. Friederike Schmid**  
Johannes Gutenberg-Universität Mainz  
Fachbereich Physik, Mathematik und Informatik  
Institut für Physik  
Mainz

**Geschäftszeichen / Reference No.** **VO 639/16-1**

**Antragstellerin / Applicant** **Professorin Dr. Doris Vollmer**  
Max-Planck-Institut für Polymerforschung  
Mainz

**Beantragte Mittel / Budget Request:**

	Beantragt / Requested		
<b>Dauer [Monate] / Duration [Months]</b>	<b>36</b>		
<b>SCHM 985/22-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>178.150</b>		
<b>Professorin Dr. Friederike Schmid</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>161.900</b>
Doktorandin/Doktorand und Vergleichbare 75 % / Doctoral Researcher or Comparable 75 %	1	36	145.100
Personal (pauschal) / Other Staff			16.800

<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>16.250</b>
Geräte bis 10.000 Euro, Software und Verbrauchsmaterial / Equipment up to EUR 10,000, Software and Consumables			2.000
Publikationen / Publications			2.250
Reisen / Travel			12.000
<b>VO 639/16-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>			<b>189.650</b>
<b>Professorin Dr. Doris Vollmer</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>161.900</b>
Doktorandin/Doktorand und Vergleichbare 75 % / Doctoral Researcher or Comparable 75 %	1	36	145.100
Personal (pauschal) / Other Staff			16.800
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>27.750</b>
Geräte bis 10.000 Euro, Software und Verbrauchsmaterial / Equipment up to EUR 10,000, Software and Consumables			15.000
Publikationen / Publications			2.250
Reisen / Travel			10.500
<b>Gesamtsumme / Total</b>			<b>367.800</b>

**Bewilligungen der letzten vier Jahre zu anderen Projekten (seit 15.10.2014 ) /  
DFG Project Funding Over the Last Four Years (since 15.10.2014):**

<b>Datum / Date Gz / Ref</b>		<b>Euro</b>
	<b>Professorin Dr. Friederike Schmid</b>	<b>4.321.100</b>
23.05.2018 INST 247/777-2	SFB/Transregio: Einzelantrag / CRC/Transregio: Individual Proposal Vergrößerung von frequenzabhängigen Phänomenen und Gedächtniseffekten in kolloidalen Systemen / Coarse-graining frequency-dependent phenomena and memory in colloidal systems	483.700
23.05.2018 INST 247/793-2	SFB/Transregio: Koordinationsantrag / CRC/Transregio: Coordination Proposal Zentrales Verwaltungsprojekt / Central Tasks	2.528.600
23.05.2018 INST 247/786-2	SFB/Transregio: Einzelantrag / CRC/Transregio: Individual Proposal Molekulare Felder als Vermittler zwischen Teilchen-basierten und Kontinu- umsmodellen für makromolekulare Systeme / Using molecular fields to bridge between particle and continuum representa- tions of macromolecular systems	409.900
31.05.2017 INST 247/745-2	Sonderforschungsbereich: Einzelantrag / Collaborative Research Centres: Individual Proposal Komplexierung und Adsorption polymerer Nanocarrier mit biologischen Komponenten wie RNA, Serumsproteinen und anderen Blutbestandteilen und der Einfluss auf Stabilität und Wechselwirkungen mit Zellmembranen / Complexation and adsorption of polymeric nanocarriers with biological components like RNA, serum proteins and further components of blood and its influence on their stability and cell uptake	844.900

Datum / Date Gz / Ref		Euro
18.12.2015  SCHM 985/13-2	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal "Schaltbare" Polymer-Bürsten: Theoretische Aspekte von Phasenübergängen und Nichtgleichgewichtsverhalten / Switches based on polymer brushes: Theoretical aspects of phase transitions and nonequilibrium behavior	54.000

## Zusammenfassung

Tröpfchen auf einer Polymerbürste oder einem Polymergel sind von einer Benetzungskante umgeben. Das liegt daran, dass die vertikalen Komponenten der auf die Grenzflächen wirkenden Kräfte die Bürste bzw. das Gel hochziehen. Die Form und die Höhe der Benetzungskante beeinflussen maßgeblich den Kontaktwinkel und die Reibung bewegter Tröpfchen. In dem Projekt soll ein besseres Verständnis der dynamischen Kontaktwinkel und der Reorganisation der Benetzungskante aufgrund der Bewegung der Tropfen erzielt, und die daraus resultierenden Mechanismen von viskoser Dissipation untersucht werden. Dazu sollen konfokale Laser-Raster-Mikroskopie und vergrößerte Molekulardynamiksimulationen eingesetzt werden.

Geplant ist, die folgenden Modellsysteme zu untersuchen: (I) Polymergele. Hier sollen PDMS-Gele betrachtet werden, die mit Silikon-Öl infiltriert werden. Zum Vergleich sollen auch Hydrogele studiert werden. Es soll die Dicke, die Vernetzungsdichte des Gels, die Viskosität der infiltrierenden Flüssigkeit sowie die Geschwindigkeit des bewegten Tropfens variiert werden. (ii) PDMS-Bürsten ohne und mit eingebrachten freien Polymerketten. Vorläufige experimentelle Untersuchungen haben gezeigt, dass die Gegenwart freier Ketten in der Bürste einen signifikanten Einfluss auf die dynamischen Eigenschaften der aufgetragenen Tropfen hat und insbesondere, auf die Kontaktwinkelhysterese. Abhängig von der Art der Bürste und der Menge freier Ketten ändert sich der Kontaktwinkel maßgeblich. Dies eröffnet neue Möglichkeiten, die Benetzungseigenschaften von Polymerbürsten über einfache physikalische Mechanismen zu kontrollieren.

## Summary

Droplets deposited on polymer brushes or gels are surrounded by a wetting ridge. The reason is that the vertical component of the involved interfacial forces pulls the brush/gel up. The shape and height of the ridge greatly influence the contact angles and friction of drops moving on the surface. We aim to understand the dynamic contact angles, the reorganization of the ridge caused by the moving drops and the resulting mechanisms of viscous dissipation. To gain detailed information on the physics involved in these dynamic wetting phenomena, we intend to combine laser scanning confocal microscopy and coarse grained molecular dynamic simulations.

We intend to focus on the following model systems: (i) Polymer gels. Here we will study PDMS gels infiltrated by silicone oil. Hydrogels will be used for comparison. We plan to vary the thickness and the crosslinking density of the gel, the viscosity of the infiltrated liquid and the velocity of the drop moving on the surfaces. (ii) PDMS brushes with and without immersed free polymer chains. Preliminary experimental studies have shown that the presence of free chains in the brush has a significant impact on the dynamic properties of deposited droplets, and, in particular, on the contact angle hysteresis. Depending on the type of brush and amount of free chains the contact angle varies greatly. This opens new avenues for controlling the wetting properties of polymer brush surfaces by simple physical mechanisms.

**Antragstyp** Schwerpunktprogramm - Einzelantrag - Neuantrag

**Type of Proposal** Priority Programme - Individual Proposal - New Proposal

**Antragsdauer / Requested Duration** 36 Monate / 36 months

**Fach** Statistische Physik, Weiche Materie, Biologische Physik, Nichtlineare Dynamik

**Subject Area** Statistical Physics, Soft Matter, Biological Physics, Nonlinear Dynamics

**Rahmenprojekt / Framework Project** SPP 2171

**Titel** **Dynamisches benetzen und entnetzen von viskosen flüssigen Tropfen/Filmen auf viskoelastischen Substraten**

**Title** **Dynamic wetting and dewetting of viscous liquid droplets/films on viscoelastic substrates**

**Geschäftszeichen / Reference No.** **SE 1118/9-1**

**Antragsteller / Applicant** **Professor Dr. Ralf Seemann**  
Universität des Saarlandes  
Fachrichtung Physik  
Arbeitsgruppe Geometrie fluider Grenzflächen  
Saarbrücken

**Geschäftszeichen / Reference No.** **WA 1653/6-1**

**Antragstellerin / Applicant** **Professorin Dr. Barbara Agnes Wagner, Ph.D.**  
Weierstraß-Institut für Angewandte Analysis und Stochastik (WIAS)  
Leibniz-Institut im Forschungsverbund Berlin e. V.  
Berlin

**Beantragte Mittel / Budget Request:**

	Beantragt / Requested		
<b>Dauer [Monate] / Duration [Months]</b>	<b>36</b>		
<b>SE 1118/9-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>200.550</b>		
<b>Professor Dr. Ralf Seemann</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>145.100</b>
Doktorandin/Doktorand und Vergleichbare 75 % / Doctoral Researcher or Comparable 75 %	1	36	145.100
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>29.250</b>

Geräte bis 10.000 Euro, Software und Verbrauchsmaterial / Equipment up to EUR 10,000, Software and Consumables			19.500
Publikationen / Publications			2.250
Reisen / Travel			7.500
<b>Investitionsmittel / Instrumentation</b>			<b>26.200</b>
Heizkammersystem mit Temperaturregelung Resultec / Heizkammersystem mit Temperaturregelung Resultec			13.200
Kamerasystem pco.edge 3.1 USB / Kamerasystem pco.edge 3.1 USB			13.000
<b>WA 1653/6-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>160.850</b>		
<b>Professorin Dr. Barbara Agnes Wagner, Ph.D.</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>145.100</b>
Doktorandin/Doktorand und Vergleichbare 75 % / Doctoral Researcher or Comparable 75 %	1	36	145.100
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>15.750</b>
Gäste / Visiting Researchers			6.000
Publikationen / Publications			2.250
Reisen / Travel			7.500
<b>Gesamtsumme / Total</b>	<b>361.400</b>		

**Bewilligungen der letzten vier Jahre zu anderen Projekten (seit 15.10.2014 ) / DFG Project Funding Over the Last Four Years (since 15.10.2014):**

<b>Datum / Date Gz / Ref</b>		<b>Euro</b>
	<b>Professor Dr. Ralf Seemann</b>	<b>845.500</b>
02.11.2017 SE 1118/8-1	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal Gerichtete Benetzungseigenschaften auf mikrostrukturierten Oberflächen / Directional wetting properties of topographically micro-patterned surfaces	200.700
29.11.2016 INST 256/368-2	Sonderforschungsbereich: Einzelantrag / Collaborative Research Centres: Individual Proposal Mikrofluidik-Plattform zum Studium von Transporteigenschaften von Modell-Zellmembranen / Microfluidic Platform to Study the Transport Properties of Model Cell Membranes	644.800

**Zusammenfassung**

Wenn sich eine flüssige Morphologie über ein (visko-)elastisches Substrat bewegt, dann sind die Reibungskräfte in dem Substrat sowohl in dem Gebieten stärkster Verzerrung an der Kontaktlinie als auch an der bewegten Grenzfläche der Schlüssel zum Verständnis der Energiedissipation und der Form des Entnetzungswulsts, und bestimmen letztendlich das charakteristische Muster des Entnetzungsvorgangs. Im Gegensatz zu flüssigen Substraten hat die lokale Verzerrung eines viskoelastischen Substrats immer auch globale Auswirkungen auf den Zustand des Substrats und die darin auftretenden Spannungen können auf Dauer erhalten bleiben. Unser Ziel ist die Entwicklung mathematischer Modelle und numerischer



Algorithmen für Systeme mit zwei Schichten, die die Hydrodynamik und das viskoelastische Randwertproblem mit geeigneten Grenzflächenbedingungen einschließlich der intermolekularen Kräften koppeln, die auf den typischen Entnetzungszeiten relevant werden, um die Entnetzungs- und Wulstformen einfacher Flüssigkeiten von festen, viskoelastischen Substraten bis hin zu weichen Polymergelen vorherzusagen. Für letzteres werden wir neue Effekte wie Entmischung erfassen, indem wir zusätzliche Entropiebeiträge berücksichtigen, zusammen mit der möglicherweise nichtlinearen Elastizität und in Verbindung mit einem Beitrag für die Interaktionsenergie zwischen Polymer und Lösungsmittel zur freien Energie des Polymergels. Ein quantitativer Vergleich mit experimentellen Ergebnissen in Abhängigkeit von systematisch veränderten viskoelastischen Eigenschaften z.B. durch Veränderung der chemischen Zusammensetzung des Silikongummis, für die wir experimentell bestimmte und lokal aufgelöste Materialeigenschaften bestimmen werden, wird uns erlauben, ein detailliertes und grundlegendes Verständnis dieser Prozesse zu erreichen, und Effekte, die immer noch kontrovers in der Literatur diskutiert werden, zu bestätigen oder zu widerlegen. Das betrifft unter anderem die Existenz des sogenannten Shuttleworth Effekts für das betrachtete experimentelle System und das mögliche Entmischen der quervernetzten Elastomermatrix von den unvernetzten Molekülen aus demselben Material.

## Summary

When a liquid morphology moves over a (visco-)elastic substrate friction forces in the substrate both at the point of largest substrate deformation close to the three-phase contact line and at the moving interface are key to understanding energy dissipation and shapes of dewetting rims that eventually result in a characteristic pattern of the dewetting process. Unlike liquid substrates, the local deformation of a solid viscoelastic substrate always has a global impact on the state of the substrate and the resulting strains are permanent. We aim at developing mathematical models and numerical algorithms for two-layer systems that couple the hydrodynamic and viscoelastic boundary value problem with appropriate interface conditions including effects from intermolecular interactions that become relevant at the scales of the dewetting experiments, to predict the dewetting dynamics and rim shapes of simple liquids from solid viscoelastic substrates to very soft polymer gels. For the latter new effects such as demixing will be captured by the introduction of additional entropic contributions to the possibly non-linear elasticity and by adding a mixing free energy to the total free energy of the soft polymer gel. A quantitative comparison with experimental results conducted as functions of systematically varied viscoelastic properties by varying the chemical composition of e.g. silicon rubber, that supply experimentally determined and locally resolved material parameters, shall allow for a detailed and fundamental understanding of those processes and to confirm or to falsify effects that are still discussed highly controversially in literature. Besides others, this concerns existence of the so called Shuttleworth effect for the considered experimental system and the potential demixing of cross-linked elastomer matrix from non-cross linked molecules of the same material.

**Antragstyp** Schwerpunktprogramm - Einzelantrag - Neuantrag

**Type of Proposal** Priority Programme - Individual Proposal - New Proposal

**Antragsdauer / Requested Duration** 36 Monate / 36 months

**Fach** Herstellung und Eigenschaften von Funktionsmaterialien

**Subject Area** Synthesis and Properties of Functional Materials

**Rahmenprojekt / Framework Project** SPP 2171

**Titel** **Verständnis des Benetzungsverhaltens von Formgedächtnispolymeren: Einblicke durch Phasenfeldsimulationen**

**Title** **Understandig the wetting behavior of shape memory polymers: Insights from phase-field simulations**

**Geschäftszeichen / Reference No.** **SE 2842/2-1**

**Antragsteller / Applicant** **Dr.-Ing. Michael Selzer**  
Karlsruher Institut für Technologie  
Campus Süd  
Institut für Angewandte Materialien - Computational Materials Science (IAM-CMS)  
Karlsruhe

**Beantragte Mittel / Budget Request:**

	<b>Beantragt / Requested</b>		
<b>Dauer [Monate] / Duration [Months]</b>	<b>36</b>		
<b>SE 2842/2-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>172.850</b>		
<b>Dr.-Ing. Michael Selzer</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>163.100</b>
Doktorandin/Doktorand und Vergleichbare 75 % / Doctoral Researcher or Comparable 75 %	1	36	145.100
Hilfskräfte / Support Staff			18.000
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>9.750</b>
Publikationen / Publications			2.250
Reisen / Travel			7.500

**Bewilligungen der letzten vier Jahre zu anderen Projekten (seit 15.10.2014 ) / DFG Project Funding Over the Last Four Years (since 15.10.2014):**

Datum / Date Gz / Ref		Euro
	<b>Dr.-Ing. Michael Selzer</b>	<b>131.200</b>
21.12.2017 SE 2842/1-1	Literaturversorgung und Information: E-Research-Technologien / Library Services and Information: E-Research-Technologies Nachhaltiges Lifecycle Management für Forschungssoftware - Softwareverbreitung und Infrastrukturentwicklung anhand einer Simulationssoftware für kardiale Elektrophysiologie (SuLMaSS) / Sustainable Lifecycle Management for Scientific Software (SuLMaSS) - Software Dissemination and Infrastructure Development Driven by a Cardiac Electrophysiology Simulator	131.200

### Zusammenfassung

Die Kopplung einer Flüssigkeit mit einem dynamischen, schaltbaren Substrat ist ein faszinierendes Forschungsthema, da die grundlegende Physik hinter solchen Wechselwirkungen noch lange nicht vollständig verstanden ist. Dies gilt für einfache Flüssigkeiten wie Wasser und auch für Mischungen nicht mischbarer Flüssigkeiten. Daher haben wir uns zum Ziel gesetzt, die Phasenfeldsimulationsmethoden durch experimentelle Ergebnisse zu kalibrieren und dieses Modell zur Vorhersage des Verhaltens verschiedener Konfigurationen von Formgedächtnispolymeren zu verwenden. Dies ermöglicht es, den Parameterraum durch quantitative Simulationsmethoden ohne teure Experimente zu erforschen. Dieses Wissen ist in modernen Geräten mit Mikrofluiden und für die additive Fertigung von entscheidender Bedeutung.

### Summary

The coupling of a liquid with a dynamic, switchable substrate is a fascinating research topic as the fundamental physics behind such interactions are far from being fully understood. This is true for simple liquids like water and as well for mixtures of immiscible liquids. Therefore we aim to calibrate the phase-field simulation methods by experimental results and use that model to predict the behavior of different setups of shape memory polymers. This enables to explore the parameter space by quantitative simulation methods without expensive experiments. This knowledge is of vital importance in modern microfluidic devices and for additive manufacturing.

**Antragstyp** Schwerpunktprogramm - Einzelantrag - Neuantrag

**Type of Proposal** Priority Programme - Individual Proposal - New Proposal

**Antragsdauer / Requested Duration** 36 Monate / 36 months

**Fach** Physikalische Chemie von Molekülen, Flüssigkeiten und Grenzflächen - Spektroskopie, Kinetik

**Subject Area** Physical Chemistry of Molecules, Interfaces and Liquids - Spectroscopy, Kinetics

**Rahmenprojekt / Framework Project** SPP 2171

**Titel** **Intrinsische Analyse der dynamischen Benetzung auf weichen Oberflächen**

**Title** **Intrinsic analysis of dynamic wetting on soft surfaces**

**Geschäftszeichen / Reference No.** **SE 3019/1-1**

**Antragsteller / Applicant** **Dr. Marcello Sega**  
Forschungszentrum Jülich GmbH  
Institut für Energie- und Klimaforschung (IEK)  
Helmholtz-Institut Erlangen-Nürnberg für Erneuerbare Energien (HI ERN)  
Erlangen

**Beantragte Mittel / Budget Request:**

	<b>Beantragt / Requested</b>		
<b>Dauer [Monate] / Duration [Months]</b>	<b>36</b>		
<b>SE 3019/1-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>169.650</b>		
<b>Dr. Marcello Sega</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>145.100</b>
Doktorandin/Doktorand und Vergleichbare 75 % / Doctoral Researcher or Comparable 75 %	1	36	145.100
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>24.550</b>
Gäste / Visiting Researchers			5.300
Geräte bis 10.000 Euro, Software und Verbrauchsmaterial / Equipment up to EUR 10,000, Software and Consumables			2.000
Publikationen / Publications			2.250
Reisen / Travel			15.000

## Zusammenfassung

Oberflächenphänomene sind bemerkenswert, weil sie von extremen Kräften dominiert werden, die direkt an den Grenzflächen lokalisiert sind, in einem räumlichen Bereich, der normalerweise nur wenige (1-3) molekulare Schichten umfasst.

Im Fall von Fluiden oder weichen Materialien wölben jedoch thermisch aktivierte Oberflächenkapillarwellen die Grenzfläche in größeren Maßstäben, was den Versuch vereitelt, ihre Struktur und Dynamik mit molekularer Auflösung durch herkömmliche Analysen atomistischer Simulationstrajektorien zu untersuchen.

Stattdessen wurden in den letzten Jahren erfolgreich intrinsische Analyseansätze eingesetzt, um ohne die störende Schmierwirkung von Kapillarwellen die Struktur von Fluid-Fluid- und Fluid-Gas-Grenzflächen zu analysieren.

In diesem Projekt wird vorgeschlagen, diese Ansätze für ternäre Systeme zu verallgemeinern und auf flüssige Tröpfchen auf weichen Substraten anzuwenden, um so ein klareres Bild der molekularen Struktur und Dynamik nahe der Kontaktlinie im thermodynamischen Gleichgewicht und während des Loslösens des Tropfens (*depinning*) zu erhalten.

In unserem vorgeschlagenen Ansatz werden wir sowohl ein vereinfachtes Modell eines Tropfens auf weichem Substrat als auch ein realistisches Modell atomistischer Auflösung eines Wassertropfens auf der Oberfläche einer Polyelektrolyt-Mehrfachschicht untersuchen. Das Modellsystem wird es uns ermöglichen, einen breiten Parameterbereich zu erfassen, einschließlich unterschiedlicher Arten von gelösten Stoffen, und somit Trends zu untersuchen, mit verfügbaren theoretischen Modellen zu vergleichen und diese Modelle zu erweitern. Das Wasser-Polyelektrolytsystem wird uns andererseits die Möglichkeit geben, Zusammenhänge zwischen mikroskopischen Veränderungen an der Kontaktlinie und den resultierenden makroskopischen Effekten quantitativ zu untersuchen und direkt mit experimentellen Messungen zu vergleichen. Mit diesem Ansatz werden wir das aktuelle Bild der Eigenschaften beweglicher Kontaktlinien zu einer bisher unerreichten Auflösung befördern.

## Summary

Surface phenomena are remarkable because they are dominated by extreme forces localised right at the interfaces, in a spatial domain that usually involves few (1-3) molecular layers.

In case of fluids or soft materials, however, thermally activated surface capillary waves corrugate the interface on larger scales, frustrating the attempt to investigate its structure and dynamics at molecular resolution through conventional analyses of atomistic simulation trajectories.

Intrinsic analysis approaches, instead, by undoing the smearing effect of capillary waves have been used with success in recent years to analyse the structure of liquid/vapour and liquid/liquid interfaces. In this project, we propose to generalise these approaches to ternary systems and apply them to liquid droplets on soft substrates, to obtain a clearer picture of the molecular structure and dynamics close to the contact line at thermodynamic equilibrium, and, during the process of *depinning*. In our proposed approach, we will study both a simplified model of droplet/soft substrate, and, a realistic model at atomistic resolution of a water droplet on the surface of a polyelectrolyte multilayer. The model system will enable us to span a wide range of parameters, including different type of solutes, and, therefore, to investigate trends and to compare with, and extend, available theoretical models. The water/polyelectrolyte system, on the other hand, will give us the opportunity to investigate the link between the microscopic changes at the contact line and the macroscopic effects in a quantitative way, and to compare them directly with experimental measurements. With this approach, we will bring the current picture of the properties of the moving contact line to an unprecedented resolution.

<b>Bemerkung der Geschäftsstelle / Comment by the DFG Head Office</b>	Es liegt ein befristeter Arbeitsvertrag vor, der am 01.07.2020 ausläuft. Eine Weiterbeschäftigung ist beabsichtigt. The applicant's fixed-term contract will expire on 01.07.2020 . A continued employment is intended.
---	--

**Antragstyp** Schwerpunktprogramm - Einzelantrag - Neuantrag

**Type of Proposal** Priority Programme - Individual Proposal - New Proposal

**Antragsdauer / Requested Duration** 36 Monate / 36 months

**Fach** Statistische Physik, Weiche Materie, Biologische Physik, Nichtlineare Dynamik

**Subject Area** Statistical Physics, Soft Matter, Biological Physics, Nonlinear Dynamics

**Rahmenprojekt / Framework Project** SPP 2171

**Titel** **Ensembles sitzender und rutschender Tropfen auf elastischen Medien - Experiment, Simulation und Theory**

**Title** **Ensembles of sitting and sliding drops on elastic media - experiment, simulation and theory**

**Geschäftszeichen / Reference No.** **SN 145/1-1**

**Antragsteller / Applicant** **Professor Dr. Jacobus Snoeijer, Ph.D.**  
Universiteit Twente  
Faculty of Science and Technology  
Enschede  
**Niederlande**

**Geschäftszeichen / Reference No.** **TH 781/12-1**

**Antragsteller / Applicant** **Professor Dr. Uwe Thiele**  
Westfälische Wilhelms-Universität Münster  
Fachbereich 11 - Physik  
Institut für Theoretische Physik  
Münster

**Kooperations-partnerinnen und Kooperations-partner / Cooperation Partners** Dr. Karin John  
LIPhy, Laboratoire interdisciplinaire de Physique  
Grenoble  
Frankreich / France

Professor Dr. Harald Van Brummelen  
Eindhoven University of Technology  
Department of Mechanical Engineering  
Eindhoven  
Niederlande / Netherlands

**Beantragte Mittel / Budget Request:**

	<b>Beantragt / Requested</b>
<b>Dauer [Monate] / Duration [Months]</b>	<b>36</b>

<b>SN 145/1-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>199.630</b>		
<b>Professor Dr. Jacobus Snoeijer, Ph.D. , Niederlande / Netherlands</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>174.800</b>
Postdoktorandin/Postdoktorand und Vergleichbare 100 % / Postdoctoral Researcher or Comparable 100 %	1	30	174.800
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>24.830</b>
Geräte bis 10.000 Euro, Software und Verbrauchsmaterial / Equipment up to EUR 10,000, Software and Consumables			8.400
Publikationen / Publications			2.250
Reisen / Travel			14.180
<b>TH 781/12-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>174.338</b>		
<b>Professor Dr. Uwe Thiele</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>158.108</b>
Doktorandin/Doktorand und Vergleichbare 75 % / Doctoral Researcher or Comparable 75 %	1	36	145.100
Hilfskräfte / Support Staff			13.008
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>16.230</b>
Publikationen / Publications			2.250
Reisen / Travel			13.980
<b>Gesamtsumme / Total</b>	<b>373.968</b>		

**Bewilligungen der letzten vier Jahre zu anderen Projekten (seit 12.10.2014 ) / DFG Project Funding Over the Last Four Years (since 12.10.2014):**

<b>Datum / Date Gz / Ref</b>		<b>Euro</b>
	<b>Professor Dr. Uwe Thiele</b>	<b>300.050</b>
18.12.2017 TH 781/8-1	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal Einbringung von Instabilitäten in großflächige Dünnschichtbeschichtungen mit komplexen Flüssigkeiten / Employing Instabilities in Large Area Thin-Film Coating with Complex Fluids	191.650
03.06.2016 INST 211/621-2	SFB/Transregio: Einzelantrag / CRC/Transregio: Individual Proposal Aufdampfen von Molekülen auf vorstrukturierte Substrate - von mikroskopischen zu mesoskopischen Modellen / Vapour deposition of molecules on pre-structured substrates - from microscopic to mesoscopic models	108.400

**Zusammenfassung**      Tröpfchen auf weichen elastischen Substraten sind ein paradigmatisches Beispiel für adaptive Benetzung, bei der Kapillaritäts-induzierte elastische Verformungen die Benetzungseigenschaften erheblich beeinflussen.



Jüngste Arbeiten haben gezeigt, dass Substrate aus vernetzten Polymeren vielseitige Möglichkeiten bieten, Kontaktwinkel von Tröpfchen sowie deren Verteilung, gerichtete Bewegung, Kondensation und Aufprall zu manipulieren. Man hat lediglich begonnen, die volle Vielfalt dieser Phänomene zu erforschen, und derzeit gibt es noch nicht einmal ein vollständig quantitatives Verständnis des Verhaltens einzelner Tropfen - geschweige denn von Ensembles von Tropfen. Die größten Herausforderungen liegen dabei einerseits in den komplizierten Effekten der Oberflächenspannung elastischer Festkörper und wie sich diese auf das Kräftegleichgewicht in der Nähe der Kontaktlinie auswirken. Andererseits wird die Dynamik von der Viskoelastizität des Substrats und den elastokapillaren Wechselwirkungen zwischen den Tröpfchen bestimmt.

Ziel dieses Projekts ist die Entwicklung und Nutzung von Versuchsaufbauten, detaillierten direkten numerischen Simulationen, effektiven Langwellenmodellen und einer statistischen Beschreibung vom Smoluchowski-typ zur Untersuchung des Verhaltens von Tropfen einfacher nichtflüchtiger und flüchtiger Flüssigkeiten auf flexiblen Substraten. Der erste Teil des Projekts konzentriert sich auf einzelne Tropfen. Wir wollen über die bisherigen Ansätze hinausgehen, die fast ausschließlich auf linearer Elastizität basieren, und detaillierte Simulationen entwickeln, die die Mechanik großer Verformungen in der Nähe der Kontaktlinie zugänglich machen. Ziel ist eine vollständige quantitative first-principle Beschreibung des Benetzungsverhaltens einzelner Tropfen. Dies wird die Grundlage für den zweiten Teil des Projekts bilden, in dem wir das kollektive Verhalten von Tropfenensembles auf weichen Substraten untersuchen. Experimente an Ensembles, die durch eine externe Triebkraft oder Verdunstungs/Kondensation angetrieben werden, werden durch einen multiskaligen Modellierungsansatz ergänzt, bei dem wir die Dynamik mit verschiedenen Graden an Detail auflösen. Wir entwickeln effektive Langwellenmodelle, die aus den experimentellen und vollständigen Simulationsergebnissen für einzelne Tropfen kalibriert werden, was den Weg für die Simulation einer großen Anzahl von Tropfen und schließlich für die statistische Modellierung von Tropfenensembles öffnet.

Die konsequente Kombination von Experiment, Simulation und Theorie bietet einen multiskaligen Rahmen, der qualitative und quantitative Erkenntnisse zur Benetzung flexibler Substrate liefert. Dies wird das Zusammenspiel von Tropfen- und Substratdynamik sowie die resultierenden Gesetze des Rutschens, der Haft-Rutsch-Bewegung (stick-slip) und der Koaleszenz einzelner Tropfen und ihres kollektiven Ensembleverhaltens zugänglich machen.

## Summary

Droplets on soft elastic substrates are a paradigmatic example of adaptive wetting, where capillarity-induced elastic deformations dramatically affect the wetting properties. Recent work has shown that substrates made from cross-linked polymer networks offer versatile routes to manipulate contact angles of droplets, as well as their spreading, directed motion, condensation and splashing. However, the full richness of these phenomena is only beginning to be explored and at present there is even no fully quantitative understanding of the behaviour of single drops -- let alone ensembles of drops. Key challenges lie in the intricate effects of solid surface tension, and how this affects the force balance near the contact line, while dynamics involves viscoelasticity of the substrate and elastocapillary interactions between droplets.

This project aims at developing and utilising experimental setups, detailed direct numerical simulations, effective long-wave models and a Smoluchowski-type statistical description to investigate the behaviour of drops of simple nonvolatile and volatile liquids on flexible substrates. The

first part of the project focusses on single drops. We wish to go beyond the current approaches that are almost exclusively based on linear elasticity, and develop detailed simulations that reveal the large-deformation mechanics near the contact line. The goal is a first-principles fully quantitative description of the wetting behaviour of single drops. This will form the basis for the second part of the project, where we will investigate the collective behaviour of ensembles of drops on soft substrates. Experiments on droplet ensembles, driven by external forcing or evaporation-condensation, will be complemented by a multi-scale modelling approach where we resolve the dynamics on different levels of detail. We develop effective long-wave models that are calibrated from the experimental and full simulation results for single drops, which opens the way for simulations of a large number of droplets, and ultimately for statistical modelling of drop ensembles.

The consistent combination of experiment, simulation and theory offers a multi-scale framework that provides qualitative and quantitative insights into the wetting of flexible substrates. It will reveal the interplay of drop and substrate dynamics, and the emergent laws of sliding, stick-slip motion and coalescence of individual drops and their collective ensemble behaviour.

**Antragstyp** Schwerpunktprogramm - Einzelantrag - Neuantrag

**Type of Proposal** Priority Programme - Individual Proposal - New Proposal

**Antragsdauer / Requested Duration** 36 Monate / 36 months

**Fach** Statistische Physik, Weiche Materie, Biologische Physik, Nichtlineare Dynamik

**Subject Area** Statistical Physics, Soft Matter, Biological Physics, Nonlinear Dynamics

**Rahmenprojekt / Framework Project** SPP 2171

**Titel** **Benetzung von schaltbaren Oberflächen: Eine Molekulardynamik-Studie**

**Title** **Wetting of switchable solid substrates: A molecular dynamics study**

**Geschäftszeichen / Reference No.** **SP 1382/7-1**

**Antragsteller / Applicant** **Professor Dr. Thomas Speck**  
Johannes Gutenberg-Universität Mainz  
Fachbereich Physik, Mathematik und Informatik  
Institut für Physik  
Mainz

**Geschäftszeichen / Reference No.** **VI 237/7-1**

**Antragsteller / Applicant** **Dr. Peter Virnau**  
Johannes Gutenberg-Universität Mainz  
Fachbereich Physik, Mathematik und Informatik  
Institut für Physik  
Mainz

**Beantragte Mittel / Budget Request:**

	Beantragt / Requested		
<b>Dauer [Monate] / Duration [Months]</b>	<b>36</b>		
<b>SP 1382/7-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>79.975</b>		
<b>Professor Dr. Thomas Speck</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>72.600</b>
Doktorandin/Doktorand und Vergleichbare 75 % / Doctoral Researcher or Comparable 75 %	1	18	72.600
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>7.375</b>

Geräte bis 10.000 Euro, Software und Verbrauchsmaterial / Equipment up to EUR 10,000, Software and Consumables			250
Publikationen / Publications			1.125
Reisen / Travel			6.000
<b>VI 237/7-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>88.175</b>		
<b>Dr. Peter Virnau</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>72.600</b>
Doktorandin/Doktorand und Vergleichbare 75 % / Doctoral Researcher or Comparable 75 %	1	18	72.600
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>15.575</b>
Gäste / Visiting Researchers			7.200
Geräte bis 10.000 Euro, Software und Verbrauchsmaterial / Equipment up to EUR 10,000, Software and Consumables			1.250
Publikationen / Publications			1.125
Reisen / Travel			6.000
<b>Gesamtsumme / Total</b>	<b>168.150</b>		

**Bewilligungen der letzten vier Jahre zu anderen Projekten (seit 12.10.2014 ) /  
DFG Project Funding Over the Last Four Years (since 12.10.2014):**

<b>Datum / Date Gz / Ref</b>		<b>Euro</b>
	<b>Professor Dr. Thomas Speck</b>	<b>1.102.150</b>
23.05.2018 INST 247/918-1	SFB/Transregio: Einzelantrag / CRC/Transregio: Individual Proposal Dichte aktive Lösungen im chaotischen Bereich / Dense active suspensions in the chaotic regime	577.300
23.05.2018 INST 247/781-2	SFB/Transregio: Einzelantrag / CRC/Transregio: Individual Proposal Dynamische Vergrößerungsansätze für stationäre Nichtgleichgewichtszustände mit stochastischer Dynamik / Dynamical coarse-graining for non-equilibrium steady states with stochastic dynamics	236.000
21.04.2017 SP 1382/3-2	Schwerpunktprogramm: Einzelantrag / Priority Programmes: Individual Proposal Dynamische Aggregation selbstgetriebener kolloidaler Teilchen / Dynamical aggregation of self-propelled colloidal particles	101.300
24.05.2016 SP 1382/5-1	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal Bestimmung und Kontrolle von (meta-)stabilen Nichtgleichgewichts-Morphologien / Prediction and control of non-equilibrium (meta-)stable morphologies	187.550
	<b>Dr. Peter Virnau</b>	<b>917.350</b>
02.10.2018 VI 237/6-2	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal Phasenverhalten und Struktur von semiflexiblen Polymeren in kugelförmiger endlicher Geometrie / Phase behavior and structure of semiflexible polymers in spherical confinement	2.750
23.05.2018	SFB/Transregio: Einzelantrag / CRC/Transregio: Individual Proposal	577.300

Datum / Date Gz / Ref		Euro
INST 247/790-2	Hybride adaptive Multiskalenmethoden für Fluide der weichen Materie / Adaptive hybrid multiscale simulations of soft matter fluids	
23.05.2018 INST 247/916-1	SFB/Transregio: Einzelantrag / CRC/Transregio: Individual Proposal Dynamisch konsistente vergrößerte Modelle / Topological validation of coarse-grained polymer models	236.000
21.04.2017 VI 237/5-2	Schwerpunktprogramm: Einzelantrag / Priority Programmes: Individual Proposal Dynamische Aggregation selbstgetriebener kolloidaler Teilchen / Dynamical aggregation of self-propelled colloidal particles	101.300

## Zusammenfassung

Wird eine Flüssigkeit durch Oberflächen (oder auch Grenzflächen) beschränkt, so beeinflusst das ihre Eigenschaften und induziert strukturelle Kräfte die zur einer Benetzung führen können. Diese Kräfte hängen von den physikalischen und chemischen Eigenschaften der Oberfläche ab und können z.B. durch die Beschichtung mit Polymerbürsten beeinflusst werden. Eine äußere Änderung dieser Eigenschaften führt zu einer Änderung der Benetzbarkeit der Oberfläche und damit zu einer dynamischen Antwort der Flüssigkeit. Ein besseres theoretisches Verständnis der daraus resultierenden Besetzungsdynamik ist nicht nur wichtig für unser fundamentales Verständnis sondern auch für zukünftige Entwicklungen, z.B. von neuartigen adaptiven Materialien. Ziel dieses Projektes ist die numerische Untersuchung eines minimalen Modells einer asymmetrischen binären Mischung im Kontakt mit einer flachen Oberfläche. Die Wechselwirkungen mit der Oberfläche sind bestimmt durch einen einzelnen Längenparameter, durch welchen der statische Kontaktwinkel beliebig eingestellt werden kann über den gesamten Bereich von entnetzt bis vollständig benetzt. Mit Hilfe dieses generischen Modells werden wir die Be- und Entnetzungsdynamik untersuchen für: die plötzliche Änderung des statischen Kontaktwinkels, die zeitliche Entwicklung der Benetzungsmorphologie, die Kontaktwinkelhysterese unter einem periodischen Protokoll, und den Aufschlag eines Tropfens auf einer Oberfläche. Zusätzlich zu diesen Molekulardynamik-Simulationen werden wir Freie Energie-Berechnungen der Grenzflächenspannung und des Bindepotentials durchführen. Diese werden benötigt für die Kontinuumsbeschreibung und erlauben so einen detaillierten Vergleich mit den mikroskopischen Vorhersagen aus den teilchenbasierten Simulationen.

## Summary

Confining a liquid through surfaces (or interfaces) alters its bulk properties and induces structural forces that underlie wetting. These forces depend crucially on the chemical and physical properties of the surface, which can be tuned through, e.g., coatings such as polymer brushes. Changing these properties externally leads to a change of the surface's wettability and induces a dynamic response of the liquid. A better theoretical understanding of such wetting dynamics is not only interesting from a fundamental physics perspective but also a prerequisite for the development of novel responsive materials. Here we propose to study through numerical simulations a minimal model for an asymmetric binary mixture in contact with a flat surface. The interactions with the wall are determined by a single length, which can be used to tune the contact angle over the full range from completely wet to completely dry. Using this generic model, we will study the dynamics of wetting/dewetting after a sudden change of the control parameter, the evolution of the morphology of a dewetting film, contact angle hysteresis for a periodic protocol, and the impact of a droplet falling on a

surface. In addition to these molecular dynamics simulations of the wetting dynamics we will perform static free energy calculations of the interfacial tension and binding potential. These are passed as input to coarse-grained continuum descriptions like the thin-film equation, which we will compare in detail to the microscopic results and available experimental data.

**Antragstyp** Schwerpunktprogramm - Einzelantrag - Neuantrag

**Type of Proposal** Priority Programme - Individual Proposal - New Proposal

**Antragsdauer / Requested Duration** 36 Monate / 36 months

**Fach** Statistische Physik, Weiche Materie, Biologische Physik, Nichtlineare Dynamik

**Subject Area** Statistical Physics, Soft Matter, Biological Physics, Nonlinear Dynamics

**Rahmenprojekt / Framework Project** SPP 2171

**Titel** Kontrolle dynamischer Benetzung auf photo-schaltbaren Substraten

**Title** Control of Dynamic Wetting on Photo-Switchable Substrates

**Geschäftszeichen / Reference No.** STA 352/12-1

**Antragsteller / Applicant** Professor Dr. Holger Stark  
Technische Universität Berlin  
Institut für Theoretische Physik  
Berlin

**Beantragte Mittel / Budget Request:**

	Beantragt / Requested		
<b>Dauer [Monate] / Duration [Months]</b>	<b>36</b>		
<b>STA 352/12-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>161.250</b>		
<b>Professor Dr. Holger Stark</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>145.100</b>
Doktorandin/Doktorand und Vergleichbare 75 % / Doctoral Researcher or Comparable 75 %	1	36	145.100
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>16.150</b>
Publikationen / Publications			2.250
Reisen / Travel			13.900

**Bewilligungen der letzten vier Jahre zu anderen Projekten (seit 14.10.2014 ) / DFG Project Funding Over the Last Four Years (since 14.10.2014):**

<b>Datum / Date Gz / Ref</b>		<b>Euro</b>
	<b>Professor Dr. Holger Stark</b>	<b>644.250</b>
21.04.2017	Schwerpunktprogramm: Einzelantrag / Priority Programmes: Individual	193.450

Datum / Date Gz / Ref		Euro
STA 352/11-2	Proposal Wie Hydrodynamik die kollektive Bewegung von Mikroschwimmern beeinflusst: Eine teilchenbasierte Simulationsstudie / How hydrodynamics influences the collective motion of microswimmers: A particle-based simulation study	
25.11.2014 INST 131/594-2	Sonderforschungsbereich: Einzelantrag / Collaborative Research Centres: Individual Proposal Kontrolle von Strömungsmustern in komplexen Fluiden auf der Mikroskala / Control of flow patterns in complex fluids on the micron scale	450.800

## Zusammenfassung

Dynamische Benetzung beschreibt eine Reihe von Nichtgleichgewichts-Phänomenen, bei denen Flüssigkeiten mit Substraten wechselwirken. Sie umfasst unterschiedliche Systeme, wie durch Vibrationen getriebene Tropfen, Flüssigkeiten auf heißen Substraten und durch Licht induzierte Veränderungen in der Benetzbarkeit. Insbesondere photo-schaltbare Substrate ermöglichen einen attraktiven und einzigartigen Zugang, um raumzeitliche Benetzbarkeitssmuster zu erzeugen. Sie können verwendet werden, um Flüssigkeitstropfen zu manipulieren und dadurch neuartige Zustände dynamischer Benetzung zu induzieren.

Im Projekt werden wir ein Computerprogramm entwickeln, das die Randelementmethode implementiert, um die Stokes Gleichungen für den hydrodynamischen Fluss in einem Flüssigkeitstropfen zu lösen einschließlich der entsprechenden Randbedingungen. Dadurch können wir die Bewegung von Tropfen unter dem Einfluss raumzeitlicher Benetzbarkeitssmuster vorhersagen. Das Programm stellt uns auch ein vielseitiges Hilfsmittel zur Verfügung, um experimentelle Projekte im Schwerpunktprogramm zu unterstützen. Im Projekt werden wir zuerst studieren, wie laufende Muster Tropfen bewegen und wie oszillierende und rotierende Muster sie deformieren, wobei wir Bedingungen wie Wellenamplitude, Tropfengröße und Materialparameter variieren. Insbesondere wollen wir Muster identifizieren, die optimalen Transport, also maximale Tropfengeschwindigkeit, bewirken oder Übergänge im internen Strömungsfeld erzeugen, indem zum Beispiel zwischen einer unterschiedlichen Anzahl von Wirbeln geschaltet wird. Wir untersuchen dann den zusätzlichen Einfluss von Verdampfung und Kondensation der Tropfen, also Vorgänge die in der Anwendung für Drucker und Klimaanlage wichtig sind, wie auch die Auswirkung von äußeren Kräften und ihr Zusammenwirken mit Gradienten in der Oberflächenrauigkeit. In unseren Untersuchungen kommen auch realistische Materialparameter unserer experimentellen Partner zur Anwendung.

Unsere Ergebnisse ermöglichen uns, ein klares Verständnis für die interne Strömungsdynamik zu entwickeln, die die Tropfenbewegung bestimmt. Letztendlich werden wir damit auch die Grundlage legen, um technologische Prozesse zum Drucken, Kühlen und zur Entfeuchtung zu verbessern.

## Summary

Dynamic wetting describes a range of non-equilibrium phenomena for liquids interacting with substrates. This includes diverse systems such as vibration-driven droplets, fluids on hot substrates, and light-induced changes in wettability. Especially, photo-switchable substrates provide an attractive and unique approach to generate spatio-temporal wettability patterns. They can be used to manipulate liquid droplets and thereby induce novel states of dynamic wetting.



In the project we will develop a computer program, which implements the boundary element method to solve the Stokes equations for the hydrodynamic flow within a liquid droplet including appropriate boundary conditions. This will enable us to predict droplet motion under various spatio-temporal wettability patterns. The program will also provide a versatile tool to support experimental projects within the priority program. First, we will study how travelling patterns move droplets around and how oscillating and rotating patterns deform them under varying conditions, including wave amplitude, droplet size, and material parameters. Especially, we seek for patterns, which induce optimal transport, i.e. maximum droplet speed, and generate transitions in the internal flow field by switching, for example between different numbers of vortices. We will then explore the additional influence of droplet evaporation and condensation, which govern printing and cooling devices, as well as the impact of external forces and their interplay with gradients in surface roughness. For our studies, we will also use realistic material parameters provided by our experimental partners.

Our findings will help to develop a clear understanding of the internal flow dynamics, which governs droplet motion, and ultimately also lay the foundation for improving technologies for printing, cooling, and dehumidification.

**Antragstyp** Schwerpunktprogramm - Einzelantrag - Neuantrag

**Type of Proposal** Priority Programme - Individual Proposal - New Proposal

**Antragsdauer / Requested Duration** 36 Monate / 36 months

**Fach** Experimentelle und Theoretische Polymerphysik

**Subject Area** Experimental and Theoretical Physics of Polymers

**Rahmenprojekt / Framework Project** SPP 2171

**Titel** **Dynamik der Benetzung auf schaltbaren und adaptiven Oberflächen, basierend auf frei rotierenden Janus-Partikeln**

**Title** **Dynamics of Wetting on Switchable and Adaptive Surfaces Based on Freely-Rotating Janus Particles**

**Geschäftszeichen / Reference No.** **SY 125/9-1**

**Antragstellerin / Applicant** **Dr. Alla Synytska**  
Leibniz-Institut für Polymerforschung Dresden e.V. (IPF)  
Dresden

**Kooperations-partnerinnen und Kooperations-partner / Cooperation Partners**  
Dr. Rüdiger Berger  
Max-Planck-Institut für Polymerforschung  
Mainz  
  
Professor Dr. Jens Harting  
Forschungszentrum Jülich GmbH  
Helmholtz-Institut Erlangen-Nürnberg (HI ERN)  
Abteilung RU-C: Dynamics of complex fluids and interfaces  
Nürnberg  
  
Professor Dr. Andreas Heuer  
Westfälische Wilhelms-Universität Münster  
Institut für Physikalische Chemie  
Münster

**Beantragte Mittel / Budget Request:**

	Beantragt / Requested		
<b>Dauer [Monate] / Duration [Months]</b>	<b>36</b>		
<b>SY 125/9-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>203.750</b>		
<b>Dr. Alla Synytska</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>163.100</b>

Doktorandin/Doktorand und Vergleichbare 75 % / Doctoral Researcher or Comparable 75 %	1	36	145.100
Hilfskräfte / Support Staff			18.000
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>40.650</b>
Geräte bis 10.000 Euro, Software und Verbrauchsmaterial / Equipment up to EUR 10,000, Software and Consumables			30.000
Publikationen / Publications			2.250
Reisen / Travel			8.400

**Bewilligungen der letzten vier Jahre zu anderen Projekten (seit 12.10.2014 ) / DFG Project Funding Over the Last Four Years (since 12.10.2014):**

Datum / Date Gz / Ref		Euro
	<b>Dr. Alla Synytska</b>	<b>487.698</b>
02.09.2015 BE 2601/4-1	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal Grundlagen der gezielten Gestaltung des Verbundes zwischen hochmoduligen Polymerfasern und zementbasierten Matrices / Basis for the purposeful design of the bond between high-modulus polymer fibres and cement-based matrices	209.398
02.03.2015 IO 68/1-3	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal 3D Bio-Strukturierung mithilfe der selbst-faltenden Polymerschichten / 3D Bio-Patterning Using Self-folding Polymer Films	278.300

**Zusammenfassung**

Innerhalb des beantragten Projektes zielen wir auf die experimentelle Untersuchung und Korrelation der zeitabhängigen Reorientierung, Selbstorganisation und dem Schaltungsverhalten individueller Janus-Partikel (JPs), sowie ausgebildeter Janus-Partikel Strukturen bei schmelzbaren Wachs-Luft/ schmelzbaren Wachs-Wasser Grenzflächen mit ungleichgewichtiger Benetzungsreaktion ab.

Es existieren drei bemerkenswerte Eigenschaften bei Janus-Partikeln, die sie besonders geeignet machen für das Design von schaltbaren Oberflächen: (i) sie kombinieren sowohl hydrophile als auch hydrophobe Teile, (ii) sie sind in der Lage an Grenzflächen zu segregieren und (iii) an Grenzflächen zu rotieren. Wir wollen unsere Hypothese beweisen, dass Janus-Partikel in der Lage sein werden an schmelzbaren Wachs/Wasser und schmelzbaren Wachs/Luft Grenzflächen zu rotieren, als auch, dass die Kinetik ihrer Rotation und die Schaltung, Einfluss auf die Verteilungsdynamik von Wassertropfen auf diesen Oberflächen hat. Die Schaltungsverfahren und die daraus resultierende Benetzungsdynamik werden ebenfalls von der Form und Anisotropie (kugelförmig, stäbchenförmig), dem Janus Gleichgewicht (Kontrast von hydrophil zu hydrophob sowie dem Verhältnis auf den einzelnen JP) und der Größe (sub- $\mu\text{m}$  und  $\mu\text{m}$ ) der JP abhängig sein.

Die zentrale Herausforderung des Projektes besteht darin, die Korrelation zwischen dem lokalen Benetzungsverhalten einzelner Janus-Partikel an Öl/Wasser Grenzflächen und dem kumulativen Effekt mehrerer Janus-Partikel Schichten auf die dynamische Benetzung, nachzuvollziehen. Wir werden uns mit den wichtigsten Untersuchungsfragen befassen: (i) dem Einfluss der Oberflächenstruktur und Anisotropie auf die Dynamik der Benetzung, (ii) dem Zusammenhang von Schaltbarkeit, Benetzungsdynamik und Reversibilität der Übergänge, ausgelöst durch

Oberflächenspannung/Magnetfeld, ebenso wie (iii) dem quantitativen Vergleich und Korrelation zwischen experimentellen Ergebnissen zusammen mit numerischen Vorhersagen (in Zusammenarbeit im Rahmen vom SPP).

## Summary

Within the proposed project, we aim at experimental investigation and correlation of the time-depending reorientation, self-organization and switching behavior of individual Janus particles (JPs) and formed Janus-particle structures at fusible wax-air/fusible wax-water interfaces with a non-equilibrium wetting response.

There are three remarkable properties of Janus particles, which make them particularly suitable for design of switchable surfaces: (i) they combine hydrophilic and hydrophobic parts, (ii) they are able to segregate at interfaces and (iii) they are able to rotate at interfaces. We aim to prove our hypothesis that Janus particles will be able to rotate at fusible wax/water and fusible wax/air interfaces and the kinetics of their rotation and switching will affect the water droplet spreading dynamics on these surfaces. The switching protocols and resulted wetting dynamics will also depend on the JP form and anisotropy (spherical, rods), Janus balance (hydrophilic/hydrophobic contrast and ratio on the individual JPs) and size (sub- $\mu\text{m}$  and  $\mu\text{m}$ ).

The main challenge of the project is to understand correlation between the local wetting behavior of individual Janus particles at oil/water interfaces and cumulative effect of multiple Janus particle layers on macroscopic dynamic wetting. We will address the main key research questions: (i) influence of surface structure & anisotropy on dynamics of wettability; (ii) relation between switching, wetting dynamics and reversibility of the transitions induced by surface tension/magnetic field, as well as (iii) quantitative comparison and correlation between experimental results with numerical predictions (in collaboration within SPP).

**Antragstyp** Schwerpunktprogramm - Koordinationsantrag - Neuantrag

**Type of Proposal** Priority Programme - Coordination Proposal - New Proposal

**Antragsdauer / Requested Duration** 36 Monate / 36 months

**Fach** Statistische Physik, Weiche Materie, Biologische Physik, Nichtlineare Dynamik

**Subject Area** Statistical Physics, Soft Matter, Biological Physics, Nonlinear Dynamics

**Rahmenprojekt / Framework Project** SPP 2171

**Titel** **Koordinationsfonds**

**Title** **Coordination Funds**

**Geschäftszeichen / Reference No.** TH 781/11-1

**Antragsteller / Applicant** **Professor Dr. Uwe Thiele**  
Westfälische Wilhelms-Universität Münster  
Fachbereich 11 - Physik  
Institut für Theoretische Physik  
Münster

**Beantragte Mittel / Budget Request:**

	Beantragt / Requested		
<b>Dauer [Monate] / Duration [Months]</b>	<b>36</b>		
<b>TH 781/11-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>527.038</b>		
<b>Professor Dr. Uwe Thiele</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>277.624</b>
Postdoktorandin/Postdoktorand und Vergleichbare 50 % / Postdoctoral Researcher or Comparable 50 %	2	36	209.800
Nichtwiss. Mitarbeiterin/Mitarbeiter 20 % / Non-Academic Staff Member 20 %	1	36	28.800
Hilfskräfte / Support Staff			39.024
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>105.760</b>
Gäste / Visiting Researchers			45.000
Reisen / Travel			60.760
<b>Globale Mittel / Global Funds</b>			<b>143.654</b>
Anschubfinanzierung / Start-up Funding			27.900
Chancengleichheitsmaßnahmen / Gender Equality			33.404

Measures			
Koordinierung / Coordination Funding			6.260
Öffentlichkeitsarbeit / Public Relations			5.700
Projektspezifische Workshops / Project-Specific Workshops			70.390

**Bewilligungen der letzten vier Jahre zu anderen Projekten (seit 12.10.2014 ) /  
DFG Project Funding Over the Last Four Years (since 12.10.2014):**

Datum / Date Gz / Ref		Euro
	<b>Professor Dr. Uwe Thiele</b>	<b>300.050</b>
18.12.2017 TH 781/8-1	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal Einbringung von Instabilitäten in großflächige Dünnschichtbeschichtungen mit komplexen Flüssigkeiten / Employing Instabilities in Large Area Thin-Film Coating with Complex Fluids	191.650
03.06.2016 INST 211/621-2	SFB/Transregio: Einzelantrag / CRC/Transregio: Individual Proposal Aufdampfen von Molekülen auf vorstrukturierte Substrate - von mikroskopischen zu mesoskopischen Modellen / Vapour deposition of molecules on pre-structured substrates - from microscopic to mesoscopic models	108.400

**Antragstyp** Schwerpunktprogramm - Einzelantrag - Neuantrag

**Type of Proposal** Priority Programme - Individual Proposal - New Proposal

**Antragsdauer / Requested Duration** 36 Monate / 36 months

**Fach** Theoretische Physik der kondensierten Materie

**Subject Area** Theoretical Condensed Matter Physics

**Rahmenprojekt / Framework Project** SPP 2171

**Titel** **Mesoskopische Gradientendynamikmodelle für die Be- und Entnetzungsdynamik auf adaptiven Substraten**

**Title** **Mesoscopic gradient dynamics models for the (de)wetting dynamics on adaptive substrates**

**Geschäftszeichen / Reference No.** TH 781/13-1

**Antragsteller / Applicant** **Professor Dr. Uwe Thiele**  
Westfälische Wilhelms-Universität Münster  
Fachbereich 11 - Physik  
Institut für Theoretische Physik  
Münster

**Kooperations-partnerinnen und Kooperations-partner / Cooperation Partners** Professor Dr. Andrew Archer, Ph.D.  
Department of Mathematical Sciences  
Leicestershire  
Großbritannien / United Kingdom

**Beantragte Mittel / Budget Request:**

	Beantragt / Requested		
<b>Dauer [Monate] / Duration [Months]</b>	<b>36</b>		
TH 781/13-1			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>175.838</b>		
<b>Professor Dr. Uwe Thiele</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>158.108</b>
Doktorandin/Doktorand und Vergleichbare 75 % / Doctoral Researcher or Comparable 75 %	1	36	145.100
Hilfskräfte / Support Staff			13.008
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>17.730</b>
Publikationen / Publications			2.250

Reisen / Travel			15.480
-----------------	--	--	--------

**Bewilligungen der letzten vier Jahre zu anderen Projekten (seit 12.10.2014 ) /  
DFG Project Funding Over the Last Four Years (since 12.10.2014):**

Datum / Date Gz / Ref		Euro
	<b>Professor Dr. Uwe Thiele</b>	<b>300.050</b>
18.12.2017 TH 781/8-1	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal Einbringung von Instabilitäten in großflächige Dünnschichtbeschichtungen mit komplexen Flüssigkeiten / Employing Instabilities in Large Area Thin-Film Coating with Complex Fluids	191.650
03.06.2016 INST 211/621-2	SFB/Transregio: Einzelantrag / CRC/Transregio: Individual Proposal Aufdampfen von Molekülen auf vorstrukturierte Substrate - von mikroskopischen zu mesoskopischen Modellen / Vapour deposition of molecules on pre-structured substrates - from microscopic to mesoscopic models	108.400

**Zusammenfassung**

Ziel dieses Projekts ist die Entwicklung und Anwendung einer Reihe von generischen mesoskopischen Kontinuumsmodellen für die Be- und Entnetzungs-dynamik auf Substraten mit adaptiver Benetzbarkeit und Topographie. Jüngst entwickelte Dünnschicht-Gradientendynamikmodelle für Mischungen einfacher Flüssigkeiten und für verdünnte Lösungen und Suspensionen beschreiben deren Kapillaritäts- und Benetzbarkeits-dominierte Be- und Entnetzungs-dynamik auf inerten Substraten. Hier werden diese Modelle mit Gleichungen kombiniert, die die Dynamik wesentlicher Freiheitsgrade adaptiver Substrate beschreiben und damit reversible dynamische Prozesse modellieren, die die Benetzbarkeit und Topographie des Substrats auf Zeitskalen verändern, die mit denen der Flüssigkeit vergleichbar sind.

Beispiele für solche Substrat-Freiheitsgrade sind die Menge an adsorbiertem Tensid auf einem festen Substrat, der Quellgrad einer auf das Substrat aufgetragenen Polymerbürste oder der Füllungsgrad eines porösen Substrats. Für jeden dieser Fälle sind bestimmte Energiefunktionen zu entwickeln und in die allgemeine entwickelte Gradientendynamik einzubringen, um gekoppelte Evolutionsgleichungen für Tropfenprofil, innere Freiheitsgrade der Flüssigkeit und innere Freiheitsgrade des Substrats zu erhalten. Dieses Herangehen liefert automatisch alle relevanten Kreuzkopplungen zwischen den verschiedenen wirkenden Kräften und Strömungen und kann darüber hinaus über den Grenzfall flacher Tropfen hinaus erweitert werden.

Die resultierenden generischen Modelle werden an spezifische experimentelle Systeme angepasst und mit Hilfe großskaliger Zeitsimulationen und Pfadkontinuierungstechniken sowie analytischen Ansätzen mit Fokus auf den Bereich der sich bewegenden drei-Phasen Kontaktlinie untersucht, die weitgehend die dynamischen Be- und Entnetzungsprozesse mit gekoppelter Flüssigkeits- und Substratdynamik bestimmt.

**Summary**

This project aims at developing and employing a set of generic mesoscopic continuum models for the (de)wetting dynamics on substrates with adaptive wettability and topography. Recently developed thin-film gradient dynamics models for mixtures of simple liquids and dilute solutions and suspensions describe their capillarity- and wettability-dominated (de)wetting dynamics on inert substrates. Here, models are developed that combine these thin-film (or



shallow-drop) models with equations describing the dynamics of essential degrees of freedom of the substrate. The latter equations model reversible dynamical processes that change wettability and topography on timescales comparable to the ones of the liquid.

Examples of such substrate degrees of freedom are the amount of physisorbed surfactant at a solid substrate, the swelling grade of a polymeric brush crafted to the substrate or the filling ratio of a porous substrate. For each of these cases, particular energy functionals shall be developed and be introduced into the gradient dynamics framework to directly obtain coupled evolution equations for film height, inner degree(s) of freedom of the liquid and inner degree(s) of freedom of the substrate. The framework automatically gives all relevant cross-couplings between the different acting forces and fluxes and, furthermore, can be extended beyond the shallow drop limit.

The resulting generic models are adapted to particular experimental systems and studied employing large-scale time simulations and path continuation techniques as well as analytical approaches with a focus on the region of the moving three-phase contact line that largely determines the dynamic (de)wetting processes with coupled liquid and substrate dynamics.

**Antragstyp** Schwerpunktprogramm - Einzelantrag - Neuantrag

**Type of Proposal** Priority Programme - Individual Proposal - New Proposal

**Antragsdauer / Requested Duration** 36 Monate / 36 months

**Fach** Mathematik

**Subject Area** Mathematics

**Rahmenprojekt / Framework Project** SPP 2171

**Titel** Ein generelles Phasenfeldframework für Be- und Entnetzung

**Title** A general phase-field framework for (de)wetting

**Geschäftszeichen / Reference No.** VO 899/25-1

**Antragsteller / Applicant** Professor Dr. Axel Voigt  
Technische Universität Dresden  
Institut für Wissenschaftliches Rechnen  
Lehrstuhl für Wissenschaftliches Rechnen  
und Angewandte Mathematik  
Dresden

**Beantragte Mittel / Budget Request:**

	Beantragt / Requested		
<b>Dauer [Monate] / Duration [Months]</b>	<b>36</b>		
<b>VO 899/25-1</b>			
<b>Summe / Total [Euro]</b>	<b>225.150</b>		
<b>Professor Dr. Axel Voigt</b>			
	<b>Anz. / No.</b>	<b>Dauer / Duration</b>	<b>Euro</b>
<b>Personalmittel / Funding for Staff</b>			<b>209.700</b>
Postdoktorandin/Postdoktorand und Vergleichbare 100 % / Postdoctoral Researcher or Comparable 100 %	1	36	209.700
<b>Sachmittel / Direct Project Costs</b>			<b>15.450</b>
Gäste / Visiting Researchers			3.000
Publikationen / Publications			2.250
Reisen / Travel			10.200

**Bewilligungen der letzten vier Jahre zu anderen Projekten (seit 04.10.2014 ) /  
 DFG Project Funding Over the Last Four Years (since 04.10.2014):**

<b>Datum / Date Gz / Ref</b>		<b>Euro</b>
	<b>Professor Dr. Axel Voigt</b>	<b>972.850</b>
24.05.2018 INST 162/333-3	SFB/Transregio: Einzelantrag / CRC/Transregio: Individual Proposal Mathematische Modellierung und Simulation des Umbaus von Knochengewebe und Implantatmaterial im gesunden und kranken Knochen /	85.400

Datum / Date Gz / Ref		Euro
	Mathematical modelling and simulation of bone and implant remodelling in the healthy and diseased bone	
27.07.2016 VO 899/20-1	Schwerpunktprogramm: Einzelantrag / Priority Programmes: Individual Proposal Der Einfluß elektrischer und magnetischer Felder auf die Mikrostruktur in multiferroischen Verbundmaterialien - an Physe-Field-Crystal Ansatz / The Influence of Electric and Magnetic Fields on Microstructure in Multiferroic Composite Materials - a Phase-Field-Crystal Approach electric and	251.950
03.07.2015 VO 899/19-1	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal Flüssigkristalline Phasen mit Positionsordnung auf gekrümmten Mannigfaltigkeiten / Positionally ordered liquid crystals on curved manifolds	181.400
27.05.2015 INST 269/451-2	SFB/Transregio: Einzelantrag / CRC/Transregio: Individual Proposal Hochauflösende thermo-elastische Simulation auf massiv-parallelen Rechnerarchitekturen / High-accuracy thermo-elastic simulation on massively parallel computers	454.100

## Zusammenfassung

Entnetzungsphänomene sind universell und wurden für eine Vielzahl von inorganischen und organischen Materialien (wie Flüssigkeiten, Polymere, Metalle und Halbleiter) beobachtet. Auch wenn Flüssigkeitsfilme im Fokus des SPP2171 stehen, ist Entnetzung auch für dünne Filme aus Festkörpern relevant, für die einige der zugrundeliegenden physikalischen Prozesse sehr ähnlich sind. Wir behandeln daher ein generelles Phasenfeldmodell zur Beschreibung von Entnetzungsprozessen für flüssige/viskoelastische/elastische dünne Filme auf flüssigen/viskoelastischen/elastischen Substraten, welches die Identifikation von Gemeinsamkeiten und Unterschieden ermöglicht. Die Modellierung basiert auf Forschung zu Mehrphasenströmungen mit bewegten Kontaktlinien, unter Berücksichtigung von Surfactants, Oberflächenviskosität, nicht-Newtonscher Fluide und komplexer Topographien, als auch Modelle für Oberflächendiffusion, Volumen- und Oberflächenelastizität und viskoelastischer Materialien, welche in einem generellen Phasenfeldmodell miteinander kombiniert werden. Diese Modelle sind in AMDiS, einer benutzerfreundlichen adaptiven Finite Elemente Software für Hochleistungsrechner, welche gutes Skalierungsverhalten bis zu mehreren tausend Prozessoren zeigt und auch für dieses Projekt verwendet wird und anderen Gruppen des SPP zur Verfügung stehen wird, implementiert. Wir erweitern diese Modellierungsansätze, welche die klassischen Kontaktwinkelbedingungen von Young und Neumann als Extremfälle enthalten, zu allgemeineren Situationen indem Oberflächenspannungen berücksichtigt und der Einfluss von Elastokapillarität analysiert wird. Wir entwickeln Oberflächenelastizitäts- und Oberflächenviskoelastizitätsmodelle und verbessern numerische Ansätze um diese zu lösen. Mit diesen Erweiterungen kann das Framework für spezifische Anwendungen mit flexiblen, adaptiven und schaltbaren Substraten verwendet werden. Die Modelle werden an anderen theoretischen und experimentellen Projekten des SPP2171 validiert. Außerdem ist die Entwicklung verschiedener Benchmarkprobleme geplant.

## Summary

Dewetting phenomena are universal and have been observed on a variety of inorganic and organic materials (such as liquids, polymers, metals and semiconductors). While liquid films are in the focus of the SPP 2171, dewetting is also relevant for solid thin films, where some of the underlying physical processes are very similar. We therefor consider a general phase field modeling approach for dewetting of liquid/viscoelastic/elastic thin films on liquid/viscoelastic/elastic substrates, which allows to identify similarities and differences. The model is based on research on multiphase flow with moving contact lines, including surfactants, surface viscosity, non-Newtonian fluids and complex topographies as well as models for surface diffusion, bulk and surface elasticity and viscoelastic materials, which will be combined in a general multiphase field model. These models are implemented in AMDiS, a user-friendly adaptive finite element toolbox for high performance computing,

demonstrated to scale up to several thousand processors, which will also be used for this project and provided to other groups of the SPP2171. We extend these modeling approaches, which consider the extreme cases of Young and Neumann condition at the contact line to more general situations by including surface stresses and analyze the influence of elastocapillarity. We develop surface elastic and viscoelastic models and improve numerical approaches to solve them. With these extensions the framework can be applied to specific applications with flexible, adaptive and switchable substrates. The models will be validated with other theoretical and experimental projects within the SPP2171. We further plan to develop various benchmark problems.