

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		
Dauer [Monate] / Duration [Months]	36		
VO 899/25-1			
Summe / Total [Euro]	225.150		
Professor Dr. Axel Voigt			
	Anz. / No.	Dauer / Duration	Euro
Personalmittel / Funding for Staff			209.700
Postdoktorandin/Postdoktorand und Vergleichbare 100 % / Postdoctoral Researcher or Comparable 100 %	1	36	209.700
Sachmittel / Direct Project Costs			15.450
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):**

Datum / Date Gz / Ref		Euro
	Professor Dr. Axel Voigt	972.850
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 / Mathematical modelling and simulation of bone and implant remodelling in the healthy and diseased bone	85.400
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 Oberflächenviscoelastizitätsmodelle 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.