

Initiative zur Einrichtung eines Schwerpunktprogramms

Dynamische Benetzung flexibler, adaptiver und schaltbarer Oberflächen

Beantragte Förderungsdauer: 2×3 Jahre

Programmausschuss:

Koordinator

Prof. Dr. Uwe Thiele, Professor für Theoretische Physik (W3) u.thiele@uni-muenster.de
Institut für Theoretische Physik, Westfälische Wilhelms-Universität Münster
Nichtlineare Dynamik und Physik komplexer Systeme, Physik der Grenzflächen, Physik weicher Materie

Weitere Mitglieder

Prof. Dr. Hans-Jürgen Butt, Direktor butt@mpip-mainz.mpg.de
Abteilung Physik der Grenzflächen, Max-Planck-Institut für Polymerforschung, Mainz
Physikalische Chemie, Physik der Grenzflächen

Dr. Stefan Karpitschka, Gruppenleiter stefan.karpitschka@ds.mpg.de
AG Grenzflächen komplexer Flüssigkeiten,
Max-Planck-Institut für Dynamik & Selbstorganisation, Göttingen
Physikalische Chemie, Fluidodynamik, Physik weicher Materie

Prof. Dr. Ralf Seemann, Professor für Experimentalphysik (W3) r.seemann@physik.uni-saarland.de
AG Geometrie fluiden Grenzflächen, Experimentalphysik, Universität des Saarlandes, Saarbrücken
Experimentalphysik weicher Materie, Chemische Physik, Hydrodynamik

Prof. Dr. Doris Vollmer, Gruppenleiterin vollmerd@mpip-mainz.mpg.de
Abteilung Physik der Grenzflächen, Max-Planck-Institut für Polymerforschung, Mainz
Materialwissenschaften, Physikalische Chemie, Physiko-chemische Hydrodynamik

1 Zusammenfassung

Be- und Entnetzung – also das Voranschreiten bzw. sich Zurückziehen von Flüssigkeiten auf Oberflächen – gehört zu den faszinierenden alltäglichen Phänomenen der uns umgebenden natürlichen und technischen Welt. Oberflächen, die gut entnetzen, sind für viele Pflanzen und Tiere essentiell, da Wassertropfen sehr schnell von ihnen abperlen. Mit zunehmender Miniaturisierung fluiden technischer Systeme gewinnt auch eine kontrollierbare Benetzbarkeit immer höhere Bedeutung, da bei kleinen Abmessungen Grenzflächeneffekte dominieren. Gegenstand dieses Schwerpunktprogramms (SPP) ist die Erarbeitung des grundlegenden physikalischen Verständnisses der dynamischen Be- und Entnetzung flexibler, adaptiver und schaltbarer Oberflächen.

Dabei werden flexible Oberflächen durch die Flüssigkeit deformiert und wirken damit auf ihr statisches und dynamisches Verhalten zurück. Beispiele sind Elastomere, Hydrogele und Oberflächen mit bürstenähnlichen Strukturen. Adaptive Oberflächen ändern ihre physikalisch-chemischen Eigenschaften bei Anwesenheit einer Flüssigkeit, z.B. unter einem Tropfen, oder passen ihr Benetzungsverhalten an Umgebungsbedingungen an. Schaltbare Oberflächen können ihre Oberflächenenergie oder -struktur bei Änderung externer Einflüsse wiederholt nahezu sprunghaft ändern und damit z.B. eine periodische Benetzungsdynamik induzieren. Der Schaltvorgang kann z.B. durch elektrische Felder oder Lichteinstrahlung ausgelöst werden.

In allen drei Fällen – flexible, adaptive und schaltbare Oberflächen – koppelt die Substratdynamik an die hydrodynamische Benetzungsdynamik und bringt zusätzliche Zeit- und Längenskalen ein. Dabei soll hauptsächlich die Dynamik der Benetzung durch einfache, niedermolekulare Flüssigkeiten betrachtet werden. Daneben sollen auch ihre Mischungen, verdünnte Suspensionen und Tensidlösungen untersucht werden, deren innere Dynamik sich durch grenzflächeninduzierte Strukturierungen verändert was wiederum die Benetzung beeinflusst. Eine derartige Kopplung verschiedener Nichtgleichgewichtsprozesse hat wesentlichen Einfluss auf die Mechanismen der Energiedissipation, welche wiederum die Gesamtdynamik bestimmen. Die resultierenden zusätzlichen Freiheitsgrade bieten neue Möglichkeiten einer zukünftigen gezielten Steuerung dynamischer Benetzungsvorgänge, stellen jedoch die experimentelle Untersuchung und theoretische Beschreibung vor neue Herausforderungen.

Das hochkooperative und interdisziplinäre Schwerpunktprogramm basiert auf dem sehr guten Wissensstand in Deutschland zur Benetzung homogener, fester und inerter Oberflächen sowie auf rasanten Fortschritten in Längenskalen-übergreifenden experimentellen und theoretischen Methoden. Er soll die Voraussetzungen für eine zukünftige Kontrolle dynamischer Benetzungsprozesse schaffen.

2 Stand der Forschung und eigene Vorarbeiten

2.1 Einleitung

Die Oberflächen vieler Pflanzen und Tiere sind flexibel und entnetzen sehr gut. Damit perlen Wassertropfen sehr schnell von ihnen ab wodurch z.B. Luftpolster im Fell oder Federkleid erhalten werden, die für lebenswichtige Eigenschaften wie Wärmeisolation und Flugfähigkeit notwendig sind. Die Adaption ihrer Benetzbarkeit an die Umgebungsbedingungen ermöglicht es vielen fleischfressenden Pflanzen, bei hinreichender Luftfeuchtigkeit, Insekten zu erbeuten (Abb. 1). Die präzise Kontrolle von Be- und Entnetzung ist auch für viele technische Prozesse wichtig; darunter fallen z.B. Beschichten, Kleben, Drucken und Flotation (bei der Mineralaufbereitung oder dem Recycling). Mit zunehmender Miniaturisierung fluider technischer Systeme (z.B. Mikrofluidik, 3D-Druck, Lab-on-a-Chip) gewinnen kontrollierbare Benetzungseigenschaften weicher Materialien noch höhere Bedeutung, da bei kleinen Abmessungen Grenzflächeneffekte dominieren. Bisher wurde Benetzung vor allem im Hinblick auf Oberflächentopographie und -hydrophilie fester und inerter Substrate untersucht. Erst neue experimentelle und theoretische Methoden ermöglichen die Untersuchung von flexiblen, adaptiven und schaltbaren Oberflächen, die sich durch die Gegenwart der Flüssigkeit selbst oder durch externe Bedingungen oder Parameter ändern.

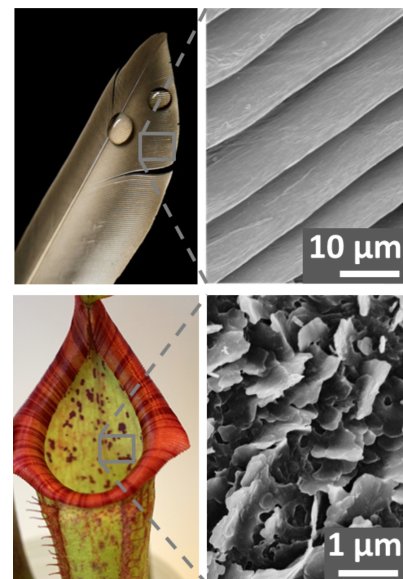


Abb. 1: Makro- und Mikrostruktur einer Feder (oben) und einer carnivoren Pflanze (unten).

2.2 Statische und dynamische Be- und Entnetzung

Eine der grundlegenden physikalischen Fragen ist: Wie wechselwirkt eine Flüssigkeit mit einer festen Oberfläche? Die Basis für eine quantitative makroskopische Beschreibung der Benetzung wurde im frühen 19. Jahrhundert durch Thomas Young (1773-1829), Pierre-Simon Laplace (1749-1827), Carl Friedrich Gauss (1777-1855) und andere gelegt [1]. Die Ausbreitung niedermolekularer Flüssigkeiten wie Wasser auf einem Substrat hängt ab vom Wechselspiel aller wirkenden Grenzflächenkräfte sowie der mikroskopischen topographischen und chemischen Struktur der Oberfläche [2].

Beschreiben lässt sich dieses Wechselspiel für glatte, homogene, feste und inerte (d.h. ideale) Substrate durch den makroskopischen Gleichgewichtskontaktwinkel θ_{eq} unter dem sich (z.B. bei einem Tropfen) die drei Grenzflächen zwischen Substrat, Flüssigkeit und umgebendem Medium (Gas oder eine zweite Flüssigkeit) an der Drei-Phasen-Kontaktlinie treffen (Abb. 2(a)). Für ideale Oberflächen bestimmt man θ_{eq} mit der Young-Dupré Gleichung

$$\gamma \cos \theta_{eq} = \gamma_S - \gamma_{SL} \quad (1)$$

aus den Grenzflächenenergien (oder -spannungen) γ , γ_S und γ_{SL} der Flüssigkeit-Gas, der Festkörper-Gas, bzw. der Festkörper-Flüssigkeit Grenzfläche [2]. Große Kontaktwinkel erhält man auf Festkörpern mit geringem γ_S , z.B. auf fluorierten Kohlenwasserstoffen wie Teflon oder für Flüssigkeiten mit hohem γ (z.B. Quecksilber). Die Young-Dupré Gleichung spiegelt das Gleichgewicht der horizontalen Kraftkomponenten wieder. Bei weichen, flexiblen Substraten wird auch das Substrat deformiert, damit müssen zusätzlich auch die vertikalen Kraftkomponenten berücksichtigt werden. Sie führen zur Ausbildung des sogenannten Benetzungsrandes, der sich durch zwei unabhängige Neumannwinkel beschreiben lässt (Abb. 2(b)).

Bewegt sich eine Kontaktlinie, hängen die Winkel zudem von der momentanen Kontaktliniengeschwindigkeit ab [3, 4]. Die Be- und Entnetzungs-dynamik, also das Voranschreiten bzw. sich Zurückziehen von Flüssigkeiten auf Oberflächen (Vor- bzw. Rückwärtsbewegung von Kontaktlinien, im Folgenden kurz „Benetzung“) wird durch die Mechanismen der Energiedissipation bestimmt. Eine bedeutende Frage selbst für feste Substrate ist, wo die Dissipation primär erfolgt: in der direkten Umgebung der Kontaktlinie, durch viskose Reibung in der gesamten bewegten Flüssigkeit oder durch Reibung an der flüssig-fest Grenzfläche [A1][5]?

Wenn die Oberfläche darüber hinaus strukturiert oder nicht perfekt glatt und homogen ist, kann die Kontaktlinie lokal „festgehalten“ (gepinnt) werden. Dadurch beobachtet man, abweichend von der „idealen“ Beschreibung durch den makroskopischen Gleichgewichtskontaktwinkel, bei praktisch allen realen Benetzungssituationen eine lokale Unbestimmtheit des Kontaktwinkels die zu einer Kontaktwinkelhysterese führt [4]. Das heißt, dass der Kontaktwinkel einer sich ausbreitenden Flüssigkeit, der Fortschreitkontaktwinkel θ_F , größer ist als der einer sich zurückziehenden Flüssigkeit, der Rückzugskontaktwinkel θ_R . Die Differenz $\Delta\theta = \theta_F - \theta_R$ wird Kontaktwinkelhysterese genannt, wobei θ_F und θ_R jeweils bestimmt werden, unmittelbar bevor sich die Kontaktlinie zu bewegen beginnt [6].

Die Kontaktwinkelhysterese ist eng verbunden mit der in vielen Systemen wichtigen lateralen Adhäsion eines Tropfens. Dies ist die Kraft die für die laterale Verschiebung eines Tropfens auf einer Oberfläche notwendig ist und bestimmt damit die Haftreibung von Flüssigkeiten [A2]. Ohne Kontaktwinkelhysterese würden Flüssigkeiten selbst bei minimalen Abweichungen von der Horizontalen, von einer Oberfläche abgleiten. In Konsequenz gäbe es keine haftenden Regentropfen auf Brillen oder Autoscheiben, die Beschichtung von Oberflächen würde erschwert und viele Druckprozesse wären unmöglich. Die laterale Adhäsion auf Substraten wird oft durch den Abrollwinkel α quantifiziert (*sliding* oder *rolling angle*). Das ist der Neigungswinkel, bei dem Tropfen einer bestimmten Masse m anfangen, sich auf einer Oberfläche zu bewegen (Abb. 3).

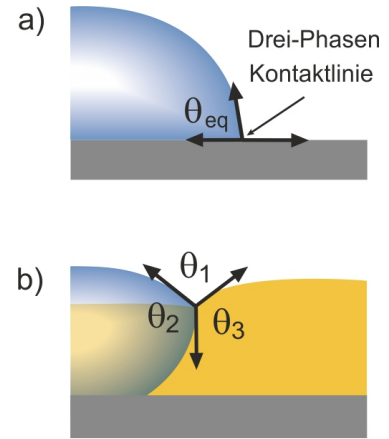


Abb. 2: Flüssigkeitstropfen auf (a) hartem und (b) weichem Substrat.

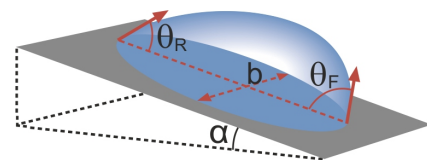


Abb. 3: Haftender Flüssigkeitstropfen mit ovaler Kontaktlinie auf einer schiefen Ebene. θ_F und θ_R bezeichnen den Fortschreit- bzw. Rückzugskontaktwinkel und b die Breite der Kontaktfläche. Der Tropfen bewegt sich wenn der Neigungswinkel größer als der Abrollwinkel α ist.

Er ist durch

$$\sin \alpha = \frac{kb\gamma}{mg}(\cos \theta_R - \cos \theta_F) \quad (2)$$

gegeben [7]. Dabei ist b die Breite der Kontaktfläche des Tropfens und $g = 9,81 \text{ m/s}^2$ ist die Erdbeschleunigung. Der Korrekturfaktor k hängt von der experimentellen Situation ab [8, 9]. Eng verbunden mit der Kontaktwinkelhysterese ist die Beobachtung, dass die Bewegung der Kontaktlinie davon abhängt, ob sie in Richtung der flüssigen Phase oder entgegengesetzt erfolgt [10]. Die Erwartung, dass auf der relevanten Submikrometer-Skala die Kontaktlinie lokal im Gleichgewicht ist, wird durch die Erfahrung nicht bestätigt.

Es ist sehr wenig darüber bekannt, wie Dynamik flexibler und adaptiver Oberflächen oder grenzflächeninduzierte Strukturierung innerhalb der Flüssigkeiten die Kontaktwinkelhysterese und die Kontaktlinienbewegung beeinflussen, welche Prozesse dabei auf mikroskopischer und mesoskopischer Skala ablaufen und welche Rolle Verdunstung, Kondensation und lokale innere Flüssigkeitsstruktur spielen.

Schon bei der Analyse der Kontaktlinienregion einfacher Flüssigkeiten ist eine Differenzierung der betrachteten Längenskalen wichtig. Über 1-2 nm sind selbst einfachste Flüssigkeiten an Grenzflächen oft molekular geordnet. Spezifische molekulare Wechselwirkungen wie Wasserstoffbrücken und sterische Effekte dominieren. Dies zeigt sich u.a. in periodischen, exponentiell abnehmenden Dichtefluktuationen in der Richtung orthogonal zum Substrat (Abb. 4). Bis zu einigen 10 nm wird die Form der Flüssigkeitsoberfläche durch Oberflächenkräfte wie van der Waals oder elektrostatische Doppelschichtkräfte beeinflusst, die zwischen der Festkörper-Flüssigkeit und der Flüssigkeit-Gas Grenzfläche wirken. Erst auf größeren Skalen wird die Flüssigkeitsoberfläche einzig durch die Oberflächenenergie beschrieben. Makroskopisch ist ihre Form durch die Young-Duprè und Laplace Gleichungen der klassischen Kontinuumsmechanik bestimmt während auf mesoskopischer Skala die Beschreibung durch Benetzungsenergien (*wetting* oder *binding* Potential) ergänzt wird [4, 11]. Diese können selbst wiederum aus mikroskopischen Dichtefunktionaltheorien [A3] oder aus molekulardynamischen Rechnungen [A4] bestimmt werden. Entsprechende multiskalige theoretische und numerische Behandlungen müssen maßgeblich erweitert werden, um das dynamische Verhalten von Flüssigkeiten auf flexiblen, adaptiven und schaltbaren Oberflächen systematisch zu studieren.

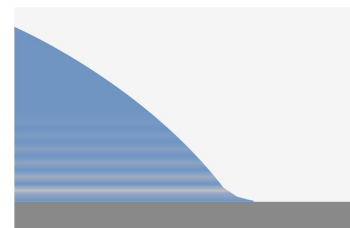


Abb. 4: Ein Nanotropfen weist in Substratnähe Dichteschichtungen auf.

Im Folgenden gehen wir auf die Benetzung flexibler, adaptiver und schaltbarer Oberflächen getrennt ein. Die Grenzen zwischen den drei Substrattypen sind jedoch nicht scharf sondern fließend. Daher ist auch eine gemeinsame Behandlung im beantragten SPP sinnvoll.

2.3 Benetzung flexibler Oberflächen

Flexible Oberflächen können ihr Profil reversibel ändern wenn sie mit einer Flüssigkeit in Kontakt kommen, es findet jedoch kein Stofftransport über die Festkörper-Flüssigkeit Grenzfläche statt, d.h. die Phasengrenze bleibt erhalten und das Substrat ändert seine physikochemischen Eigenschaften nicht. Die Flexibilität einer Oberfläche beeinflusst ihre Benetzung durch eine Flüssigkeit, da die Substratoberfläche durch Grenzflächen- und Kapillarkräfte deformiert wird (Abb. 5) [A5][12, 13, 14]. Nur auf starren festen Substraten ist diese Deformation vernachlässigbar (Abb. 2(a)). Polymerschmelzen, Hydrogele und Organogele sind klassische Beispiele für planare deformierbare Oberflächen. Der Kontakt mit einer Flüssigkeit bewirkt die Ausbildung eines Benetzungsrings (Abb. 5(a)) dessen Höhe, im Falle eines rein elastischen Substrats umgekehrt proportional zur Elastizität ansteigt [A6][13]. Die lokale Deformation ist oft so groß, dass es je nach Oberflächenenergien und Substratrheologie Rückwirkungen auf die Benetzungseigenschaften hat; man spricht von elastokapillaren Effekten [15, 16, 17, 18].

Die Dynamik des Tropfens koppelt an die Dynamik des Benetzungsrings (Abb. 6) und der langsame Abfall des Benetzungsrings außerhalb des Tropfens kann zu einer Wechselwirkung zwischen einzelnen Tropfen führen [A7][19]. Um die Dynamik solcher Prozesse zu verstehen, müssen auch die Mechanismen der Energiedissipation im Substrat berücksichtigt werden [A8][20]. In diesem Zusammenhang spielen Wechselwirkungen mit Phasenübergangsdynamiken wie Kondensation/Verdunstung einer einfachen Flüssigkeit [21] oder Phasenseparation in Mischungen [22] eine wichtige Rolle. Z.B. kann die Bewegung von Tropfen starke, potentiell divergierende Dissipation innerhalb eines weichen Substrats verursachen [A8]. Vor kurzem wurden auf weichen Substraten auch neuartige Modi der Kontaktlinienbewegung wie zeit-periodische Rutsch-Haft Zyklen (*stick-slip* Bewegung) beobachtet, welche erst ansatzweise verstanden sind [A8][23, 24].

Flüssigkeits-imprägnierte Oberflächen (*slippery liquid-infused surfaces*) sind hydrophobe Oberflächen, Gele, poröse Medien, o.ä. die mit einer Sekundärflüssigkeit als Schmiermittel beschichtet sind [25, 26]. Dadurch ist die Haftung so weit reduziert, dass Tropfen einer Primärflüssigkeit sich bereits bei Neigungswinkeln α von wenigen Grad bewegen [A9][27, 28]. Um diese Tropfen bildet sich ein Benetzungsring der Sekundärflüssigkeit (Abb. 5(b)). Seine Höhe und laterale Ausdehnung hängen von der Elastizität und Viskosität der Sekundärflüssigkeit ab und beeinflussen die Benetzungsdynamik maßgeblich. Da die Tropfenbewegung mit einer kontinuierlichen Reorganisation des Benetzungsrings einhergeht, erfordert ein Verständnis der Tropfenbewegung die detaillierte Charakterisierung und Modellierung des Benetzungsrings [A10].

Zentrale Fragen sind: Wie hängt die Energiedissipation bei Bewegung des Tropfens von der Viskosität und Dicke der Schicht aus Sekundärflüssigkeit ab? Die Sekundärflüssigkeit wird z.B. durch Oberflächenporosität oder Polymerbürsten am Abfließen gehindert. Wie beeinflussen diese die Bewegung des Primärtropfens?

Eine Vielzahl natürlicher Oberflächen sind mikro- und nanostrukturiert, wie die Federn von Wasservögeln [29], die Flügel von Insekten und die Blätter von Pflanzen (Abb. 1) [30]. Oft beobachtet man bei strukturierten Oberflächen, dass Wassertropfen bereits für $\alpha < 10^\circ$ von der Oberfläche abrollen und einen Kontaktwinkel $\theta_e > 150^\circ$ bilden [A11]. Solche Oberflächen werden als superhydrophob bezeichnet. Ihre Mikrostruktur ist so beschaffen, dass Luftpolster unter der aufliegenden Flüssigkeit eingeschlossen werden - der sogenannte Cassie Zustand (Abb. 7) [31]. Jedoch gehen alle aktuell verwendeten Modelle von nichtdeformierbaren Oberflächenstrukturen aus. Die Kopplung der Kapillarkräfte an die Elastizität strukturierter Substrate ist noch weitgehend unverstanden. Schon jetzt ist abzusehen, dass sich das Studium flexibler Oberflächen zu einem wichtigen internationalen Forschungsschwerpunkt entwickeln wird. Dafür gibt es zwei Gründe. Erstens wird ein besseres Verständnis der Oberflächen in der Pflanzen- und Tierwelt, der Benetzung medizinisch relevanter Oberflächen wie der Wände von (Blut-)Kapillaren und Stents, und der Zelladhäsion an strukturierten elastischen Oberflächen benötigt. Zweitens eröffnet Flexibilität als weiterer Kontrollparameter der Benetzung neue Möglichkeiten, um Benetzung präzise zu steuern.

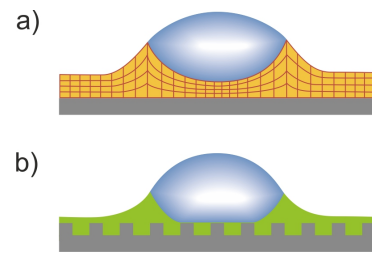


Abb. 5: Tropfen auf (a) einer elastischen und (b) einer Flüssigkeits-imprägnierten Oberfläche. Kapillarkräfte führen jeweils zur Ausbildung eines Benetzungsrings.

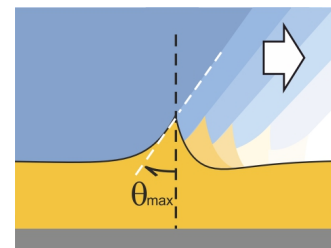


Abb. 6: Dynamik eines Benetzungsrings.

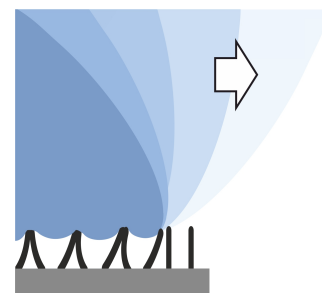


Abb. 7: Kopplung von Elastizität und Kapillarität eines Tropfens auf einer superhydrophoben Oberfläche.

2.4 Benetzung adaptiver Oberflächen

Bei adaptiven Oberflächen kann sich die Benetzbarkeit ändern wenn sie in Kontakt mit einer Flüssigkeit kommen oder durch externe Bedingungen [32, 33]. Beispiele für Letzteres sind die gesteuerte Änderung des Dampfdrucks [A12], des pH-Wertes [34, 32, 35, 36, 37] oder der Temperatur [38, 39, 40, 41]. Dabei kann Stofftransport über die Festkörper-Flüssigkeit Grenzfläche stattfinden und Phasengrenzen können sich verschieben. Z.B. kann ein Polymerbürstensubstrat unter einem Flüssigkeitstropfen oder unter dem Einfluss des sich ausbreitenden Dampfes schwellen (Abb. 8). Idealerweise sind diese Änderungen reversibel und beliebig wiederholbar - in der Praxis ist dies jedoch oft noch nicht der Fall. Bei allen adaptiven Oberflächen finden die relevanten dynamischen Prozesse im Substrat und die Dynamik der be- oder entnetzenden Flüssigkeit auf ähnlichen Zeitskalen statt, d.h., die direkte Kopplung dynamischer Prozesse führt zu neuen Phänomenen die verstanden werden sollen. Dies bedeutet, dass Änderungen externer Stimuli wie Temperatur oder Luftfeuchtigkeit dabei graduell erfolgen.

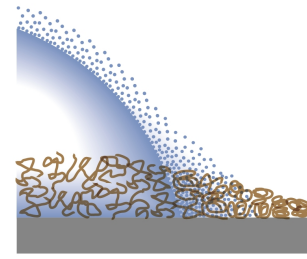


Abb. 8: Eine durch die Tropfenflüssigkeit und ihren Dampf gequollene Polymerbürste.

Einen Grenzfall ultradünner adaptiver und elastischer Oberflächenschichten bilden feste Substrate die mit Monolagen polymerer Bürsten überzogen sind [A13][41, 42, 43]. Im Falle sehr mobiler Bürsten lassen sich sogenannte „Flüssigkeits-ähnliche“ Oberflächen erzeugen, die sich durch sehr geringe laterale Adhäsionskräfte auszeichnen. Eine besonders hohe Mobilität weisen Si-O Gruppen in der Hauptkette des Polymers auf, weshalb PDMS-Bürsten oft als Modellsystem verwendet werden.

Eine Folge der Mobilität ist eine relativ schnelle Änderung der (Bürsten-)Filmdicke in der Drei-Phasen-Kontaktregion, d.h., das effektive Substratprofil ist adaptiv. Weiterhin wird erwartet, dass eine Ausrichtung der Bürstenmoleküle durch die Kontaktlinienbewegung zu zusätzlichen Anisotropieeffekten führt. Damit wird das dynamische Benetzungsverhalten maßgeblich durch die Geschwindigkeit der Adaption beeinflusst, d.h. es resultiert aus dem bislang weitestgehend unverstandenen Wechselspiel zwischen den intermolekularen Kräften der Beschichtung, dem Dampfdruck der Flüssigkeit und den Adhäsionswechselwirkungen.

2.5 Benetzung schaltbarer Oberflächen

Schaltbare Oberflächen ändern ihre Benetzungseigenschaften sehr schnell im Vergleich zur induzierten Benetzungsdynamik wenn externe Bedingungen verändert werden. Das heißt, dass die Benetzbarkeit sich durch Schalten einer äußeren Bedingung sprunghaft zwischen definierten Zuständen ändert. Das Schalten soll idealerweise auch reversibel und wiederholbar sein.

Damit eignen sich schaltbare Oberflächen beispielsweise ideal dafür, die Dynamik bei Änderung des Bewegungszustandes einer Benetzungsmorphologie zu untersuchen. Über die Einflüsse schnellen periodischen Schaltens auf die dynamische Benetzung ist bisher nur wenig bekannt. Es wurden zwar schaltbare Benetzbarkeitsratschen als Konzept für Flüssigkeitstransport vorgeschlagen [A14], aber noch nicht experimentell realisiert.

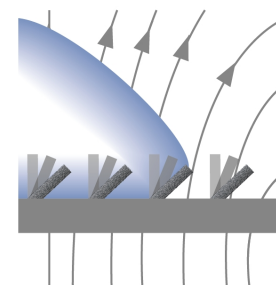


Abb. 9: Magnetisch schaltbare Säulenarrays.

Auch wenn in den vergangenen Jahren wesentliche Fortschritte erzielt wurden (siehe Überblick in [33, 32]), sind wir noch weit davon entfernt, die Dynamik des Schaltens und der Benetzungsmorphologien quantitativ zu verstehen. Ein solches Verständnis ist notwendig, um mit schaltbaren Oberflächen Flüssigkeit gezielt zu transportieren. Hier erwarten wir in den nächsten zehn Jahren wesentliche Neuerungen.

Aktives Schalten der Benetzung kann bei geeigneten (beschichteten) Oberflächen durch Licht [44, 45, 46, 47, 48, 49, 50, 51], externe elektrische [52, 53, 54, 55], oder magnetische Felder [56, 57, 58] realisiert werden (Abb. 9). Poly(N-isopropylacrylamide) [36, 41], oder kurz PNIPAM basierte Moleküle lassen sich durch eine Variation der Temperatur schalten. Schaltbare Benetzung resultiert aus einer Variation der Wechselwirkungen zwischen der Flüssigkeit und dem Substrat oder durch eine Änderung der Topographie [58, 59] (Abb. 9).

2.6 Benetzung mit Mischungen und Suspensionen

Neben einfachen niedermolekularen Flüssigkeiten sind auch Be- und Entnetzungsprozesse komplexer Flüssigkeiten hochrelevant. Für diese interagiert die Dynamik interner Freiheitsgrade mit der Dynamik der flexiblen, adaptiven oder schaltbaren Oberflächen. Deshalb sollen im SPP auch Mischungen niedermolekularer Flüssigkeiten, verdünnte Suspensionen und Tensidlösungen untersucht werden. Voraussetzung hierfür ist, dass die Grenzflächenkräfte die innere Struktur verändern, welche dann wiederum auf die Benetzungsprozesse zurückwirkt.

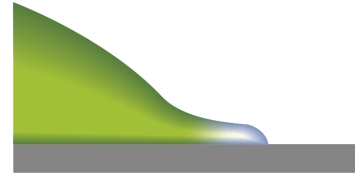


Abb. 10: Durch Grenzflächenkräfte induzierte lokale Entmischung.

Sogar das Gleichgewichtsbenetzungsverhalten homogener Mischungen verläuft oft anders als zunächst erwartet. Der Grund ist, dass die Grenzflächenkräfte eine lokale Phasenseparation nahe der Kontaktlinie und einen Vorläuferfilm (*precursor*) aus einer Komponente induzieren können [22, 60] (Abb. 10). Verwandte, für Tensidlösungen beobachtete Phänomene sind „Autophobie Effekte“ [61] und „Substrat-induzierte Kondensation“ [62, 63]. Sobald Komponenten der Mischung flüchtig sind, kommen zusätzlich noch Wechselwirkungen zwischen Benetzungsdynamik, partieller Verdunstung und Marangoniflüssen (Flüsse die durch Gradienten der Oberflächenenergie getrieben werden) hinzu [A12, A15][64, 65].

Die systematische theoretische Beschreibung der Wechselwirkung von Benetzung und Dynamik der inneren Flüssigkeitsstruktur ist momentan in Entwicklung - z.B. werden mesoskopische asymptotische Modelle (Dünnschicht-Theorien) für Filme und Tropfen von Mischungen einfacher Flüssigkeiten und Tensidlösungen auf homogenen, festen und inerten Oberflächen entwickelt [A16, A17] oder molekulardynamische Simulationen durchgeführt [66, 67]. Die Kombination mit den hier betrachteten Substraten mit innerer Dynamik wird bisher noch nicht betrachtet.

2.7 Neue experimentelle und theoretische Möglichkeiten

Mikroskopische Vorgänge in hoher Zeitauflösung sichtbar zu machen, ist eine der großen technischen Herausforderungen in den Naturwissenschaften. Nicht zuletzt deshalb ist die Benetzungsdynamik von flexiblen, adaptiven und schaltbaren Oberflächen bisher noch weitgehend unverstanden. Neue experimentelle Verfahren und die parallele Entwicklung längenskalenübergreifender theoretischer Methoden lassen jedoch erhebliche Fortschritte erwarten. In den letzten zehn Jahren wurden verschiedene Techniken neu- und bestehende Techniken weiterentwickelt, so dass sie jetzt verfügbar sind, um fundamentale Fragen zum Wechselspiel von Benetzung und Substratdynamik zu beantworten. Dies betrifft sowohl die Entwicklung neuartiger Verfahren zur Herstellung nano- und mikrostrukturierter Oberflächen mit maßgeschneiderten Eigenschaften, als auch die Verbesserung der Methoden zur physikalischen Charakterisierung, der theoretischen Beschreibung und numerischen Simulation von Benetzungsprozessen.

Bei den Herstellungsverfahren sind beispielsweise die sich rasant entwickelnden dreidimensionalen Drucktechniken mit Sub-Mikrometer Präzision und neue photolithographische Prozesse, etwa zur Herstellung von hinterschnittenen Strukturen, die Erzeugung von Nanostrukturen („Nanograss“) über Deep Reactive Ion Etching (DRIE) oder Mikroreplikationsverfahren zu nen-

nen [68]. Diese Verfahren werden mit Prozessen kombiniert, die es erlauben, die Oberflächen auch chemisch maßzuschneidern. Mittels Elektronenstrahlolithographie und fokussierter Ionenstrahlen lassen sich inzwischen auch Flächen von mehreren Quadratzentimetern strukturieren. Ferner wurden Verfahren zur Nanostrukturierung entwickelt, die auf spontaner Strukturbildung beruhen (z.B. kolloidale Selbstassemblierung) [69], oder auf einem Mix aus Lithographie und spontaner Strukturbildung.

Neuartige Mikroskopietechniken wie konfokale STED (*stimulated emission depletion*) Mikroskopie, Interferenzmikroskopie, sowie *environmental* Rasterelektronenmikroskopie wurden vor allem für Anwendungen in den Biowissenschaften entwickelt. Die Bedeutung hochauflösender Mikroskopie belegt der Nobelpreis für Chemie 2014, u.a. vergeben an Stefan Hell [70]. Zurzeit werden diese neuen Mikroskopiemethoden adaptiert und weiterentwickelt, um Benetzung zu untersuchen [A18][71]. Die Zielsetzung ist dabei, eine Verbesserung der räumlichen Auflösungen bei gleichzeitig schnellerer Bildfolge zu erreichen [72, 73]. Bei der Interferenzmikroskopie ist die zeitliche Auflösung im Wesentlichen durch die Geschwindigkeit verfügbarer Hochgeschwindigkeitskameras limitiert, welche in den letzten Jahren deutlich gestiegen ist [74, 75, 76].

Die Kombination von STED mit der konfokalen Mikroskopie lässt eine Ortsauflösung von weniger als 100 nm bei Bildraten von einigen Bildern pro Sekunde erwarten. Auch sind Methoden zur Bestimmung dreidimensionaler Flussgeschwindigkeitsfelder (stereo- und holographische *particle imaging velocimetry*) mittlerweile entsprechend leistungsfähig. Durch speziell entwickelte Probenkammern und entsprechend angepasste Detektoren ist es mit der *environmental* Rasterelektronenmikroskopie nun möglich, Kondensation und Verdunstung von Wasser auf strukturierten Oberflächen in situ zu untersuchen [77, 78, 79]. Abbildungsgeschwindigkeit und räumliches Auflösungsvermögen der Röntgenmikroskopie wurden derart gesteigert, dass dynamische Prozesse inzwischen in Echtzeit abgebildet werden können [80, 81]. Damit lassen sich Benetzungsvorgänge auch auf Medien untersuchen, welche im sichtbaren Spektralbereich nicht transparent sind.

Wesentliche experimentelle Fortschritte zur Visualisierung der Kontaktwinkelhysterese auf hydrophoben Oberflächen liefern die konfokale Laser-Raster-Mikroskopie [A18][82], die Röntgentomographie [A19][83] und die *environmental* Rasterelektronenmikroskopie [84]. Die Änderungen der lateralen Adhäsionskräfte lassen sich nun zeitlich verfolgen und das Fließprofil im Benetzungsring und in der Nähe der Drei-Phasen-Kontaktlinie orts- und zeitaufgelöst visualisieren. Diese Fortschritte erlauben detaillierte Untersuchungen drei-dimensionaler mikroskopischer Grenzflächenstrukturen und eröffnen neue Möglichkeiten des quantitativen Vergleichs experimenteller, theoretischer und numerischer Daten.

Die typischen Längen- und Zeitskalen relevanter dynamischer Prozesse überbrücken einen Bereich von einigen Nanometern bis zu Millimetern, bzw. von sub-Millisekunden bis zu einigen Sekunden. Daher werden auch theoretische Modelle und entsprechende numerische Verfahren benötigt, die in der Lage sind, dieses weite Spektrum von Längen- und Zeitskalen abzudecken. Die verfügbaren Methoden reichen von atomistischen oder vergrößerten Monte-Carlo- und molekulardynamischen Kraftfeldsimulationen über Gittergasmethoden hin zu einem Spektrum an Simulationsmethoden für mikroskopische, mesoskopische und makroskopische Kontinuumsmodelle. Zur Beschreibung von Benetzung werden Modelle benötigt, welche verschiedene Umwandlungs- und Transportprozesse berücksichtigen und es z.B. erlauben, strukturierte und/oder flexible Substrate zu inkorporieren. Die Berücksichtigung der Dampfphase in der theoretischen Beschreibung von Benetzung bildet immer noch eine große Herausforderung.

Wesentliche Vorarbeiten liefern zum Beispiel atomistische Kraftfeldberechnungen [85, 86]. Sie erlauben quantitative Angaben zu den entropischen und enthalpischen Beiträgen der Oberflächen- und Flüssigkeitsmoleküle zur Tropfenkonfiguration. Darauf basierend liefern molekulardynamische Simulationen quantitative Informationen zur Dynamik von Tropfen auf flexiblen oder mikrostrukturierten Oberflächen [87, 88] oder von Tropfen binärer Mischungen [89].

Mit solchen Simulationen ist es jedoch in der Regel nicht möglich, Prozesse auf den relevanten mesoskopischen und makroskopischen Längen- und Zeitskalen zu untersuchen. Stattdessen bieten sich mikroskalige Kontinuumsmodelle wie die (dynamische) Dichtefunktionaltheorie [90, 91] an. Auch mesoskalige Simulationsmethoden, z.B. auf Basis der Gitter-Boltzmann Methode [92] oder der Dissipativen Partikeldynamik [93, 94], kommen in Betracht. Methoden der Computational Fluid Dynamics [95] und asymptotische hydrodynamische Modelle [A17] schließen die Lücke zur makroskopischen Beschreibung.

Eine Kombination dieser Methoden erlaubt es, quasi-statische und dynamische Benetzung auf den verschiedenen relevanten Längen- und Zeitskalen numerisch zu untersuchen. Mikroskopische molekulardynamische und Lattice Boltzmann Methoden sind z.B. in ESPResSo [96] implementiert während meso- und makroskopische kontinuierliche Modelle, z.B. mit den Paketen Gerris [97], Open Foam [98], Dune [99], oomph-lib [100] und Surface Evolver [101] mit verschiedenen Algorithmen numerisch untersucht werden können. Letzterer wurde ursprünglich für statische Berechnungen konzipiert und in den letzten Jahren maßgeblich erweitert, so dass auch quasi-statische dynamische Prozesse betrachtet werden können [102]. Auch direkte Pfadkontinuierungstechniken [103, 104] finden erste Anwendung für Benetzungssphänomene [A1]. Wichtige Fortschritte sind ebenfalls zu verzeichnen bei der gleichzeitigen Simulationen auf unterschiedlichen Längen- und Zeitskalen mit hybriden und skalenübergreifenden Methoden, wie z.B. der Kombination von mikroskopischen und meso-/makroskopischen Techniken durch Parameter-Weiterreichen (*parameter passing*). Hier werden Eigenschaften wie Dichte, Grenzflächen- und Adhäsionsenergien, Schlupflänge und Viskosität in mikroskopischen Modellen bestimmt und an mesoskopische oder makroskopische Modelle übergeben [A3, A4].

3 Themenbezogene Publikationen der Antragstellenden

- [A1] S. Engelinkemper, M. Wilczek, S. V. Gurevich, and **U. Thiele**. Morphological transitions of sliding drops - dynamics and bifurcations. *Phys. Rev. Fluids*, 1:073901, 2016.
- [A2] N. Gao, F. Geyer, D.W. Pilar, S. Wooh, **D. Vollmer**, **H.-J. Butt**, and R. Berger. How drops start sliding over solid surfaces. *Nat. Phys.*, 2017. at press.
- [A3] A. P. Hughes, **U. Thiele**, and A. J. Archer. Influence of the fluid structure on the binding potential: Comparing liquid drop profiles from density functional theory with results from mesoscopic theory. *J. Chem. Phys.*, 146:064705, 2017.
- [A4] N. Tretyakov, M. Müller, D. Todorova, and **U. Thiele**. Parameter passing between molecular dynamics and continuum models for droplets on solid substrates: The static case. *J. Chem. Phys.*, 138:064905, 2013.
- [A5] S. Bommer, F. Cartellier, S. Jachalski, D. Peschka, **R. Seemann**, and B. Wagner. Droplets on liquids and their journey into equilibrium. *Eur. Phys. J. E*, 36:87, 2013.
- [A6] E. Bonaccorso, **H.-J. Butt**, B. Hankeln, B. Niesenhaus, and K. Graf. Fabrication of microvessels and microlenses from polymers by solvent droplets. *Appl. Phys. Lett.*, 86:124101, 2005.
- [A7] **S. Karpitschka**, A. Pandey, L.A. Lubbers, J.H. Weijs, L. Botto, S. Das, B. Andreotti, and J.H. Snoeijer. Liquid drops attract or repel by the inverted cheerios effect. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 113:7403–7407, 2016.
- [A8] **S. Karpitschka**, S. Das, M. van Gorcum, H. Perrin, B. Andreotti, and J.H. Snoeijer. Droplets move over viscoelastic substrates by surfing a ridge. *Nat. Commun.*, 6:7891, 2015.
- [A9] F. Schellenberger, J. Xie, N. Encinas, A. Hardy, M. Klapper, P. Papadopoulos, **H.-J. Butt**, and **D. Vollmer**. Direct observation of drops on slippery lubricant-infused surfaces. *Soft Matter*, 11:7617–7626, 2015.
- [A10] M. Tress, **S. Karpitschka**, P. Papadopoulos, H.H. Snoeijer, **D. Vollmer**, and **H.-J. Butt**. Shape of a sessile drop on a flat surface covered with a liquid film. *Soft Matter*, 13:3760–3767, 2017.
- [A11] F. Schellenberger, N. Encinas, **D. Vollmer**, and **H.-J. Butt**. How water advances on superhydrophobic surfaces. *Phys. Rev. Lett.*, 116:096101, 2016.

- [A12] **S. Karpitschka**, F. Liebig, and H. Riegler. Marangoni contraction of evaporating sessile droplets of binary mixtures. *Langmuir*, 31:4682–4687, 2017.
- [A13] C. Tonhauser, A.A. Golriz, C. Moers, R. Klein, **H.-J. Butt**, and H. Frey. Stimuli-responsive y-shaped polymer brushes based on junction-point-reactive block copolymers. *Adv. Mater.*, 24:5559–5563, 2012.
- [A14] K. John and **U. Thiele**. Liquid transport generated by a flashing field-induced wettability ratchet. *Appl. Phys. Lett.*, 90:264102, 2007.
- [A15] **S. Karpitschka** and H. Riegler. Noncoalescence of sessile drops from different but miscible liquids: Hydrodynamic analysis of the twin drop contour as a self-stabilizing traveling wave. *Phys. Rev. Lett.*, 109:066103, 2012.
- [A16] **U. Thiele**, D. V. Todorova, and H. Lopez. Gradient dynamics description for films of mixtures and suspensions: Dewetting triggered by coupled film height and concentration fluctuations. *Phys. Rev. Lett.*, 111:117801, 2013.
- [A17] **U. Thiele**, A.J. Archer, and L.M. Pismen. Gradient dynamics models for liquid films with soluble surfactant. *Phys. Rev. Fluids*, 1:083903, 2016.
- [A18] P. Papadopoulos, L. Mammen, X. Deng, **D. Vollmer**, and **H.-J. Butt**. How superhydrophobicity breaks down. *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.*, 110:3254–3258, 2013.
- [A19] M. Scheel, **R. Seemann**, M. Brinkmann, M. Di Michiel, A. Sheppard, B. Breidenbach, and S. Herminghaus. Morphological clues to wet granular pile stability. *Nat. Mater.*, 7:189–193, 2008.
- [A20] **R. Seemann**, M. Brinkmann, S. Herminghaus, K. Khare, B.M. Law, S. McBride, K. Kostourou, E. Gurevich, S. Bommer, C. Herrmann, and D. Michler. Wetting morphologies and their transitions in grooved substrates. *J. Phys. Cond. Mat.*, 23:184108, 2011.

4 Literaturverzeichnis

- [1] W. B. Hardy. Historical notes upon surface energy and forces of short range. *Nature*, 109:375–378, 1922.
- [2] P.-G. de Gennes, F. Brochard-Wyart, and D. Quéré. *Capillarity and wetting phenomena: Drops, bubbles, pearls, waves*. Springer, New York, 2004.
- [3] J.H. Snoeijer and B. Andreotti. Moving contact lines: Scales, regimes, and dynamical transitions. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 45:269–292, 2013.
- [4] D. Bonn, J. Eggers, J. Indekeu, J. Meunier, and E. Rolley. Wetting and spreading. *Rev. Mod. Phys.*, 81:739–805, 2009.
- [5] P.-G. de Gennes. Wetting: Statics and dynamics. *Rev. Mod. Phys.*, 57:827–863, 1985.
- [6] E. B. Dussan. On the spreading of liquids on solid surfaces: Static and dynamic contact lines. *Ann. Rev. Fluid Mech.*, 11:371–400, 1979.
- [7] K. Kawasaki. Study of wettability of polymers by sliding of water drop. *J. Colloid Sci.*, 15:402 – 407, 1960.
- [8] A. I. ElSherbini and A. M. Jacobi. Retention forces and contact angles for critical liquid drops on non-horizontal surfaces. *J. Coll. Interf. Sci.*, 299:841–849, 2006.
- [9] C. Antonini, F. J. Carmona, E. Pierce, M. Marengo, and A. Amirfazil. General methodology for evaluating the adhesion force of drops and bubbles on solid surfaces. *Langmuir*, 25:6143–6154, 2009.
- [10] B.A. Al Zaitone and C. Tropea. Evaporation of pure liquid droplets: Comparison of droplet evaporation in an acoustic field versus glass-filament. *Chem. Eng. Sci.*, 66:3914–3921, 2011.
- [11] V. M. Starov and M. G. Velarde. Surface forces and wetting phenomena. *J. Phys.-Condens. Matter*, 21:464121, 2009.
- [12] R. Pericet-Camara, G.K. Auernhammer, K. Koynov, S. Lorenzoni, R. Raiteri, and E. Bonaccorso. Solid-supported thin elastomer films deformed by microdrops. *Soft Matter*, 5:3611–3617, 2009.
- [13] R.W. Style and E.R. Dufresne. Static wetting on deformable substrates, from liquids to soft solids. *Soft Matter*, 8:7177–7184, 2012.

- [14] L.A. Lubbers, J.H. Weijs, L. Botto, S. Das, B. Andreotti, and J.H. Snoeijer. Drops on soft solids: free energy and double transition of contact angles. *J. Fluid Mech.*, 747:R1, 2014.
- [15] E. R. Jerison, Y. Xu, L. A. Wilen, and E. R. Dufresne. Deformation of an elastic substrate by a three-phase contact line. *Phys. Rev. Lett.*, 106(18):186103, 2011.
- [16] R. W. Style, R. Boltyskiy, Y. Che, J. S. Wettlaufer, L. A. Wilen, and E. R. Dufresne. Universal deformation of soft substrates near a contact line and the direct measurement of solid surface stresses. *Phys. Rev. Lett.*, 110:066103, Feb 2013.
- [17] C. Duprat, S. Protiere, A.Y. Beebe, and H.A. Stone. Wetting of flexible fibre arrays. *Nature*, 482:510–513, 2012.
- [18] N. R. Bernardino and S. Dietrich. Complete wetting of elastically responsive substrates. *Phys. Rev. E*, 85, 2012.
- [19] A. Pandey, S. Karpitschka, L.A. Lubbers, J.H. Weijs, L. Botto, S. Das, B. Andreotti, and J.H. Snoeijer. Dynamical theory of the inverted cheerios effect. *Soft Matter*, 2017.
- [20] D. Long, A. Ajdari, and L. Leibler. Static and dynamic wetting properties of thin rubber films. *Langmuir*, 12:5221–5230, 1996.
- [21] M. Sokuler, G.K. Auernhammer, M. Roth, C.J. Liu, E. Bonaccorso, and H.-J. Butt. The softer the better: Fast condensation on soft surfaces. *Langmuir*, 26:1544–1547, 2010.
- [22] R. Fondecave and F. Brochard-Wyart. Wetting laws for polymer solutions. *Europhys. Lett.*, 37:115–120, 1997.
- [23] T. Kajiya, A. Daerr, T. Narita, L. Royon, F. Lequeux, and L. Limat. Advancing liquid contact line on visco-elastic gel substrates: stick-slip vs. continuous motions. *Soft Matter*, 9:454–461, 2013.
- [24] T. Kajiya, P. Brunet, L. Royon, A. Daerr, M. Receveur, and L. Limat. A liquid contact line receding on a soft gel surface: dip-coating geometry investigation. *Soft Matter*, 10:8888–8895, 2014.
- [25] T.-S. Wong, S. H. Kang, S. K. Y. Tang, E. J. Smythe, B. D. Hatton, A. Grinthal, and J. Aizenberg. Bioinspired self-repairing slippery surfaces with pressure-stable omniphobicity. *Nature*, 477:443–447, 2011.
- [26] J.D. Smith, R. Dhiman, S. Anand, E. Reza-Garduno, R.E. Cohen, G.H. McKinley, and K.K. Varanasi. Droplet mobility on lubricant-impregnated surfaces. *Soft Matter*, 9:1772–1780, 2013.
- [27] J.T. Luo, N.R. Geraldi, J.H. Guan, G. McHale, G.G. Wells, and Y.Q. Fu. Slippery liquid-infused porous surfaces and droplet transportation by surface acoustic waves. *Phys. Rev. Appl.*, 7:014017, 2017.
- [28] D. Daniel, J. V. I. Timonen, R. Li, S. J. Velling, and J. Aizenberg. Oleoplaning droplets on lubricated surfaces. *Nat. Phys.*, 13:1020–1025, 2017.
- [29] A.B.D. Cassie and S. Baxter. Large contact angles of plant and animal surfaces. *Nature*, 155:21–22, 1945.
- [30] G.E. Fogg. Diurnal fluctuation in a physical property of leaf cuticle. *Nature*, 154:515, 1944.
- [31] R. H. A. Ras and A. Marmur, editors. *Non-wettable Surfaces- Theory, Preparation and Applications*. Soft Matter Series. The Royal Society of Chemistry, 2017.
- [32] F. Guo and Z.G. Guo. Inspired smart materials with external stimuli responsive wettability: a review. *RSC Adv.*, 6:36623–36641, 2016.
- [33] M. A. Cohen-Stuart, W. T. S. Huck, J. Genzer, M. Muller, C. Ober, M. Stamm, G. B. Sukhorukov, I. Szleifer, V. V. Tsukruk, M. Urban, F. Winnik, S. Zauscher, I. Luzinov, and S. Minko. Emerging applications of stimuli-responsive polymer materials. *Nat. Mater.*, 9:101–113, 2010.
- [34] X. Yu, Z.Q. Wang, Y.G. Jiang, F. Shi, and X. Zhang. Reversible ph-responsive surface: From superhydrophobicity to superhydrophilicity. *Adv. Mater.*, 17:1289–1293, 2005.
- [35] L.B. Zhang, Z.H. Zhang, and P. Wang. Smart surfaces with switchable superoleophilicity and superoleophobicity in aqueous media: toward controllable oil/water separation. *NPG Asia Materials*, 4:e8, 2012.
- [36] Y. Stetsyshyn, J. Zemla, O. Zolobko, K. Fornal, A. Budkowski, A. Kostruba, V. Donchak, K. Harhay, K. Awsiuik, J. Rysz, A. Bernasik, and S. Voronov. Temperature and ph dual-responsive coatings of oligoperoxide-graft-poly (n-isopropylacrylamide): Wettability, morphology, and protein adsorption. *J. Colloid Interface Sci.*, 387:95–105, 2012.

- [37] M.J. Cheng, Q. Liu, G.N. Ju, Y.J. Zhang, L. Jiang, and F. Shi. Bell-shaped superhydrophilic-superhydrophobic-superhydrophilic double transformation on a pH-responsive smart surface. *Adv. Mater.*, 26:306–310, 2014.
- [38] K. Manabe, T. Matsubayashi, M. Tenjimbayashi, T. Moriya, Y. Tsuge, K.H. Kyung, and S. Shiratori. Controllable broadband optical transparency and wettability switching of temperature activated solid/liquid-infused nanofibrous membranes. *ACS Nano*, 10:9387–9396, 2016.
- [39] L. Chen, M. J. Liu, L. Lin, T. Zhang, J. Ma, Y. L. Song, and L. Jiang. Thermal-responsive hydrogel surface: tunable wettability and adhesion to oil at the water/solid interface. *Soft Matter*, 6:2708–2712, 2010.
- [40] Y. Stetsyshyn, J. Raczowska, O. Lishchynskyi, A. Bernasik, A. Kostruba, K. Harhay, H. Ohar, M. M. Marzec, and A. Budkowski. Temperature-controlled three-stage switching of wetting, morphology, and protein adsorption. *ACS Appl. Mater. Interfaces*, 9:12035–12045, 2017.
- [41] K. D. Pangilinan, A. C. Leon, J. D. Mangadlao, E. Baer, and R. C. Advincula. Grafting of a stimuli responsive polymer on nanolayered coextruded ps/PCI films by surface initiated polymerization. *Macromol. Mater. Eng.*, 301:870–875, 2016.
- [42] L. Mahadevan, M. Adda-Bedia, and Y. Pomeau. Four-phase merging in sessile compound drops. *J. Fluid Mech.*, 451:411–420, 2002.
- [43] S. Minko, M. Müller, M. Motornov, M. Nitschke, K. Grundke, and M. Stamm. Two-level structured self-adaptive surfaces with reversibly tunable properties. *J. Am. Chem. Soc.*, 125:3896–3900, 2003.
- [44] K. Ichimura, S.K. Oh, and M. Nakagawa. Light-driven motion of liquids on a photoresponsive surface. *Science*, 288:1624–1626, 2000.
- [45] J. Groten, C. Bunte, and J. Rühe. Light-induced switching of surfaces at wetting transitions through photoisomerization of polymer monolayers. *Langmuir*, 28:15038–15046, 2012.
- [46] L. Chen, C. L. He, Y. E. Huang, J. B. Huang, Y. Z. Zhang, and Y. Gao. POSS-based fluorinated azobenzene-containing polymers: Photo-responsive behavior and evaluation of water repellency. *J. Appl. Polym. Sci.*, 133:43540, 2016.
- [47] G. Kwon, D. Panchanathan, S. R. Mahmoudi, M. A. Gondal, G. H. McKinley, and K. K. Varanasi. Visible light guided manipulation of liquid wettability on photoresponsive surfaces. *Nat. Commun.*, 8, 2017.
- [48] R. Rosario, D. Gust, A.A. Garcia, M. Hayes, J.L. Taraci, T. Clement, J.W. Dailey, and S.T. Picraux. Lotus effect amplifies light-induced contact angle switching. *J. Phys. Chem. B*, 108:12640–12642, 2004.
- [49] G. Caputo, B. Cortese, C. Nobile, M. Salerno, R. Cingolani, G. Gigli, P. D. Cozzoli, and A. Athanassiou. Reversibly light-switchable wettability of hybrid organic/inorganic surfaces with dual micro-/nanoscale roughness. *Adv. Funct. Mater.*, 19:1149–1157, 2009.
- [50] S. Hoshian, V. Jokinen, K. Hjort, R. H. A. Ras, and S. Franssila. Amplified and localized photoswitching of TiO_2 by micro- and nanostructuring. *ACS Appl. Materials Interfaces*, 7:15593–15599, 2015.
- [51] X. J. Feng, L. Feng, M. H. Jin, J. Zhai, L. Jiang, and D. B. Zhu. Reversible super-hydrophobicity to super-hydrophilicity transition of aligned ZnO nanorod films. *J. Am. Chem. Soc.*, 126:62–63, 2004.
- [52] J.A.M. Sondaghuethorst and L.G.J. Fokkink. Electrical double-layers on thiol-modified polycrystalline gold electrodes. *J. Electroanal. Chem.*, 367:49–57, 1994.
- [53] M. W. J. Prins, W. J. J. Welters, and J. W. Weekamp. Fluid control in multichannel structures by electrocapillary pressure. *Science*, 291:277–280, 2001.
- [54] F. Mugele, M. Duits, and D. van den Ende. Electrowetting: A versatile tool for drop manipulation, generation, and characterization. *Adv. Colloid Interface Sci.*, 161:115–123, 2010.
- [55] Z. Brabcova, G. McHale, G.G. Wells, C.V. Brown, and M.I. Newton. Electric field induced reversible spreading of droplets into films on lubricant impregnated surfaces. *Appl. Phys. Lett.*, 110:121603, 2017.
- [56] D.M. Drotlef, P. Blumler, P. Papadopoulos, and A. del Campo. Magnetically actuated micropatterns for switchable wettability. *ACS Appl. Mater. Interfaces*, 6:8702–8707, 2014.

- [57] S. Tenneti, S.G. Subramanian, M. Chakraborty, G. Soni, and S. DasGupta. Magnetowetting of ferrofluidic thin liquid films. *Sci Rep*, 7:44738, 2017.
- [58] Y. Huang, B.B. Stogin, N. Sun, J. Wang, S.K. Yang, and T.S. Wong. A switchable cross-species liquid repellent surface. *Adv. Mater.*, 29:1604641, 2017.
- [59] W. Wang, J. Salazar, H. Vahabi, A. Joshi-Imre, W.E. Voit, and A.K. Kota. Metamorphic superomniphobic surfaces. *Adv. Mater.*, 29:1700295, 2017.
- [60] R. Fondecave and F. Brochard-Wyart. Application of statistical mechanics to the wetting of complex liquids. *Physica A*, 274:19–29, 1999.
- [61] B. Bera, M.H.G. Duits, M.A.C. Stuart, D. van den Ende, and F. Mugele. Surfactant induced autophobing. *Soft Matter*, 12:4562–4571, 2016.
- [62] M. Gleiche, L. F. Chi, and H. Fuchs. Nanoscopic channel lattices with controlled anisotropic wetting. *Nature*, 403:173–175, 2000.
- [63] M. H. Köpf, S. V. Gurevich, R. Friedrich, and U. Thiele. Substrate-mediated pattern formation in monolayer transfer: a reduced model. *New J. Phys.*, 14:023016, 2012.
- [64] G. Guena, C. Poulard, and A. M. Cazabat. Evaporating drops of alkane mixtures. *Colloid Surf. A-Physicochem. Eng. Asp.*, 298:2–11, 2007.
- [65] J.R.E. Christy, Y. Hamamoto, and K. Sefiane. Flow transition within an evaporating binary mixture sessile drop. *Phys. Rev. Lett.*, 106:205701, 2011.
- [66] X.P. Ren, C.L. Wang, B. Zhou, H.P. Fang, J. Hu, and R.H. Zhou. Ethanol promotes dewetting transition at low concentrations. *Soft Matter*, 9:4655–4660, 2013.
- [67] A. Hens, K. Mondal, and D. Bandyopadhyay. Self-organized pathways to nanopatterns exploiting the instabilities of ultrathin confined bilayers. *Phys. Rev. E*, 87:022405, 2013.
- [68] V. Kondrashov and J. Rühe. Microcones and nanograss: Toward mechanically robust superhydrophobic surfaces. *Langmuir*, 30:4342–4350, 2014.
- [69] T. Kraus, D. Brodoceanu, N. Pazos-Perez, and A. Fery. Colloidal surface assemblies: Nanotechnology meets bioinspiration. *Adv. Func. Mater.*, 23:4529–4541, 2013.
- [70] S. W. Hell. Far-field optical nanoscopy. *Science*, 316:1153–1158, 2007.
- [71] F. Bossler and E. Koos. Structure of particle networks in capillary suspensions with wetting and nonwetting fluids. *Langmuir*, 32:1489–1501, 2016.
- [72] V. Westphal, S. O. Rizzoli, M. A. Lauterbach, D. Kamin, R. Jahn, and S. W. Hell. Video-rate far-field optical nanoscopy dissects synaptic vesicle movement. *Science*, 320:246–249, 2008.
- [73] P. W. Winter and H. Shroff. Faster fluorescence microscopy: advances in high speed biological imaging. *Curr Opinion Chem. Bio.*, 20:46–53, 2014.
- [74] J. de Ruiter, J. M. Oh, D. van den Ende, and F. Mugele. Dynamics of collapse of air films in drop impact. *Phys. Rev. Lett.*, 108, 2012.
- [75] A. L. Yarin, I. V. Roisman, and C. Tropea. *Collision Phenomena in Liquids and Solids*. Cambridge University Press, Cambridge, 2017.
- [76] M. Shirota, M. A. J. van Limbeek, C. Sun, A. Prosperetti, and D. Lohse. Dynamic leidenfrost effect: Relevant time and length scales. *Phys. Rev. Lett.*, 116:064501, 2016.
- [77] K. Rykaczewski, T. Landin, M. L. Walker, J. H. J. Scott, and K. K. Varanasi. Direct imaging of complex nano- to microscale interfaces involving solid, liquid, and gas phases. *ACS Nano*, 6:9326–9334, 2012.
- [78] Y. T. Cheng, D. E. Rodak, A. Angelopoulos, and T. Gacek. Microscopic observations of condensation of water on lotus leaves. *Appl. Phys. Lett.*, 87:194112, 2005.
- [79] N. Miljkovic, R. Enright, and E. N. Wang. Effect of droplet morphology on growth dynamics and heat transfer during condensation on superhydrophobic nanostructured surfaces. *ACS Nano*, 6:1776–1785, 2012.
- [80] S. J. Park, B. M. Weon, J. S. Lee, J. Lee, J. Kim, and J. H. Je. Visualization of asymmetric wetting ridges on soft solids with x-ray microscopy. *Nature commun.*, 5:4369–4369, 2014.
- [81] G. Agbaglah and R. D. Deegan. Growth and instability of the liquid rim in the crown splash regime. *Journal of Fluid Mechanics*, 752:485–496, 2014.

- [82] P. Papadopoulos, X. Deng, L. Mammen, D.M. Drotlef, G. Battagliarin, C. Li, K. Mullen, K. Landfester, A. del Campo, H.-J. Butt, and D. Vollmer. Wetting on the microscale: Shape of a liquid drop on a microstructured surface at different length scales. *Langmuir*, 28:8392–8398, 2012.
- [83] M. Scheel, R. Seemann, M. Brinkmann, M. Di Michiel, A. Sheppard, and S. Herminghaus. Liquid distribution and cohesion in wet granular assemblies beyond the capillary bridge regime. *J. Phys.-Condes. Matter*, 20:494236, 2008.
- [84] A. T. Paxson and K. K. Varanasi. Self-similarity of contact line depinning from textured surfaces. *Nat. Commun.*, 4, 2013.
- [85] F. Leroy and F. Mueller-Plathe. Can continuum thermodynamics characterize wenzel wetting states of water at the nanometer scale? *J. Chem. Theo. Comp.*, 8:3724–3732, 2012.
- [86] A. Giacomello, M. Chinappi, S. Meloni, and C. M. Casciola. Metastable wetting on superhydrophobic surfaces: Continuum and atomistic views of the cassie-baxter-wenzel transition. *Phys. Rev. Lett.*, 109, 2012.
- [87] F.C. Wang and Y.P. Zhao. Contact angle hysteresis at the nanoscale: a molecular dynamics simulation study. *Colloid Polym. Sci.*, 291:307–315, 2013.
- [88] N. Tretjakov and M. Müller. Correlation between surface topography and slippage: a Molecular Dynamics study. *Soft Matter*, 9:3613–3623, 2013.
- [89] D. R. Heine, G. S. Grest, and E. B. Webb. Spreading dynamics of polymer nanodroplets in cylindrical geometries. *Phys. Rev. E*, 70:011606, 2004.
- [90] A. J. Archer and M. Rauscher. Dynamical density functional theory for interacting brownian particles: Stochastic or deterministic? *J. Phys. A-Math. Gen.*, 37:9325–9333, 2004.
- [91] J.-P. Hansen and I. R. McDonald. *Theory of simple liquids*. Academic Press, London, 3rd edition edition, 2006.
- [92] H. Kusumaatmaja and J.M. Yeomans. Modeling contact angle hysteresis on chemically patterned and superhydrophobic surfaces. *Langmuir*, 23:6019–6032, 2007.
- [93] J.L. Jones, M. Lal, J.N. Ruddock, and N.A. Spenley. Dynamics of a drop at a liquid/solid interface in simple shear fields: A mesoscopic simulation study. *Faraday Discuss.*, 112:129–142, 1999.
- [94] J. Smiatek, M. Sega, C. Holm, U. D. Schiller, and F. Schmid. Mesoscopic simulations of the counterion-induced electro-osmotic flow: A comparative study. *J. Chem. Phys.*, 130, 2009.
- [95] T.J. Chung. *Computational Fluid Dynamics*. Cambridge University Press, 2010.
- [96] J.D. Halverson, T. Brandes, O. Lenz, A. Arnold, S. Bevc, V. Starchenko, K. Kremer, T. Stuehn, and D. Reith. ESPResSo++: A modern multiscale simulation package for soft matter systems. *Comput. Phys. Commun.*, 184:1129–1149, 2013.
- [97] Stéphane Popinet. Numerical Models of Surface Tension. *Ann. Rev. Fluid Mech.*, 50:1 – 28, 2018.
- [98] openCFD Ltd. OpenFOAM - the open source CFD toolbox. <http://www.openfoam.com>, last accessed 7.9.2017.
- [99] P. Bastian, M. Blatt, A. Dedner, C. Engwer, R. Klöfkor, R. Kornhuber, M. Ohlberger, and O. Sander. A generic grid interface for parallel and adaptive scientific computing. Part I: abstract framework. *Computing*, 82:103–119, 2008.
- [100] M. Heil and A. L. Hazel. *oomph-lib – An Object-Oriented Multi-Physics Finite-Element Library*, pages 19–49. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2006.
- [101] K.A. Brakke. The surface evolver and the stability of liquid surfaces. *Phil. Trans. Royal Soc. A*, 354:2143–2157, 1996.
- [102] C. Semprebon and M. Brinkmann. On the onset of motion of sliding drops. *Soft Matter*, 10:3325–3334, 2014.
- [103] H. A. Dijkstra, F. W. Wubs, A. K. Cliffe, E. Doedel, I. F. Dragomirescu, B. Eckhardt, A. Y. Gelfgat, A. Hazel, V. Lucarini, A. G. Salinger, E. T. Phipps, J. Sanchez-Umbria, H. Schuttelaars, L. S. Tuckerman, and U. Thiele. Numerical bifurcation methods and their application to fluid dynamics: Analysis beyond simulation. *Commun. Comput. Phys.*, 15:1–45, 2014.
- [104] H. Uecker, D. Wetzel, and J.D.M. Rademacher. pde2path-a mat lab package for continuation and bifurcation in 2D elliptic systems. *Numer. Math.-Theory Methods Appl.*, 7:58–106, 2014.

5 Inhaltliche Begründung unter Berücksichtigung der Programmziele

Der sehr gute Forschungs- und Wissensstand in Deutschland zur Benetzung homogener, fester und inerter Oberflächen bildet eine ideale Voraussetzung für die koordinierte Untersuchung der Be- und Entnetzungsdynamik auf flexiblen, adaptiven und schaltbaren Oberflächen. Für die Herstellung und Charakterisierung solcher Oberflächen sind in den letzten Jahren zahlreiche neue Methoden entwickelt oder verfügbar gemacht worden. Auch sind rasante Fortschritte bei vielen Mikroskopiertechniken zu verzeichnen, die es ermöglichen Benetzungsvorgänge mit höherer Orts- und Zeitauflösung abzubilden als jemals zuvor. Computer und numerische Verfahren sind heute so leistungsfähig, dass quantitative Vergleiche zwischen Experiment und numerischer Simulation selbst für dynamische Prozesse auf komplexen Substraten möglich werden. Dies gründet sich auch auf erhebliche Fortschritte bei Längenskalen-übergreifenden theoretischen Methoden zur Modellierung der Nichtgleichgewichtsdynamik von Flüssigkeiten und weicher Materie im Allgemeinen. Mit diesen Entwicklungen ist ein Punkt erreicht, an dem ein hoch-kooperatives interdisziplinäres Schwerpunktprogramm den weiteren Fortschritt erheblich beschleunigen wird.

5.1 Originalität der wissenschaftlichen Fragestellungen

Gegenstand dieses Schwerpunktes ist die dynamische Be- und Entnetzung flexibler, adaptiver und schaltbarer Oberflächen mit einfachen niedermolekularen und ausgewählten komplexen Flüssigkeiten (Abb. 11). Diese Oberflächen reagieren auf die Gegenwart einer Flüssigkeit, auf Umgebungsbedingungen oder auf externe Felder, d.h. sie haben eine eigene Dynamik. Die Untersuchung der resultierenden gekoppelten Oberflächen- und Flüssigkeitsdynamiken soll systematisch entwickelt werden, um damit die Voraussetzungen zu schaffen für eine gezielte Kontrolle dynamischer Benetzung. Die ausgewählten komplexen Flüssigkeiten umfassen Mischungen niedermolekularer Flüssigkeiten, verdünnte Suspensionen und Lösungen. Deren innere Freiheitsgrade koppeln an die Dynamik des Substrats. Ziel des beantragten SPPs ist es, unser grundlegendes physikalisches Verständnis dieser Prozesse und Phänomene zu entwickeln und zugrundeliegende fundamentale Fragen zu klären.

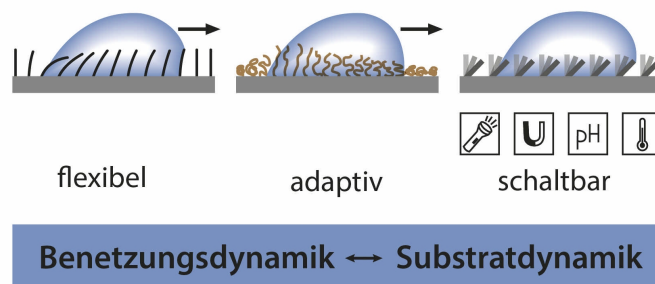


Abb. 11: Die dynamische Benetzung flexibler, adaptiver und schaltbarer Oberflächen resultiert aus dem Wechselspiel aller wirkenden Grenzflächenkräfte sowie der Struktur und Dynamik des Substrats.

Das grundlegende Verständnis soll dazu führen, dass Benetzung durch geeignete Wahl der Oberflächenmodifikation sowie der Nano- und Mikrostruktur gesteuert werden kann. Entsprechende Modelloberflächen und -architekturen sollen in Hinblick auf spezielle Eigenschaften untersucht werden. Zur Quantifizierung der Benetzungssphänomene sollen physikalische Charakterisierungsmethoden in Bezug auf Schnelligkeit, Auflösung und Empfindlichkeit verbessert werden. Langfristiges Ziel ist, Benetzung auf flexiblen, adaptiven und schaltbaren Oberflächen auf allen relevanten Längen- und Zeitskalen quantitativ zu beschreiben und durch Simulationen vorhersagbar zu machen. Um diese Ziele zu erreichen, ist eine Unterteilung in drei Bereiche sinnvoll - wie sie bereits in Kap. 2.3-2.5 vorgenommen wurde: Benetzung (i) flexibler, (ii) adaptiver und (iii) schaltbarer Oberflächen. Neben spezifischen Fragen für jeden Bereich soll der SPP wichtige bereichsübergreifende Fragen klären.

5.1.1 Bereichsübergreifende Fragen

Für alle drei Bereiche ist ein genaues Verständnis der Bewegung der Drei-Phasen-Kontaktlinie in Richtung der Gasphase (Benetzen) und in Richtung der Flüssigkeit (Entnetzen) entscheidend. In vielen Experimenten werden außerdem bestimmte Oberflächenmodifikationen mit einer Nano- und Mikrostruktur kombiniert, um bestimmte Benetzungseigenschaften zu erzielen. Zentrale Fragen dabei sind:

- Welche mikroskopische und mesoskopische Struktur haben die verschiedenen Grenzflächen in der Kontaktlinienregion? Wie ändert sich die Struktur einer Oberfläche, wenn sich die Kontaktlinie über sie hinweg bewegt? Wie unterscheiden sich diese Änderungen zwischen der be- und entnetzenden Seite eines sich bewegenden Tropfens?
- Durch welche Prozesse wird bei der Kontaktlinienbewegung Energie dissipiert? Welche relative Bedeutung haben beispielsweise Energiedissipation im flexiblen oder adaptiven Substrat, in der bewegten Flüssigkeit und an der Grenzfläche?
- Wodurch kommt es zur Haftung von Kontaktlinien und inwieweit bestimmt sie die beobachteten Kontaktwinkel? Wie bestimmen mikroskopische Haft-Rutsch Zyklen die makroskopische Kontaktliniendynamik? Wie hängen generell mikroskopische und mesoskopische (multiskalige) Strukturen mit beobachteten makroskopischen Kontaktwinkeln zusammen?
- Kann die Kopplung von Fortschritt- und Rückzugskontaktwinkel durch geeignete Nano- und Mikrostrukturen verstärkt oder verringert werden?
- Wie werden die Kontaktlinien- und Substratdynamik durch die Dynamik innerer Freiheitsgrade der Flüssigkeit in der Kontaktlinienregion verändert?
- Welchen Einfluss haben die Eigenschaften der Gasphase? Wie unterscheidet sich die Dynamik wenn flüssig-gas Phasenübergänge eine Rolle spielen?
- Wie koppeln die Restrukturierung der Oberfläche, die Reorganisation des Benetzungsrings und die Dynamik von Heterogenitäten in der Flüssigkeit an die Geschwindigkeit der Kontaktlinie?

Diese allgemeinen Fragen sollen im Wechselspiel mit der Untersuchung spezifischer Systeme der drei eingeführten Bereiche beantwortet werden.

5.1.2 Benetzung flexibler Oberflächen

Unter flexiblen Oberflächen verstehen wir Oberflächen, die sich unter dem Einfluss einer Kontaktlinie deformieren. Dazu gehören z.B. Elastomere, Hydro- oder Organogele. Im SPP soll geklärt werden, wie die mechanische Deformierbarkeit die Benetzungseigenschaften und insbesondere die Bewegung der Kontaktlinie beeinflusst. Auch soll der Einfluss statischer und sich bewegendes Tropfen auf die Verformung glatter und strukturierter flexibler Oberflächen untersucht werden.

Da sich durch die Deformierbarkeit mikrostrukturierter Oberflächen neue Möglichkeiten der Benetzung ergeben, sind viele Fragen zu klären wie z.B.: Lassen sich für eine bestimmte Mikrostruktur neuartige Morphologien der benetzten Bereiche erreichen, die keine Entsprechung bei starren Oberflächen haben? Wie ändern sich die Stabilitätsbereiche der verschiedenen Morphologien im Vergleich zu einer entsprechenden starren Oberfläche? Im Unterschied zu rein viskosen Systemen, weisen elastisch deformierbare planare Oberflächen ebenfalls Kontaktlinienhaftung und somit Kontaktwinkelhysterese auf. Hierfür sind theoretische und numerische Modelle zu entwickeln, die die viskoelastischen Eigenschaften der planaren oder strukturierten Substrate explizit berücksichtigen. Analog muss auch die für feste Substrate gut verstandene Linienspannung für viskoelastische Systeme neu betrachtet werden. Die erarbeiteten theoretischen Beschreibungen sollen experimentell verifiziert werden. Schließlich sollen Wechselwirkungen benachbarter Tropfen über die elastische Oberfläche untersucht werden.

Die Dynamik der Benetzungsmorphologien auf topographisch strukturierten Oberflächen ergibt sich aus dem Wechselspiel der Kapillar-, Grenz- und Oberflächenkräfte mit den (visko-)elastischen Kräften. Ein kondensierender Tropfen minimiert beispielsweise seine Oberflächenenergie und deformiert dabei flexible Substrate (z.B. mit Gräben- oder Zylinderstrukturen). Daher kann zum einen die entstehende Benetzungsstruktur abhängig von ihrem Entstehungsprozess sein. Zum anderen kann ein Tropfen die topographische Umgebung derart verändern, dass der nächste kondensierende Tropfen eine andere Substratstruktur vorfindet. Die sich möglicherweise ergebenden langreichweitigen Ordnungseffekte können die Vergrößerungsdynamik (*coarsening*) ganzer Tropfenensembles auf flexiblen Oberflächen maßgeblich verändern. Dies soll im SPP grundlegend geklärt werden.

Auch für rutschende Tropfen und bewegte Kontaktlinien auf flexiblem Substraten sind viele grundlegende Fragen zu untersuchen. Es sind die Beziehungen zwischen treibender Kraft und Tropfenform und -geschwindigkeit zu klären. Es ist zu diskutieren, wie die erwarteten Übergänge zwischen qualitativ verschiedenen Bewegungsmoden mit den verschiedenen Dissipationsvorgängen in Tropfen und Substrat zusammenhängen. Darauf aufbauend muss auch die Dynamik ganzer Tropfenensembles untersucht werden. Auch können Kontaktlinien durch die Substratdynamik induzierte makroskopische Haft-Rutsch (*stick-slip*) Zyklen zeigen. Dieses Verhalten soll quantitativ verstanden werden. Weiterhin ist zu untersuchen, wie die Substratdynamik Instabilitäten der Kontaktlinie beeinflusst.

Beim Aufprall von Tropfen auf flexiblen Oberflächen wird Energie auch durch die dynamische Verformung der Substratstruktur dissipiert. Bei mikrostrukturierten Oberflächen muss daher die wichtige Frage beantwortet werden, ob und wie eine aufprallinduzierte Reorientierung der Mikrostruktur erfolgt. Wie ändert die Flexibilität der Oberfläche die Kontaktzeit des Tropfens mit dem Substrat? Wie ändern sich die Ausbreitungs- und Rückzugsgeschwindigkeiten für die unterschiedlichen Richtungen? Da sich die Mikrostrukturen in Bewegungsrichtung orientieren können, ist ein besonders hoher Energieverlust an den Umkehrpunkten zu erwarten. Wie lässt sich dies modellieren?

5.1.3 Benetzung adaptiver Oberflächen

Im zweiten Forschungsbereich sollen die folgenden fundamentalen und miteinander zusammenhängenden Fragen adressiert werden: Wie koppeln Adaptionen des Substrates und Benetzungsdynamik der Flüssigkeit, wenn beide auf ähnlichen Zeitskalen erfolgen? Dabei geht es weniger um die mechanische Deformation nahe der Kontaktlinie. Vielmehr geht es um die Adaption des gesamten Substrates in Kontakt mit einer Flüssigkeit oder ihrem Dampf. Dies kann aus einer direkten Wechselwirkung der Flüssigkeit mit dem Substratmaterial (z.B. Quellen) resultieren oder aus einer durch die Gasphase vermittelten Wechselwirkung. Eine weitere Möglichkeit ist die bevorzugte Adsorption einer Flüssigkeitskomponente (eine Komponente einer Mischung oder Tenside) am Substrat unter dem Tropfen oder die Diffusion einer Komponente über das Substrat außerhalb des Tropfens.

Wichtige Fragen sind: In welchem Ausmaß spielt Adaption auch bei anscheinend inerten, festen Oberflächen eine Rolle? Resultiert beispielsweise die Anwesenheit der Flüssigkeit in einer Änderung der mikroskopischen Struktur einer Oberfläche durch Rekonstruktion wie sie z.B. für katalytische Systeme bei der Anwesenheit von Gasen auftritt? Welche Rolle spielen die Verdunstung und Kondensation bei der Dynamik der Benetzung? Diese Frage ist naturgemäß wichtig wenn man die Bewegung flüchtiger Flüssigkeiten wie Wasser untersucht und die Substratadaption durch Luftfeuchte erfolgt. Weiterhin muss untersucht werden, welche Eigenschaften eine Oberfläche für eine effektive Adaption haben muss.

Für Mischungen mit einer flüchtigen Komponente kann diese verdunsten, durch die Gasphase transportiert werden und den Kontaktwinkel für die Mischung verändern - dies kann sowohl zu Autophobie führen, als auch zu verstärktem Spreiten. So muss man allgemein fragen was die Bedingungen sind, die zu den beiden gegensätzlichen Adaptionen führen? Auch kann die

Adsorption einer Substanz aus der Dampfphase zur Substratadaption führen - so hängt die Ausbreitung von PDMS auf einer hydrophilen Oberfläche von der Luftfeuchte ab, da das PDMS mehr oder weniger Wasser adsorbiert und damit seine Deformierbarkeit ändert. Dieses Beispiel illustriert auch noch einmal den fließenden Übergang zwischen den Bereichen flexibler und adaptiver Oberflächen.

5.1.4 Benetzung schaltbarer Oberflächen

In diesem Bereich sollen Benetzungseigenschaften durch externe Bedingungen auf Zeitskalen verändert werden, die klein sind im Vergleich zur induzierten Be- und Entnetzungs-dynamik. Untersucht werden sollen u.a. schaltende Einflüsse angelegter elektrischer oder magnetischer Felder und gezielter Lichteinstrahlung. Dabei sollen einerseits im SPP die verschiedenen Mechanismen vergleichend untersucht werden, die die Oberflächenkräfte und damit die Kontaktwinkel schalten. Andererseits werden die vom Schalten induzierten Be- und Entnetzungs-dynamiken auf mikroskopischer, mesoskopischer und makroskopischer Skala betrachtet. Eine große Bedeutung kommt dabei der Reversibilität der Übergänge zu.

Viele natürliche und künstliche Oberflächen sind anisotrop strukturiert. D.h. die Bewegung eines Tropfens entlang verschiedener Richtungen ist durch verschiedene Energiebarrieren charakterisiert. Es soll untersucht werden, wie umschaltbare Substratgeometrien gerichtete Kontaktlinien- und Tropfenbewegung hervorrufen können und wie diese von den Symmetriebrüchen abhängen, die in die Oberflächenstruktur kodiert werden. Wie hängt in einem solchen Fall die dominante Bewegungsrichtung von Volumen, Oberflächenenergie und Viskosität der Tropfen, der Elastizität der Oberfläche und den charakteristischen Längenskalen ab?

Eine weitere Frage ist, inwieweit zeitliche und räumliche Modulationen äußerer Felder und damit hochfrequentes Umschalten die Bewegung kleiner Flüssigkeitsmengen verursachen und kontrollieren kann? Z.B. wurden bereits Systeme vorgeschlagen in denen Tropfen gerichtet bewegt werden können, indem eine Benetzbarkeitsratsche periodisch geschaltet wird. Spannend bleibt, wie solche Systeme mit den möglichen schaltenden Effekten experimentell realisiert werden können.

Das hochfrequente Umschalten der Bewegungsrichtung der substratnahen Flüssigkeitsmoleküle kann lokal hohe Schergeschwindigkeiten induzieren. Diese können an die internen Freiheitsgrade der zu untersuchenden Mischungen, Suspensionen oder Tensidlösungen koppeln. Ziel ist zu verstehen, ob und wie die Scherkräfte die innere Struktur der Flüssigkeit verändern und wie dies auf die Benetzungsprozesse zurückwirkt.

Schalten der Oberflächenmorphologie ermöglicht auch einen Flüssigkeitsstrom gezielt ein- oder auszuschalten. Gleiches gilt für die Bewegung von Tropfen. Abhängig vom Stimulus lässt sich die Höhe der Energiebarriere, die dem Flüssigkeitstransport entgegenwirkt, kontinuierlich variieren. Experimentell spiegelt sich die Höhe der Energiebarriere in der Kontaktwinkelhysterese oder der lateralen Adhäsionskraft wieder. An wohldefinierten Modellsystemen sollen diese Messungen mit der Bestimmung des Flussprofils in der Nähe der Drei-Phasenkontaktlinie korreliert werden.

Ziel ist der quantitative Vergleich der experimentellen Resultate mit numerischen Vorhersagen, um so eine theoretische Beschreibung der Benetzungsdynamik in Folge des Schaltens zu erlangen. Da das Schalten der Wechselwirkungen nahezu instantan erfolgt, sollten z.B. molekulardynamische Simulationen eine quantitative Beschreibung der ablaufenden Nichtgleichgewichtsprozesse unter Berücksichtigung einer repräsentativen Anzahl von Substrat- und Flüssigkeitsmolekülen ermöglichen.

5.2 Eingrenzung der wissenschaftlichen Fragestellungen

Der SPP ist offen für Experimente, Theorie und Simulation. Als Flüssigkeit kommen neben reinen niedermolekularen Flüssigkeiten auch Mischungen niedermolekularer Flüssigkeiten,

verdünnte Suspensionen und Tensidlösungen in Betracht. Als dritte Phase sind statt Gas (z.B. Luft) auch niedermolekulare Flüssigkeiten zugelassen. Zur Sicherung der Kohärenz des Programms sind folgende Einschränkungen sinnvoll. Ausgeschlossen sind

- Projekte, die direkt eine Anwendungsentwicklung zum Ziel haben, wie z.B. die Entwicklung von Beschichtungen gegen Biofouling. Vielmehr muss eine fundamentale Frage zum Verständnis von gekoppelter Substrat- und Benetzungsdynamik im Mittelpunkt stehen.
- Untersuchungen an komplexen Flüssigkeiten mit Ausnahme einfacher komplexer Flüssigkeiten – Mischungen niedermolekularer Flüssigkeiten, verdünnte Suspensionen und Tensidlösungen – bei denen die Flüssigkeit an sich bereits sehr gut verstanden ist. Fokus sind einfache komplexe Flüssigkeiten deren innere Freiheitsgrade durch Oberflächenkräfte an die Dynamik des Substrats koppeln, d.h. Benetzung und lokale innere Flüssigkeitsstruktur beeinflussen sich gegenseitig. Der Ausschluss betrifft damit alle Flüssigkeiten die bereits im Volumen auf unterschiedlichen Längenskalen strukturiert sind, wie z.B. Dispersionen, Emulsionen, und Flüssigkristalle in ihren Mesophasen. Dieses Kriterium schließt auch biologische Flüssigkeiten, Biofilme, Zellaggregate, etc. aus.
- Benetzungsphänomene auf reaktiven Oberflächen mit irreversiblen Prozessen. Wir schließen das Wechselspiel chemischer Reaktionen an Grenzflächen mit Flüssigkeitsdynamik aus da lediglich reversible Prozesse betrachtet werden sollen, bei denen die Oberflächen langfristig wieder in den Ausgangszustand zurückkehren können.

5.3 Kohärenz der geplanten Forschungsaktivitäten

Im SPP geht es um die dynamische Benetzung von Oberflächen, die auf die Gegenwart der Flüssigkeit oder Umgebungsbedingungen reversibel reagieren. Für die Organisation des Schwerpunktes und die Zusammenarbeit der Teilprojekte ist eine Unterteilung in flexibel, adaptiv und schaltbar sinnvoll. Bei der theoretischen Beschreibung, der physikalischen Charakterisierung und der Entwicklung von Herstellungsverfahren für Oberflächen gibt es jedoch große Überschneidungen und eine Trennung wäre künstlich. Zwei Beispiele zur Illustration:

- Um schaltbare oder adaptive Oberflächen herzustellen, werden oft harte Substrate mit weichen und deformierbaren Schichten beschichtet. So werden Temperatur-schaltbare Oberflächen erzeugt, indem eine einige Nanometer dicke Schicht PNIPAM auf Glas oder Silizium gezogen wird. Um die dynamische Kontaktwinkelhysterese zu verstehen und theoretisch zu beschreiben, muss man die Verformung berücksichtigen; ohne letztere wäre das Verständnis schaltbarer und adaptiver Oberflächen daher unvollständig.
- Elastische, Flüssigkeits-imprägnierte und beschichtete Oberflächen können zu Grenzflächen ähnlicher Topographie führen (Abb. 5). Damit lassen sich gleiche Arten der Mikroskopie anwenden, um sie zu vermessen. Theoretische Konzepte, die für ein System entwickelt werden, lassen sich partiell übertragen.

Der SPP ist nicht nur thematisch kohärent, sondern auch in Bezug auf die beteiligten Disziplinen (u.a. Physik, Chemie, Mathematik, Materialforschung und Ingenieurwissenschaften). Ein signifikanter Fortschritt ist nur in einem interdisziplinären Verbund zu erwarten. Theoretische Modelle beruhen auf Beobachtungen der Kontaktlinienbewegung auf unterschiedlichen Substraten. Umgekehrt identifizieren Experimentalphysiker wichtige Beobachtungsparameter anhand der Theorie. Um theoretische Modelle zu verifizieren, müssen entsprechende Oberflächen hergestellt und experimentell analysiert werden. Basierend auf den in der Theorie entwickelten Designprinzipien, sollen Oberflächen, mit gezielt eingestellten Benetzungseigenschaften, hergestellt werden. Multiskalige Simulationen ergänzen diese wechselseitige Iteration und machen zudem Längen- und Zeitskalen zugänglich, die bisher mit experimentellen Methoden nicht zugänglich sind.

5.4 Konzepte zur Gestaltung der interdisziplinären und ortsübergreifenden Zusammenarbeit/Netzwerkbildung*

Netzwerkbildung soll sowohl auf der Ebene der Antragstellenden als auch bei den wissenschaftlichen Mitarbeitern gefördert werden. Dies setzt regelmäßige Diskussionen zwischen den an den Einzelprojekten Forschenden voraus. Als Rahmen hierfür sollen folgende Strukturen implementiert werden:

- Als öffentlich zugängliche Kommunikationsbasis wird eine Website angelegt, auf der insbesondere Highlights, Veröffentlichungen und Veranstaltungen angekündigt werden. Dies dient sowohl der Vernetzung, als auch der (inter)nationalen Sichtbarkeit.
- Es wird eine digitale Kommunikationsplattform („Slack“ o.ä.) eingerichtet, über die sich alle Forschenden jederzeit SPP-intern austauschen können. So kann schnell und ortsübergreifend auf die im SPP vorhandenen Kompetenzen zugegriffen werden.
- Interne Tagungen werden im jährlichen Rhythmus organisiert, um die persönliche Kommunikation und Vernetzung unter den teilnehmenden Forschenden zu fördern.
- Treffen im Rahmen nationaler und internationaler Tagungen werden vom Programmausschuss des SPP koordiniert.
- Sommerschulen und Doktorandenworkshops werden zur Förderung des wissenschaftlichen Nachwuchses (siehe auch Kap. 5.5) eingerichtet. Ihre ungezwungene Atmosphäre bietet Nachwuchsforschenden eine Gelegenheit, sich untereinander und mit etablierten Forschenden zu vernetzen.
- Längerfristiger Austausch und intensive Kooperation zwischen den einzelnen Projekten wird gefördert. Hierfür wollen wir alle wissenschaftlichen Mitarbeiter motivieren, für einige Wochen an einem der Partnerinstitute zu arbeiten. Dies soll auch den Austausch zwischen theoretisch und experimentell arbeitenden Gruppen fördern, um das gegenseitige Verständnis der Fragestellungen, Probleme und Lösungsansätze zu vertiefen.

Die hierfür nötigen Mittel werden im Zentralprojekt des SPP beantragt (siehe Kap. 9).

5.5 Maßnahmen zur Förderung des wissenschaftlichen Nachwuchses, Förderung von Wissenschaftlerinnen, Angebote zur Familienfreundlichkeit

Die Förderung des wissenschaftlichen Nachwuchses ist ein zentrales Anliegen des SPPs und soll auf unterschiedlichen Ebenen erfolgen. Der Programmausschuss wird den wissenschaftlichen Nachwuchs gezielt auf die Ausschreibung des SPPs aufmerksam machen, bei der Wahl kreativer und innovativer Projekte und Forschungsansätze beraten und ihre Vernetzung mit anderen Projekten unterstützen. Ziel ist es, dass im SPP erarbeitete Ergebnisse einen Grundstein bilden für weitere Förderungen auf nationaler (z.B. Emmy-Noether Programm) oder internationaler Ebene (z.B. ERC Starting Grants). Im Zentralprojekt des SPPs werden Mittel für die Anschubförderung beantragt, die es einigen Nachwuchswissenschaftlern erlauben sollen, Anträge für die zweite Phase vorzubereiten.

Alle Nachwuchswissenschaftler sollen motiviert werden, einige Wochen bei einer komplementären Partnergruppe innerhalb des SPP oder an einem thematisch verbundenen Institut im Ausland zu arbeiten. Dieser Austausch ist fruchtbringend für die einzelnen Projekte und für die Nachwuchswissenschaftler auch karrierefördernd, da sie andere Forschungsansätze und -kulturen erfahren. Damit lernen sie, die eigene Arbeit in einen erweiterten Kontext zu setzen, sowie eigene Kooperationen aufzubauen.

Jeweils im ersten Jahr der beiden Förderperioden werden wir eine 1-2 wöchige Sommerschule mit ausgewiesenen Vortragenden organisieren. Diese Schulen dienen der Einführung in das Forschungsgebiet und seiner Methoden, sowie der initialen Vernetzung der Nachwuchswissenschaftler innerhalb des SPP. Im jeweiligen zweiten Jahr organisieren wir eine

*Im Folgenden verwenden wir die männliche Form der entsprechenden Substantive, meinen dabei aber jeweils die weibliche Form mit.

„Nachwuchstagung“ auf der vor allem Doktoranden (aber auch Masteranden und Postdocs) Vorträge zu ihren Zwischenergebnissen halten. Diese werden durch ausgewählte Vorträge und Tutorien nationaler und internationaler Experten ergänzt. Diese Veranstaltung dient einerseits der Vertiefung der interdisziplinären Kenntnisse, andererseits der Darstellung und Einordnung der eigenen Ergebnisse. Da die Methoden zur verbalen und schriftlichen Präsentation eigener Resultate oft nur einen geringen Stellenwert in naturwissenschaftlichen Studiengängen haben, sollen während dieser Veranstaltungen auch weiterführende Kurse zu wissenschaftlichem Schreiben und Präsentieren angeboten werden. Ferner planen wir, hauptberufliche Editoren wissenschaftlicher Journale, z.B. der Nature Publishing Group, einzuladen, um dem wissenschaftlichen Nachwuchs die Qualitätskriterien der „High Impact“ Journale zu vermitteln.

Die Förderung von Wissenschaftlerinnen sowie die Vereinbarkeit von Familie und Wissenschaft als Beruf im Rahmen dieses SPP ist ein besonderes Anliegen der Antragstellenden. Dazu wird ein auf die Anforderungen des SPP zugeschnittenes Gleichstellungskonzept entwickelt, welches auf dem Infoblatt „Gleichstellungsmaßnahmen in Forschergruppen und Schwerpunktprogrammen“ aufbaut. Es sollen unter anderem folgende Maßnahmen verankert werden:

- Wissenschaftlerinnen im weiteren Forschungsfeld werden explizit auf den Antrag aufmerksam gemacht und zur Antragsstellung aufgefordert.
- Alle Teilnehmer werden explizit auf das Gleichstellungskonzept und die Richtlinien der DFG hingewiesen.
- Bei der Organisation von Tagungen etc. soll auf eine ausgewogene Beteiligung von weiblichen Vortragenden als auch von Nachwuchsforschenden geachtet werden.
- Der SPP wird einen Gleichstellungsbeauftragten berufen, dessen Aufgabe es ist, die familienfreundliche Gestaltung von SPP-Veranstaltungen zu koordinieren, Wissenschaftlerinnen bzgl. Karriereentwicklungsmöglichkeiten zu beraten und ihnen Mentorenbeziehungen innerhalb des SPP zu vermitteln.
- Der SPP wird Doktorandinnen und Postdoktorandinnen auch auf Mentoring-Programme für Frauen in Studium und Forschung hinweisen, die von den einzelnen am SPP beteiligten Institutionen angeboten werden. Teilnahme an Mentoring- und Coachingprogrammen soll vom SPP gefördert werden.
- Der SPP wird die Wissenschaftlerinnen beim Aufbau eines eigenen informellen Austausch- und Informationsnetzwerkes unterstützen.
- Um Eltern die Teilnahme an Tagungen, Schulen und Kolloquien zu erleichtern, planen wir während der Veranstaltungen eine Kinderbetreuung anzubieten.
- Der längerfristige Austausch mit Partnergruppen soll auch für Eltern ermöglicht werden. Hierzu sollen die Mehrkosten in der Kinderbetreuung und der Unterkunft am Gastort durch zentrale Mittel des SPP getragen werden.
- Bei besonderen Abhängigkeiten (z.B. Kind in der Stillzeit) oder kurzfristig notwendiger Betreuung sollen Mehrkosten nach Absprache mit dem Gleichstellungsbeauftragten vom SPP übernommen werden.
- Um Wissenschaft als Beruf familienfreundlich zu gestalten, wird größtmöglicher Wert darauf gelegt, Mutterschutz- und Elternzeitvertretungen zu ermöglichen und die Rückkehr zur ursprünglichen Aufgabe innerhalb des Projektes zu erleichtern, sowie die wissenschaftliche Qualifikation fortzuführen.
- Ähnliche Regelungen sollen auch angewandt werden für Betreuungsverpflichtungen gegenüber engen Familienangehörigen.

5.6 Vernetzung der geplanten Forschungsaktivitäten im internationalen Wissenschaftssystem

Durch Ausrichten von Tagungen und Workshops haben die Mitglieder des Programmausschusses international die Diskussion zur Benetzung maßgeblich voran gebracht. Beispiele sind das

555. WE-Heraeus-Seminar: *Wetting of structures with complex geometries* (D. Vollmer, H.-J. Butt, 16-19/03/2014 Bad Honnef) und die 15. Konferenz der *International Association of Colloid and Interface Scientists* (IACIS) zusammen mit der Hauptversammlung der Kolloid-Gesellschaft (H.-J. Butt, D. Vollmer, 24-29/05/2015 Mainz). Sie sind an der Organisation von Workshops (z.B. CECAM: *Non-equilibrium dynamics of thin films - solids, liquids and bioactive materials* 20-23/09/2016 Lausanne, Switzerland) von Konferenzen wie der Serie „Droplets“ (Marseille 2013, Twente 2015, Los Angeles 2017) und europäischer MC-RTN maßgeblich beteiligt und damit international sehr gut vernetzt.

Zukünftig soll die nationale und internationale Vernetzung des beantragten SPPs durch die fortgesetzte Beteiligung an der Organisation von Schulen, Workshops und Konferenzen, insbesondere der Organisation spezieller Symposien auf den Jahrestagungen der DPG, APS oder MRS untermauert werden. Außerdem wird der SPP im jeweils ersten Jahr beider Förderperioden eine Sommerschule ausrichten, wodurch zusätzlich die initiale Ausbildung von Doktoranden und Postdocs des SPP gefördert wird. Die Doktorandenworkshops, im jeweils zweiten Jahr, bieten allen Nachwuchswissenschaftlern die Möglichkeit ihre ersten Ergebnisse ausgewählten nationalen und internationalen Experten vorzustellen und miteinander zu diskutieren. Gegen Ende jeder Förderperiode planen wir, eine internationale Tagung auszurichten, um die erzielten Fortschritte auf breiter internationaler Ebene zu diskutieren. Dabei sollen gezielt herausragende internationale Wissenschaftler als Vortragende eingeladen werden. Des Weiteren wird die SPP-eigene Internetseite die Projekte und die beteiligten Forschenden vorstellen und kommuniziert Stellenangebote, neueste Ergebnisse und Aktivitäten. Auch sollen eigene Kanäle/Projekte in ausgewählten sozialen Medien für Popularisierungen der bearbeiteten Probleme und erhaltenen Ergebnisse genutzt werden (z.B. *ResearchGate* und *YouTube*). Dafür werden im Zentralprojekt Mittel für Öffentlichkeitsarbeit beantragt.

Im Rahmen des Zentralprojekts sollen außerdem Gelder für Gastwissenschaftler beantragt werden, um international führende Wissenschaftler für einige Wochen an teilnehmende Institute einzuladen. Dies soll die internationale Vernetzung intensivieren, die Sichtbarkeit des SPPs erhöhen und Satellitenprojekte initiieren.

6 Abgrenzung zu anderen laufenden Programmen

Zum Thema Benetzung in seiner ganzen Breite von der Grundlagenwissenschaft bis zur industriellen Anwendung findet man in Deutschland eine breite Expertise, die international seit Jahren Beachtung findet. Auf der eher anwendungsorientierten Seite ist hier das Center of Smart Interfaces (CSI) „Understanding and Designing Fluid Boundaries“ in Darmstadt zu nennen (Sprecher: C. Tropea und P. Stephan). Dieser 2014 ausgelaufene Exzellenzcluster (EXC 259) befasste sich mit Phasengrenzflächen, bei denen fluide Phasen mit einer festen Wand wechselwirken. „Smart Interfaces“ bezog sich dabei auf Strömungsberandungen, die gezielt eingesetzt wurden, um eine spezifische Verbesserung oder Steuerbarkeit eines Massen-, Impuls- oder Wärmetransports zu erreichen. Daran knüpft der seit 2016 laufende SFB 1194 „Wechselseitige Beeinflussung von Transport- und Benetzungsvorgängen“ (Sprecher: P. Stephan und D. Bothe) an, in dem es um den Zusammenhang von Be- und Entnetzungsvorgängen mit Impuls-, Wärme- und Stofftransport geht. EXC 259 und SFB 1194 mit ihrem jeweiligen Hauptfokus auf statischen Oberflächen und komplexen Flüssigkeiten erarbeiten damit wichtige ingenieurwissenschaftliche Grundlagen. Unser Hauptthema - die fundamentalen dynamischen Benetzungseigenschaften adaptiver, flexibler und schaltbarer Oberflächen ist dort nur Randthema.

Auf der grundlagenwissenschaftlichen Seite gab es die sehr erfolgreichen Schwerpunktprogramme SPP 1052 „Benetzung und Strukturbildung an Grenzflächen“ (1998-2004, Sprecher: S. Herminghaus) und SPP 1164 „Nano- und Mikrofluidik“ (2004-2019, Sprecherin: K. Jacobs). Diese SPPs legten wertvolle Grundlagen zum Verständnis statischer und quasi-statischer Be- und Entnetzungseigenschaften von Polymerschmelzen und fluiden Filmen auf festen

Substraten (SPP 1052) sowie zum Flüssigkeitstransport in eingeschränkten Geometrien (SPP 1164). Sie belegten und festigten die Stärke der deutschen Forschung in der Benetzung. Außerdem bilden dort gewonnene Resultate ein Fundament, um im jetzt beantragten SPP die dynamischen Benetzungseigenschaften adaptiver, flexibler und schaltbarer Oberflächen zu betrachten. Das Schwerpunktprogramm SPP 1506 „Fluide Grenzflächen Transport Processes at Fluidic Interfaces“ (2010-2016, Sprecher: D. Bothe, A. Reusken) untersuchte die physiko-chemischen Vorgänge bei Mehrphasenströmungen. Insbesondere wurden mathematische Modelle entwickelt, um Massen- und Wärmetransport zwischen Grenzflächen und Adsorptionsvorgänge an flüssigen Grenzflächen zu verstehen. Prozesse an Drei-Phasen-Kontaktlinien, um die es in dem beantragten SPP hauptsächlich gehen soll, waren nur Randthema. Das im Jahr 2013 bewilligte und zeitnah auslaufende Marie Curie Initial Training Network (MC-ITN) „Complex Wetting Phenomena“ (CoWet, Sprecherin: T. Gambaryan-Roisman, Darmstadt) hatte zum Ziel, das Spreiten komplexer Flüssigkeiten auf ebenfalls komplexen Oberflächen besser zu verstehen. Von den vier Themengebieten hat nur eines „Wetting of complex substrates by liquids“ signifikanten Überlapp mit dem hier beantragten SPP. In diesem internationalen Forschungsverbund sind vier deutsche Gruppen beteiligt. 2016 wurde das „Max Planck Center for Complex Fluid Dynamics“ (MPCCFD) gegründet an dem die MPIs für Polymerforschung, Mainz (H.-J. Butt, K. Landfester) und Dynamik und Selbstorganisation, Göttingen (E. Bodenschatz, S. Herminghaus) sowie zwei Forschungsgruppen der Universität Twente (D. Lohse, A. vd Berg) beteiligt sind. Ziel des MPCCFD ist es, gemeinsame Forschung zu turbulenten Mehrphasenflüssen und nichtturbulenter Fluidodynamik zu entwickeln. Benetzung und Prozesse an der Dreiphasenkontaktlinie kommen nur am Rande vor. Das im Jahr 2017 bewilligte MC-ITN „Lubricant-infused slippery surfaces“ (LubISS, Sprecherin: D. Vollmer, Mainz) hat zum Ziel, Flüssigkeits-impregnierte Oberflächen für Anwendungen als selbst-reinigende Oberflächen, anti-icing und anti-biofouling zu entwickeln. Diese anwendungsorientierten Fragestellungen sind abseits des hier beantragten SPP, wobei umgekehrt das grundlegende Verständnis dynamischer Benetzungseigenschaften flexibler Oberflächen, das vom beantragten SPP zu erwarten ist, dem MC-ITN zugutekommen kann. In diesem europäischen Netzwerk sind drei deutsche Gruppen beteiligt.

Insgesamt besteht also kein Überlapp zu den bestehenden Initiativen (SFB 1194, LubISS, MPCCFD). Die vorangegangenen Initiativen (SPP 1052, SPP 1164, SPP 1506, EXC 259, CoWet) bilden das grundlagenwissenschaftliche Fundament für den hier beantragte SPP und/oder ergänzen die in Deutschland vorhandene Expertise zur Benetzung hinsichtlich anwendungsrelevanter Fragestellungen.

7 Qualifikation des Koordinators im Hinblick auf die Steuerung eines Forschungsverbundes

Prof. Uwe Thiele wird zusammen mit dem fachübergreifenden Programmausschuss das gemeinsame wissenschaftliche Arbeiten und „Leben“ innerhalb des SPP koordinieren. Im Team beraten sie potentielle Antragstellende, katalysieren die Forschungsziele und organisieren den Austausch der Forschungsergebnisse. Alle Initiatoren weisen sich durch ihre wissenschaftlichen Leistungen (siehe CVs) und Koordinationen aus:

- **Prof. Uwe Thiele** hat eine reiche Erfahrung in der Organisation und Koordination von Forschungsprojekten. Seit 2004 hat er 11 wissenschaftliche Konferenzen u.ä. organisiert, z.B. war er 2013 der Hauptorganisator des 4-Monatsprogramms „Mathematical Modelling and Analysis of Complex Fluids and Active Media in Evolving Domains“ am Newton Institute in Cambridge, UK. Von 2009-2012 hat er das Marie Curie Initial Training Network „Multiscale complex fluid flows and interfacial phenomena“ koordiniert. Seit 2015 ist er der Sprecher des Center for Nonlinear Science (CeNoS) der Universität Münster (WWU) und administrativer Direktor des Instituts für Theoretische Physik der WWU.

- **Prof. Hans-Jürgen Butt** hat ebenfalls eine reiche organisatorische Erfahrung. Z.B. war er 2008-2014 Sprecher der Max Planck Research School for Polymer Materials und 2007-2011 Vorsitzender der Deutschen Kolloidgesellschaft. Im Moment ist er Mitglied mehrerer redaktioneller Beiräte wissenschaftlicher Zeitschriften und berät wissenschaftliche Institutionen in China und Japan.
- **Prof. Doris Vollmer** ist Koordinatorin des ITNs „Lubricant Impregnated Slippery Surfaces“ (LubISS, 2017-2020).
- **Prof. Ralf Seemann** hat zahlreiche Forschungsprojekte innerhalb nationaler Forschungsverbünde (z.B. SFB 755, SFB 1027, GRK 1276, SPP 1570, SPP 1726) geleitet und ist im Moment Beiratsmitglied des Leibniz Research Clusters „Bio/Synthetische multifunktionale Mikro-Produktionseinheiten“.
- **Dr. Stefan Karpitschka** leitet seit 2017 die Forschungsgruppe „Grenzflächen komplexer Flüssigkeiten“ am MPI für Dynamik und Selbst-Organisation, Göttingen innerhalb des University of Twente - Max Planck Center for Complex Fluid Dynamics. Er war Mitglied der Organisationskomitees der „Droplets 2015“ Konferenz an der University of Twente und einer Summerschule in Albufeira, Portugal (2009).

Unser Plan für die Arbeitsteilung im Programmausschuss sieht vor, dass Prof. Thiele den SPP nach Außen und gegenüber der DFG vertritt und die Gesamtkoordination aller Aspekte übernimmt. Prof. Butt koordiniert die Organisation von Treffen und Workshops, wobei die geplanten internationalen Tagungen am Ende der ersten und zweiten Förderperiode vom gesamten Programmausschuss gemeinsam organisiert werden. Prof. Vollmer koordiniert die gemeinsame Nutzung von Geräten und den personellen Austausch zwischen Partnergruppen während Prof. Seemann unsere Aktivitäten zur Gleichstellung und Nachwuchsförderung koordiniert. Dr. Karpitschka ist für den internen Informationsaustausch (Newsletter) und Öffentlichkeitsarbeit (Homepage, Presse, Social Media) verantwortlich und übersieht die Verwirklichung unseres Konzepts für sichere und gut zugängliche Datenspeicherung.

8 Liste von potentiellen Antragstellenden[†]

Physik

- Dr. Günter Auernhammer, Leibnitz Inst. f. Polymerforschung, Dresden
- Prof. Dr. Michael Bestehorn, Inst. f. Physik, BTU Cottbus-Senftenberg, Cottbus
- Dr. Elmar Bonaccorso, Airbus Group Innovations, München
- Dr. Martin Brinkmann, Experimentelle Physik, Universität des Saarlands, Saarbrücken
- Prof. Dr. Siegfried Dietrich, MPI f. Intelligente Systeme, Stuttgart
- Prof. Dr. Andreas Fery, Leibnitz Inst. f. Polymerforschung, Dresden
- Dr. Svetlana Gurevich, Inst. f. Theoretische Physik, Univ. Münster, Münster
- Prof. Dr. Jens Harting, Helmholtz-Institut Erlangen-Nürnberg
- Prof. Dr. Stephan Herminghaus, MPI f. Dynamik und Selbstorganisation, Göttingen
- Prof. Dr. Christian Holm, Inst. f. Computational Physics, Univ. Stuttgart, Stuttgart
- Prof. Dr. Karin Jacobs, Experimentelle Physik, Universität des Saarlands, Saarbrücken
- Prof. Dr. Regine von Klitzing, Inst. f. Physik, TU Darmstadt, Darmstadt
- Prof. Dr. Kurt Kremer, MPI f. Polymerforschung, Mainz
- Prof. Dr. Marcus Müller, Inst. f. Theoretische Physik, Universität Göttingen, Göttingen
- Prof. Dr. Roland Netz, Fachbereich Physik, Freie Universität Berlin, Berlin
- Prof. Dr. Günter Reiter, Physikalisches Inst., Univ. Freiburg, Freiburg
- Prof. Dr. Hans Riegler, MPI f. Kolloid- und Grenzflächenforschung, Potsdam-Golm
- Prof. Dr. Friederike Schmid, Inst. f. Physik, Universität Mainz, Mainz
- Prof. Dr. Jens-Uwe Sommer, Leibnitz Inst. f. Polymerforschung, Dresden

[†]Einordnung ist oft nicht eindeutig da viele der Wissenschaftenden interdisziplinär arbeiten.

Chemie

- Prof. Dr. Markus Biesalski, Fachbereich Chemie, TU Darmstadt, Darmstadt
- Prof. Dr. Michael Gradzielski, Inst. f. Chemie, TU Berlin, Berlin
- Prof. Dr. Rainer Haag, Inst. f. Chemie & Biochemie, Freie Univ. Berlin, Berlin
- Prof. Dr. Andreas Heuer, Fachbereich Chemie, Univ. Münster, Münster
- Prof. Dr. Markus Retsch, Bayreuther Zentrum f. Kolloide & Grenzflächen, Universität Bayreuth
- Prof. Dr. Nico van der Vegt, Fachbereich Chemie, TU Darmstadt, Darmstadt, Darmstadt
- Prof. Dr. Nicolas Vogel, Dep. für Chemie und Bioingenieurswesen, Univ. Erlangen-Nürnberg

Angewandte Mathematik

- Prof. Dr. Dieter Bothe, Fachbereich Mathematik, TU Darmstadt, Darmstadt
- Prof. Dr. Günter Grün, Universität Erlangen-Nürnberg, Erlangen
- Dr. Holger Marschall, TU Darmstadt, Darmstadt
- Prof. Dr. Barbara Wagner, Inst. f. Mathematik, TU Berlin, Berlin
- Dr. Dirk Peschka, Group „Bulk-Interface processes“, Weierstrass Institut, Berlin

Materialwissenschaft und Ingenieurwissenschaften

- Prof. Dr. Eduard Arzt, Leibniz Inst. f. Neue Materialien, Saarbrücken
- Prof. Dr. Alexander Böker, Fraunhofer Inst. f. Angewandte Polymerforschung, Potsdam-Golm
- Prof. Dr. Kerstin Eckert, Inst. f. Verfahrens- & Umwelttechnik, TU Dresden, Dresden
- Prof. Dr. Tatiana Gambaryan-Roisman, Maschinenbau, TU Darmstadt, Darmstadt
- Prof. Dr. Martin Möller, Leibniz Inst. f. Interaktive Materialien, Aachen
- Prof. Dr. Jürgen Rühle, Inst. f. Mikrosystemtechnik, Univ. Freiburg, Freiburg
- Jun. Prof. Dr. Clarissa Schönecker, FB Maschinenbau & Verfahrenstechnik, TU Kaiserslautern
- Dr. Alla Synytska, Leibniz Inst. f. Polymerforschung, Dresden
- Prof. Dr. Sannakaisa Virtanen, Inst. f. Werkstoffwissenschaften, Univ. Erlangen-Nürnberg

9 Begründung des beantragten jährlichen Mittelbedarfs

Der Antragszeitraum des Schwerpunktprogramms beträgt 6 Jahre, unterteilt in zwei 3-jährige Förderperioden. In der ersten Förderperiode sollen grundlegende Fragen zur dynamischen Be- und Entnetzung flexibler, adaptiver und schaltbarer Oberflächen an ausgewählten Modellsysteme geklärt werden. Dies schließt eine maßgebliche Weiterentwicklung sowohl der experimentellen als auch theoretischen Methoden ein, die notwendig ist, um die gekoppelte Flüssigkeits- und Substratdynamik untersuchen zu können. Damit werden die notwendigen methodischen Voraussetzungen für die zweite Phase geschaffen. In dieser soll die Methodenentwicklung hinter der grundlegenden Untersuchung spezifischer Systeme zurücktreten.

Für eine ausreichende Besetzung der einzelnen Bereiche sollten etwa 25 Projekte gefördert werden. Dazu sollen pro Projekt in der Regel eine Doktoranden- oder Postdocstelle bereitgestellt werden. Außer dem Mittelbedarf für wissenschaftliches Personal wird auch ein Mittelbedarf für studentische Hilfskräfte, experimentelle Aufbauten und Verbrauchsmaterial benötigt. Pro Projekt rechnen wir im Durchschnitt mit einem jährlichen Mittelbedarf von etwa 75.000 €. Damit ergibt sich für die Projekte ein Mittelbedarf von etwa 1.9 Millionen €/Jahr.

Außerdem trägt ein Zentralprojekt die Koordinierung des SPP. Dies beinhaltet zum einen die Koordinierung des wissenschaftlichen Austauschs (Workshops, Konferenzen und Forschungsaufenthalte in SPP Partnergruppen). Das Zentralprojekt enthält auch die Mittel für die Anschubförderung für Nachwuchswissenschaftler, für kurze und ausgedehnte Aufenthalte von international führenden Gastwissenschaftlern mit komplementärer Expertise, Öffentlichkeitsarbeit, interne Kommunikation, Chancengleichheitsmaßnahmen und Angebote zur Unterstützung der Vereinbarkeit von Familie und Wissenschaft. Der geschätzte Umfang des Zentralprojektes beträgt 10% der Projektmittel. Insgesamt liegt der Finanzbedarf damit bei 2.1 Millionen €/Jahr.