

Antragstyp Schwerpunktprogramm - Einzelantrag - Neuantrag

Type of Proposal Priority Programme - Individual Proposal - New Proposal

Antragsdauer / Requested Duration 36 Monate / 36 months

Fach Strömungsmechanik

Subject Area Fluid Mechanics

Rahmenprojekt / Framework Project SPP 2171

Titel Optimierung von Mikrosäulenteppichen für reversible Benetzung mithilfe gitterfreier Simulationen

Title Optimization of micropillar carpets for reversible wetting using meshless simulations

Geschäftszeichen / Reference No. NA 1436/3-1

Antragsteller / Applicant Dr. Prapanch Nair
Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg
Department Chemie- und Bioingenieurwesen
Lehrstuhl für Multiskalensimulation
Erlangen

Arbeitgeberzusage Statement by Employer Die Erklärung zur Arbeitgeberfunktion liegt noch nicht vor.
A statement regarding employer status has not yet been received.

Beantragte Mittel / Budget Request:

	Beantragt / Requested		
Dauer [Monate] / Duration [Months]	36		
NA 1436/3-1			
Summe / Total [Euro]	303.800		
Dr. Prapanch Nair			
	Anz. / No.	Dauer / Duration	Euro
Personalmittel / Funding for Staff			291.200
Eigene Stelle 100 % / Temporary Position for Principal Investigator 100 %	1	36	209.700
Sonst. wiss. Mitarbeiterin/Sonst. wiss. Mitarbeiter 50 % / Other Research Assistant 50 %	1	36	81.500
Sachmittel / Direct Project Costs			12.600

Geräte bis 10.000 Euro, Software und Verbrauchsmaterial / Equipment up to EUR 10,000, Software and Consumables			3.000
Publikationen / Publications			3.000
Reisen / Travel			6.600

Zusammenfassung

Die Gestaltung und Entwicklung von Mikrostrukturen mit hohem Aspektverhältnis (HAR) für hydrophobe Substrate wird bislang durch Heuristiken vorangetrieben und durch die vorliegende Lithographietechnik limitiert. Theoretisches Verständnis für das dynamische Benetzungsverhalten von HAR-Mikrostrukturen fehlt jedoch. Ein entscheidender Grund dafür ist die begrenzte optische Auflösung bei der experimentellen Beobachtungen von dynamischen Vorgängen. Daher ist der Einfluss von Biegesteifigkeit und Morphologie der HAR-Mikrostrukturen auf die Hydrophobizität sowie auf die Reversibilität des Benetzungsvorgangs nicht systematisch verstanden.

Ziel des Projekts ist die Optimierung von HAR-Mikrostruktursubstraten (auch bekannt als Mikrosäulen) unter Verwendung von dreidimensionalen gitterfreien Partikelsimulationen. Optimierungsziel ist eine erhöhte Hydrophobizität sowie die Verringerung der Hysterese. Als Designvariablen werden Dichte, Aspektverhältnis und Biegesteifigkeit der Säulen herangezogen. Die Interaktion zwischen der inkompressiblen Flüssigkeit (mit einer freien Oberfläche) und dem komplex geformten, festen Substrat wird durch eine gitterfreie Diskretisierung des Kontinuums simuliert. Die Kapillarkräfte werden simuliert, indem das Kontinuum mit paarweise interpartikulären Kräften überlagert wird. Mit diesen Simulationen können quantitative Beziehungen zwischen den mechanischen Eigenschaften der Mikrostruktur und den dynamischen Kontaktwinkeln hergestellt werden. Darüber hinaus beabsichtigen wir optimale HAR-Mikrostrukturdesigns für verschiedene Benetzungsregime vorzuschlagen. Als Teil eines Schwerpunktprogramms hat dieses Projekt den Vorteil, dass die Simulationen gegen experimentell hergestellte Oberflächen getestet und validiert werden können. Darüber hinaus unterstützt die Kollaboration mit Experimentatoren bei der Berücksichtigung von Fertigungseinschränkungen, so dass die, in der Simulation untersuchten Systeme, so realistisch wie möglich gehalten werden können.

Das Projekt beinhaltet drei Bearbeitungsschwerpunkte. Der erste Schwerpunkt umfasst eine Reihe von Validierungsfällen, bei denen zwei- und dreidimensionale Tropfen auf starren HAR-Mikrostrukturen mit Theorie und Experiment verglichen werden. In diese Studien wird auch die Auswirkung von Viskosität und Trägheit auf den scheinbaren Kontaktwinkel differenziert betrachtet. Im zweiten Schwerpunkt wird die Biegesteifigkeit als Parameter zur Identifizierung unterschiedlicher Benetzungsregime eingeführt. Der dritte Schwerpunkt wird zudem die Aggregation der Mikrosäulen während der Tropfenbewegung sowie die Tropfenverdampfung untersuchen.

Summary

The design and development of high aspect ratio (HAR) microstructures for hydrophobic substrates are driven by heuristics and limited to the lithography technique at hand. Theoretical understanding of the dynamic wetting of HAR microstructures is lacking, primarily due to limitations in the resolution of experimental observations in dynamic scenarios. Therefore the role of flexural stiffness and morphology of the HAR microstructures on hydrophobicity and wetting reversibility is not fully understood.

The project aims at optimizing HAR microstructure (also known as micropillar) substrates, using three dimensional particle based meshless simulations. The goals of the optimization are increased hydrophobicity and

reduced hysteresis with the pillar density, aspect ratio of pillars and flexural strength of the substrate material as the parameters. Incompressible single component fluid (with a free surface) interacting with deformable, complex shaped solid substrates will be simulated by meshless discretization of the continuum description. The capillary forces will be simulated by superimposing pairwise inter-particle forces on the continuum domain. The simulations will provide quantitative relationships between microstructure mechanical properties and the dynamic contact angles. Further, we aim to propose optimal HAR microstructure designs for different wetting regimes. As part of a priority program this project has the advantage of testing and validating the simulations against fabricated experimental surfaces. Also, the collaborations with experimental research groups would serve as a guide to keep the simulations as realistic as possible.

The project aims at three groups of deliverables. The first is a set of validations of two and three dimensional drops on rigid HAR microstructures against theory and experiments. This group of studies would also differentiate between the effect of viscosity and inertia on the apparent contact angle. The second group of deliverables will introduce flexural stiffness as a parameter to identify different wetting regimes. The third group of deliverables will investigate micropillar aggregation during drop motion as well as drop evaporation.