

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		
Dauer [Monate] / Duration [Months]	36		
MU 1674/17-1			
Summe / Total [Euro]	163.350		
Professor Dr. Marcus Müller			
	Anz. / No.	Dauer / Duration	Euro
Personalmittel / Funding for Staff			145.100
Doktorandin/Doktorand und Vergleichbare 75 % / Doctoral Researcher or Comparable 75 %	1	36	145.100

Sachmittel / Direct Project Costs			18.250
Gäste / Visiting Researchers			3.750
Publikationen / Publications			1.000
Reisen / Travel			13.500
TA 259/14-1			
Summe / Total [Euro]	218.291		
Professor Dr. Motomu Tanaka			
	Anz. / No.	Dauer / Duration	Euro
Personalmittel / Funding for Staff			145.100
Doktorandin/Doktorand und Vergleichbare 75 % / Doctoral Researcher or Comparable 75 %	1	36	145.100
Sachmittel / Direct Project Costs			73.191
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
Gesamtsumme / Total	381.641		

**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
	Professor Dr. Marcus Müller	3.102.100
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
	Professor Dr. Motomu Tanaka	1.155.500
23.05.2018 INST	Sonderforschungsbereich: Einzelantrag / Collaborative Research Centres: Individual Proposal Schutz vor Malaria durch Hämoglobin S und C: Eine quantitative	586.400

Datum / Date Gz / Ref		Euro
35/1166-2	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.