

<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>	Theoretische Physik der kondensierten Materie
<b>Subject Area</b>	Theoretical Condensed Matter Physics
<b>Rahmenprojekt / Framework Project</b>	SPP 2171
<b>Titel</b>	<b>Mesoskopische Gradientendynamikmodelle für die Be- und Entnetzungsdynamik auf adaptiven Substraten</b>
<b>Title</b>	<b>Mesoscopic gradient dynamics models for the (de)wetting dynamics on adaptive substrates</b>
<b>Geschäftszeichen / Reference No.</b>	TH 781/13-1
<b>Antragsteller / Applicant</b>	<b>Professor Dr. Uwe Thiele</b> Westfälische Wilhelms-Universität Münster Fachbereich 11 - Physik Institut für Theoretische Physik Münster
<b>Kooperations- partnerinnen und Kooperations- partner / Cooperation Partners</b>	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>		
<b>TH 781/13-1</b>			
<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 Entnetzungsdynamik 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 Benetzbarkeitsdominierte Be- und Entnetzungsdynamik 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.