

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 Benetzungsphänomene in Gittermodellen für Flüssigkristalle in der Nähe von schaltbaren Oberflächen**

Title **Dynamic wetting phenomena in lattice models for nematic fluids/liquid crystals near switchable substrate potentials**

Geschäftszeichen / Reference No. **OE 285/6-1**

Antragsteller / Applicant **Professor Dr. Martin Oettel**
Eberhard Karls Universität Tübingen
Mathematisch-Naturwissenschaftliche Fakultät
Institut für Angewandte Physik
Tübingen

Beantragte Mittel / Budget Request:

	Beantragt / Requested		
Dauer [Monate] / Duration [Months]	36		
OE 285/6-1			
Summe / Total [Euro]	151.100		
Professor Dr. Martin Oettel			
	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			6.000
Reisen / Travel			6.000

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
	Professor Dr. Martin Oettel	372.200
17.07.2018 OE 285/5-1	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal Mikroskopische Zugänge zur nichtlinearen Mechanik defektreicher Kristalle / Microscopic approaches to the nonlinear mechanics of driven defect-rich crystals	195.700
23.03.2015 OE 285/3-1	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal Kristallines Dünnschichtwachstum in anisotropen Mischungen: ein übergreifender Zugang mittels Experiment, Theorie und Simulation / Crystalline thin film growth in anisotropic mixtures: a combined approach by experiment, theory and simulation	176.500

Zusammenfassung

In diesem Projekt sollen Flüssigkristalle in der Nähe von schaltbaren Substraten mittels theoretischer Methoden und begleitender Simulationen untersucht werden. Von besonderem Interesse sind dabei das Verhalten bei Annäherung an einen Benetzungsübergang und bei Wechsel zwischen verschiedenen Benetzungszuständen.

Als Modellsystem betrachten wir Stäbchen auf einem Gitter mit kurzreichweitigen Attraktionen.

Wir haben klassische Dichtefunktionale für diese Modelle formuliert und werden diese verbessern sowie eine geeignete dynamische Dichtefunktionaltheorie ableiten.

Benetzungsphasendiagramme für nematisch geordnete Filme (senkrecht oder parallel) und smektische Filme (mit möglichen Schichtungsübergängen) sollen berechnet werden. Von besonderem Interesse ist dann die Dynamik einer smektischen Schichtbildung und die Schaltdynamik zwischen nematischen Benetzungszuständen verschiedener Orientierung. Bei diesen Prozessen ist nur ein geringer Massentransport involviert und deswegen erwarten wir, dass eine mit der Brownschen Dynamik verwandten Gitterdynamik die Prozesse gut beschreibt.

Komplementäre Simulationen (großkanonische und kinetisches Monte Carlo) sollen durchgeführt werden, um die theoretischen Resultate zu validieren. In Kollaborationen mit experimentellen Gruppen sollen die Resultate zur Zeitabhängigkeit von smektischer Schichtbildung und bei Schaltprozessen zwischen verschiedenen nematischen Benetzungszuständen getestet werden.

Summary

Using theoretical methods and accompanying simulations, we will investigate liquid crystals near switchable substrates. Of particular interest is the approach to wetting transitions and switches between different wetting states.

As a model system, we consider lattice rods with short-range attractions.

We have developed and will further improve classical density functionals for these models as well as formulate a suitable dynamic density functional theory.

Wetting phase diagrams will be computed for nematically ordered (upright or lying-down) and smectic (with possible layering transitions) films. Of particular interest will be the dynamics of smectic layer formation and the switching dynamics between nematic wetting states of different orientation. In these processes, there is little mass transport involved and thus we expect that a lattice dynamics akin to Brownian dynamics can describe these well.

Complementary simulations of grand canonical and kinetic Monte Carlo type will be performed to gauge and validate the theoretical results. Through collaborations with experimental groups the results on time-dependence of smectic layering and of the switching between nematic wetting states shall be tested.

