

**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 41/780-3	Sonderforschungsbereich: Einzelantrag / Collaborative Research Centres: Individual Proposal Makromolekularer Transport durch nanoskalige Poren / Macromolecular transport through nanoscale pores	300.300

## 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.