

Antragstyp Schwerpunktprogramm - Einzelantrag - Neuantrag

Type of Proposal Priority Programme - Individual Proposal - New Proposal

Antragsdauer / Requested Duration 36 Monate / 36 months

Fach Statistische Physik, Weiche Materie, Biologische Physik, Nichtlineare Dynamik

Subject Area Statistical Physics, Soft Matter, Biological Physics, Nonlinear Dynamics

Rahmenprojekt / Framework Project SPP 2171

Titel **Benetzung von schaltbaren Oberflächen: Eine Molekulardynamik-Studie**

Title **Wetting of switchable solid substrates: A molecular dynamics study**

Geschäftszeichen / Reference No. **SP 1382/7-1**

Antragsteller / Applicant **Professor Dr. Thomas Speck**
Johannes Gutenberg-Universität Mainz
Fachbereich Physik, Mathematik und Informatik
Institut für Physik
Mainz

Geschäftszeichen / Reference No. **VI 237/7-1**

Antragsteller / Applicant **Dr. Peter Virnau**
Johannes Gutenberg-Universität Mainz
Fachbereich Physik, Mathematik und Informatik
Institut für Physik
Mainz

Beantragte Mittel / Budget Request:

	Beantragt / Requested		
Dauer [Monate] / Duration [Months]	36		
SP 1382/7-1			
Summe / Total [Euro]	79.975		
Professor Dr. Thomas Speck			
	Anz. / No.	Dauer / Duration	Euro
Personalmittel / Funding for Staff			72.600

Doktorandin/Doktorand und Vergleichbare 75 % / Doctoral Researcher or Comparable 75 %	1	18	72.600
Sachmittel / Direct Project Costs			7.375
Geräte bis 10.000 Euro, Software und Verbrauchsmaterial / Equipment up to EUR 10,000, Software and Consumables			250
Publikationen / Publications			1.125
Reisen / Travel			6.000
VI 237/7-1			
Summe / Total [Euro]			88.175
Dr. Peter Virnau			
	Anz. / No.	Dauer / Duration	Euro
Personalmittel / Funding for Staff			72.600
Doktorandin/Doktorand und Vergleichbare 75 % / Doctoral Researcher or Comparable 75 %	1	18	72.600
Sachmittel / Direct Project Costs			15.575
Gäste / Visiting Researchers			7.200
Geräte bis 10.000 Euro, Software und Verbrauchsmaterial / Equipment up to EUR 10,000, Software and Consumables			1.250
Publikationen / Publications			1.125
Reisen / Travel			6.000
Gesamtsumme / Total			168.150

**Bewilligungen der letzten vier Jahre zu anderen Projekten (seit 12.10.2014) /
DFG Project Funding Over the Last Four Years (since 12.10.2014):**

Datum / Date Gz / Ref		Euro
	Professor Dr. Thomas Speck	1.102.150
23.05.2018 INST 247/918-1	SFB/Transregio: Einzelantrag / CRC/Transregio: Individual Proposal Dichte aktive Lösungen im chaotischen Bereich / Dense active suspensions in the chaotic regime	577.300
23.05.2018 INST 247/781-2	SFB/Transregio: Einzelantrag / CRC/Transregio: Individual Proposal Dynamische Vergrößerungsansätze für stationäre Nichtgleichgewichtszustände mit stochastischer Dynamik / Dynamical coarse-graining for non-equilibrium steady states with stochastic dynamics	236.000
21.04.2017 SP 1382/3-2	Schwerpunktprogramm: Einzelantrag / Priority Programmes: Individual Proposal Dynamische Aggregation selbstgetriebener kolloidaler Teilchen / Dynamical aggregation of self-propelled colloidal particles	101.300
24.05.2016 SP 1382/5-1	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal Bestimmung und Kontrolle von (meta-)stabilen Nichtgleichgewichts-Morphologien / Prediction and control of non-equilibrium (meta-)stable morphologies	187.550
	Dr. Peter Virnau	917.350
02.10.2018 VI 237/6-2	Sachbeihilfe: Einzelantrag / Research Grants Programme: Individual Proposal Phasenverhalten und Struktur von semiflexiblen Polymeren in kugelförmiger endlicher Geometrie / Phase behavior and structure of semiflexible polymers in spherical confinement	2.750

Datum / Date Gz / Ref		Euro
23.05.2018 INST 247/790-2	SFB/Transregio: Einzelantrag / CRC/Transregio: Individual Proposal Hybride adaptive Multiskalenmethoden für Fluide der weichen Materie / Adaptive hybrid multiscale simulations of soft matter fluids	577.300
23.05.2018 INST 247/916-1	SFB/Transregio: Einzelantrag / CRC/Transregio: Individual Proposal Dynamisch konsistente vergrößerte Modelle / Topological validation of coarse-grained polymer models	236.000
21.04.2017 VI 237/5-2	Schwerpunktprogramm: Einzelantrag / Priority Programmes: Individual Proposal Dynamische Aggregation selbstgetriebener kolloidaler Teilchen / Dynamical aggregation of self-propelled colloidal particles	101.300

Zusammenfassung

Wird eine Flüssigkeit durch Oberflächen (oder auch Grenzflächen) beschränkt, so beeinflusst das ihre Eigenschaften und induziert strukturelle Kräfte die zur einer Benetzung führen können. Diese Kräfte hängen von den physikalischen und chemischen Eigenschaften der Oberfläche ab und können z.B. durch die Beschichtung mit Polymerbürsten beeinflusst werden. Eine äußere Änderung dieser Eigenschaften führt zu einer Änderung der Benetzbarkeit der Oberfläche und damit zu einer dynamischen Antwort der Flüssigkeit. Ein besseres theoretisches Verständnis der daraus resultierenden Besetzungsdynamik ist nicht nur wichtig für unser fundamentales Verständnis sondern auch für zukünftige Entwicklungen, z.B. von neuartigen adaptiven Materialien. Ziel dieses Projektes ist die numerische Untersuchung eines minimalen Modells einer asymmetrischen binären Mischung im Kontakt mit einer flachen Oberfläche. Die Wechselwirkungen mit der Oberfläche sind bestimmt durch einen einzelnen Längenparameter, durch welchen der statische Kontaktwinkel beliebig eingestellt werden kann über den gesamten Bereich von entnetzt bis vollständig benetzt. Mit Hilfe dieses generischen Modells werden wir die Be- und Entnetzungsdynamik untersuchen für: die plötzliche Änderung des statischen Kontaktwinkels, die zeitliche Entwicklung der Benetzungsmorphologie, die Kontaktwinkelhysterese unter einem periodischen Protokoll, und den Aufschlag eines Tropfens auf einer Oberfläche. Zusätzlich zu diesen Molekulardynamik-Simulationen werden wir Freie Energie-Berechnungen der Grenzflächenspannung und des Bindepotentials durchführen. Diese werden benötigt für die Kontinuumsbeschreibung und erlauben so einen detaillierten Vergleich mit den mikroskopischen Vorhersagen aus den teilchenbasierten Simulationen.

Summary

Confining a liquid through surfaces (or interfaces) alters its bulk properties and induces structural forces that underlie wetting. These forces depend crucially on the chemical and physical properties of the surface, which can be tuned through, e.g., coatings such as polymer brushes. Changing these properties externally leads to a change of the surface's wettability and induces a dynamic response of the liquid. A better theoretical understanding of such wetting dynamics is not only interesting from a fundamental physics perspective but also a prerequisite for the development of novel responsive materials. Here we propose to study through numerical simulations a minimal model for an asymmetric binary mixture in contact with a flat surface. The interactions with the wall are determined by a single length, which can be used to tune the contact angle over the full range from completely wet to completely dry. Using this generic model, we will study the dynamics of wetting/dewetting after a sudden change of the control parameter, the evolution of the morphology of a dewetting film, contact angle hysteresis for a periodic protocol, and the impact of a droplet falling on a surface. In addition to these molecular dynamics simulations of the wetting dynamics we will perform static free energy calculations of the interfacial tension and binding potential. These are passed as input to coarse-grained

continuum descriptions like the thin-film equation, which we will compare in detail to the microscopic results and available experimental data.