

Antragstyp Schwerpunktprogramm - Einzelantrag - Neuantrag

Type of Proposal Priority Programme - Individual Proposal - New Proposal

Antragsdauer / Requested Duration 36 Monate / 36 months

Fach Theorie und Modellierung

Subject Area Theory and Modelling

Rahmenprojekt / Framework Project SPP 2171

Titel **Flüssigkeiten auf schaltbaren vorstrukturierten Substraten - von mikroskopischen zu mesoskopischen Modellen**

Title **Liquids on switchable pre-structured substrates - from microscopic to mesoscopic models**

Geschäftszeichen / Reference No. **GU 1455/3-1**

Antragstellerin / Applicant **Dr. Svetlana Gurevich**
Westfälische Wilhelms-Universität Münster
Fachbereich 11 - Physik
Institut für Theoretische Physik
Münster

Geschäftszeichen / Reference No. **HE 2570/7-1**

Antragsteller / Applicant **Professor Dr. Andreas Heuer**
Westfälische Wilhelms-Universität Münster
Institut für Physikalische Chemie
Münster

Beantragte Mittel / Budget Request:

	Beantragt / Requested		
Dauer [Monate] / Duration [Months]	36		
GU 1455/3-1			
Summe / Total [Euro]	158.725		
Dr. Svetlana Gurevich			
	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			13.625
Publikationen / Publications			1.125
Reisen / Travel			12.500
HE 2570/7-1			
Summe / Total [Euro]			158.725
Professor Dr. Andreas Heuer			
	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			13.625
Publikationen / Publications			1.125
Reisen / Travel			12.500
Gesamtsumme / Total			317.450

**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
	Dr. Svetlana Gurevich	382.350
07.11.2016 GU 1455/1-1	Paketantrag: Einzelantrag / Package Proposals: Individual Proposal Strukturbildung in dynamischen selbstanordnenden Systemen / Pattern formation in dynamic self-assembly systems	210.050
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
03.06.2016 INST 211/451-3	SFB/Transregio: Einzelantrag / CRC/Transregio: Individual Proposal Strukturbildung in dynamischen selbstanordnenden Systemen / Pattern formation in dynamic self-assembly systems	63.900
	Professor Dr. Andreas Heuer	2.422.050
01.12.2017 INST 211/522-3	Sonderforschungsbereich: Serviceprojekt / Collaborative Research Centres: Service Project Computational Chemistry (Theorie und Modellierung der Kooperativität in chemischen Systemen) / Computational Chemistry (Theory and Modeling of Cooperativity in Chemical Systems)	1.449.800
01.12.2017 INST 211/807-1	Sonderforschungsbereich: Einzelantrag / Collaborative Research Centres: Individual Proposal Die Rolle von Protein-Lipid-Wechselwirkungen bei der Protein-Segregation in der Hefe-Plasmamembran / The role of protein-lipid interactions for protein segregation in the yeast plasma membrane	640.700
07.11.2016 HE 2570/3-1	Paketantrag: Einzelantrag / Package Proposals: Individual Proposal Selbstorganisation molekularer Schichten in 3D mit Hilfe vorgegebener Gerüste / Assembly of layers in 3D with guiding frames	171.950
03.06.2016 INST	SFB/Transregio: Einzelantrag / CRC/Transregio: Individual Proposal Anordnung von molekularen Schichten bei vorgegebenem molekularen Gerüst in 3D / Assembly of layers in 3D with guiding frames	51.200

Datum / Date Gz / Ref		Euro
211/463-3		
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

In diesem Projekt werden die statischen und dynamischen Eigenschaften einer einfachen Flüssigkeit auf einem schaltbaren vorstrukturierten Substrat aus einer numerischen / theoretischen Perspektive in engem Kontakt zu den experimentellen und theoretischen Projekten des SPP untersucht. Während das Benetzungsverhalten auf homogenen und vorstrukturierten Substraten gut verstanden ist, soll in diesem Projekt ein umfassendes Verständnis der resultierenden Nichtgleichgewichtseffekte beim Schalten erhalten werden. Dabei spielen auch die neuen externen Zeitskalen des periodischen Schaltens eine wichtige Rolle. Besondere Effekte werden z.B. für die Benetzung nahegelegener hydrophiler Streifen erwartet, die sowohl einfache benetzende Tropfen als auch Brückenstrukturen ausbilden.

Für ein umfassendes Verständnis des Systems ist es von zentraler Bedeutung, unterschiedlicher Längen- und Zeitskalen zu betrachten. Um beispielsweise den Schaltprozess selbst zu berücksichtigen, ist eine mikroskopische Analyse erforderlich. Dazu wird das Schalten von photoaktiven Molekülen und deren Einfluss auf die Flüssigkeit über Moleküldynamiksimulationen (MD) explizit untersucht. Im Gegensatz dazu ist für die Untersuchung des Langzeitverhaltens ein Kontinuumsansatz am besten geeignet, um z.B. das dynamische Verhalten und die auftretenden Instabilitäten zu analysieren. Für spezifische Fragestellungen werden auf Basis der Expertise der beiden PIs Krafffeld- und Gittergas-Simulationen einerseits sowie mesoskopische Dünnschichtmodelle zur Untersuchung der Gradientendynamik an Grenzflächen-Hamiltonians andererseits durchgeführt.

Um eine quantitative Anpassung zwischen diesen Ansätzen zu erreichen, verwenden wir spezielle Multiskalen-Techniken, um die Parameter, die für die mesoskopische Dünnschichtgleichung übergeben werden, zu bestimmen. Das umfasst die Grenzflächenspannung sowie das Benetzungspotential. Für MD-Simulationen kann die Information direkt aus der Berechnung geeigneter Viriale erhalten werden, wohingegen für den Fall eines Gittergasmodells eine verbrückende mikroskopische Dichtefunktionaltheorie verwendet wird, wie sie kürzlich in einer Zusammenarbeit beider PIs entwickelt wurde. Die aufeinander abgestimmte Modellhierarchie soll es uns ermöglichen, entscheidende Aspekte von Nichtgleichgewichtsdepositions- und Umlagerungsprozessen der Moleküle über mehrere Längen- und Zeitskalen hinweg quantitativ zu verstehen.

Während dieser drei Jahre möchten wir (i) umfassende Erfahrungen mit den relevanten theoretischen Werkzeugen gewinnen, (ii) ein gutes Verständnis von Nichtgleichgewichtseffekten als Folge der Schaltprozesse erhalten und (iii) in enger Zusammenarbeit mit den entsprechenden experimentellen Gruppen der SPP diese Ergebnisse auf die spezifischen Interaktionsparameter ihrer Experimente anwenden (z. B. für gegebene Oberflächenstruktur und Kontaktwinkel).

Summary

In this project we will study the static and dynamic properties of a simple liquid on a switchable pre-structured substrate from a numerical/theoretical perspective in close contact to the both experimental and theoretical projects of the SPP. Whereas the wetting behavior on homogeneous and pre-

structured substrates is well-understood, we aim to obtain a thorough understanding of the resulting non-equilibrium effects upon switching, involving new time-scales as in the case of periodic switching. Prominent effects are expected, e.g., for the wetting of close-by hydrophilic stripes, involving liquid bulge as well as bridge configurations.

For a comprehensive understanding of the system in question we are convinced that an analysis of different length- and time-scales is of utmost importance. For example, in order to take into account the switching process itself, a microscopic analysis is required and, indeed, we will explicitly study the switching of photoactive molecules via Molecular Dynamics simulations (MD) and its impact on the liquid. In contrast, to study the long-time behavior to new equilibrium states, a continuum perspective will be most appropriate where, e.g., the dynamical behavior and arising instabilities can best be analyzed. For specific questions, and fully related to the scientific expertise of the two PIs, we will combine force field and lattice gas simulations, on the one hand, and mesoscopic thin film models studying the gradient dynamics on interface Hamiltonians, on the other hand.

In order to have a quantitative matching among these approaches, we employ specific multiscale bridging techniques to perform the parameter passing to the mesoscopic thin film approach, i.e. the estimation of the tension and the wetting potential. For MD simulations, the information can be directly obtained from the calculation of appropriate virials whereas for the case of a LGM, a bridging microscopic Density Functional Theory will be employed, as developed in a recent collaboration of both PIs. The matched hierarchy of models shall allow us to quantitatively understand crucial aspects of non-equilibrium deposition and rearrangement processes of the molecules across several length and time scales.

During this three year period we aim (i) to gain full experience with the relevant theoretical tools, (ii) to obtain a good physical understanding of non-equilibrium effects upon switching, and (iii) to apply these results, in close collaboration with the corresponding experimental groups of the SPP, to the specific interaction parameters of their experiments (e.g., for given pre-structuring and contact angles).

**Bemerkung der
Geschäftsstelle /
Comment by the DFG
Head Office**

Es liegt ein befristeter Arbeitsvertrag vor, der am 01.10.2022 ausläuft.
Eine Weiterbeschäftigung ist beabsichtigt.
The applicant's fixed-term contract will expire on 01.10.2022.
A continued employment is intended.