

**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:**

	Beantragt / Requested		
<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.
---	--