

流场环境下复杂囊泡的动力学行为

邓真渝 章林溪

Dynamics of complex vesicles in shear flow

Deng Zhen-Yu Zhang Lin-Xi

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 168201 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.168201

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.168201>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I16>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

半刚性高分子链螺旋结构诱导纳米棒的有序结构

[Ordered structures of nanorods induced by the helices of semiflexible polymer chains](#)

物理学报.2015, 64(8): 088201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.088201>

熵驱动下柱状高分子刷螺旋结构的研究

[Helical conformation of polymer bottle brushes induced by entropy](#)

物理学报.2014, 63(1): 018201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.018201>

表层氟化温度对聚乙烯中空间电荷积累的影响

[Influence of surface fluorination temperature on space charge accumulation in polyethylene](#)

物理学报.2012, 61(13): 138201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.138201>

表层氟化聚乙烯中的空间电荷

[Space charge in surface fluorinated polyethylene](#)

物理学报.2012, 61(9): 098201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.098201>

流场环境下复杂囊泡的动力学行为^{*}邓真渝 章林溪[†]

(浙江大学物理系, 杭州 310027)

(2015年2月24日收到; 2015年4月15日收到修改稿)

采用非平衡态分子动力学方法研究了二维复杂囊泡在剪切流中的动力学行为. 模拟发现了复杂囊泡经典的翻滚(tumbling)、摇摆(trembling)和坦克履(tank-treading)行为, 还观察到由坦克履行为向平动行为(translating)的转变. 囊泡的平动行为与剪切率大小、复杂囊泡的形状密切相关. 当大囊泡均匀嫁接较多数目的小囊泡后, 其平动方式消失. 该研究有益于加深对囊泡在剪切流场中复杂性行为的理解.

关键词: 囊泡, 剪切流, 非平衡态分子动力学

PACS: 82.35.Lr, 82.35.Np, 82.20.Wt

DOI: 10.7498/aps.64.168201

1 引言

囊泡、胶囊、红细胞等软物体的动力学行为在生物、医药等领域都有非常重要的应用. 这些软物体在流场中的动力学行为具有广泛应用前景, 一直以来都是人们研究的热门领域. 通过理论预测以及实验和模拟证实, 囊泡在线性的剪切流场中存在3种经典的运动方式: 翻滚(tumbling, TB)、摇摆(trembling, TR)^[1]和坦克履(tank-treading, TT)^[2,3]行为. 流场剪切率较小时, 囊泡做翻滚运动; 随着剪切率增大, 囊泡在过渡阶段出现极不稳定的摇摆或呼吸行为, 包括翻滚伴随呼吸以及摇摆伴随坦克履, 这一情形较为极端并且在不同体系下可能出现不同的运动方式^[4,5]. 最终当剪切率足够大时, 囊泡做稳定的坦克履运动.

实际上, 真实体系中的囊泡并不一定是“干净”的, 其表面常常附着大分子, 如膜蛋白、细胞骨架、多糖等^[6], 这些装饰着囊泡表面的大分子往往对囊泡的性质产生显著的影响, 如高分子链嫁接在囊泡表面时, 观察到不同形状的囊泡结构如发芽状(budding)、圈纹窄花边状(pearling)或者螺旋形状(coiling)^[7]. 对于流场环境下的复杂囊泡, 非平衡

态分子动力学^[8]是一种很好的方法, 它能很好地处理流场问题并且通过用Lennard-Jones (LJ)势替换耗散分子动力学(DPD)中的保守力对应的势能项, 克服了流场中边界附近的密度涨落, 同时继承了DPD方法中的控温效果. 本文试图用小囊泡代替装饰中心囊泡的大分子, 采用非平衡态分子动力学方法研究其在剪切流场中的动力学行为. 模拟结果发现复杂囊泡的动力学行为与流场环境以及嫁接小囊泡的大小密切相关.

2 模型与计算方法

2.1 复杂囊泡模型以及流场的实现

如图1所示, 本文所采用的囊泡模型^[9]为一个大大囊泡表面上嫁接若干个小囊泡(图示中为两个小囊泡对称嫁接). 每个囊泡都由若干个单体依次连接而最终形成一个封闭环, 大大囊泡包含 N_1 个单体, 嫁接的小囊泡包含 N_2 个单体. 相邻单体包括嫁接点都通过简谐势能描述:

$$U_{\text{bond}} = \frac{k_b}{2}(r - r_0)^2, \quad (1)$$

其中 $r_0 = 1.0\sigma$ 表示平衡时的键长, $k_b = 4000k_B T/\sigma^2$ 为弹性系数^[10].

^{*} 国家自然科学基金(批准号: 21174131, 21374102)和国家自然科学基金重点项目(批准号: 20934004)资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: lxzhang@zju.edu.cn.

囊泡的弯曲能通过弯曲势能来描述:

$$U_{\text{bend}} = \kappa[1 + \cos(\theta)], \quad (2)$$

θ 表示相邻两键的键角, $\kappa = 40k_B T$ 则描述弯曲能的大小.

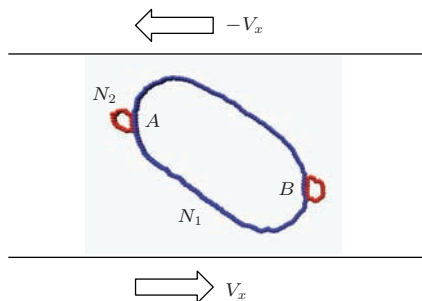


图1 二维复杂囊泡在剪切流场中的模型图 复杂囊泡由1个大囊泡和2个小囊泡构成, 大囊泡由 N_1 个单体组成, 小囊泡由 N_2 个单体组成, 分别嫁接在2个对称的A和B位置上

Fig. 1. A schematic drawing of a 2D complex vesicle immersed in the shear flow. The complex vesicle is composed of a large vesicle and two small ones symmetrically grafted at A and B. The numbers of monomers for the large vesicle and the small one are N_1 and N_2 , respectively.

单体分子间的互相作用由LJ势能来描述:

$$U_{\text{LJ}} = \begin{cases} 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 + \frac{1}{4} \right], & r \leq r_c, \\ 0, & r > r_c, \end{cases} \quad (3)$$

其中 $\epsilon = 1.0k_B T$, 而 $r = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$ 表示分别位于 $\mathbf{r}_i$ 和 $\mathbf{r}_j$ 处的第 i 个单体同第 j 个单体间的距离. 除囊泡内部的流体分子间的截断距离 r_c 取 2.5σ 外, 其余情形 r_c 均为 $2^{1/6}\sigma$.

模拟中, 内外流体分子的密度均为 $\rho = 0.85$. 为了得到均匀稳定的剪切流场, 对系统施加了边界拖拽方法. 赋予上层壁 $-V_x$ 速度, 而给下层壁 V_x 的速度(如图1), 于是剪切率可由 $\dot{\gamma} = 2V_x/\Delta y$ 决定, 其中 Δy 表示盒子的宽度. 模拟中, 大囊泡表面包含了150个单体, 而小囊泡包含0(即未嫁接)到45个单体不等. 为了研究的更深入和更精确, 剪切率 $\dot{\gamma}$ 变化范围很广, 同时盒子的大小为 $250\sigma \times 150\sigma$. 模拟采用约化量纲, 即 $k_B T = 1$, $\sigma = 1 \text{ \AA}$, 其中, k_B 为玻尔兹曼常量, T 表示温度. 所有单体的质量都为 $m = 1$. 为了节约计算时间以及模拟的方便, 这里采用了二维模型. 在模拟囊泡在流场中的运动时一般都采用二维模型[9,11-13].

2.2 非平衡态分子动力学方法

在本次模拟中, 采用DPD热浴[8,14,15]来控制体系的温度, 同时在 x 方向引入周期性边界条件. 系统的动力学方程如下:

$$\ddot{\mathbf{r}}_i = \frac{\mathbf{F}_i}{m_i}, \quad (4)$$

$$\mathbf{F}_i = \mathbf{F}_i^C + \mathbf{F}_i^D + \mathbf{F}_i^R, \quad (5)$$

其中 $\mathbf{F}_i^C$ 为保守力, 是由LJ势、简谐势和弯曲势能计算得到; $\mathbf{F}_i^D$ 是耗散力, $\mathbf{F}_i^R$ 是随机力. 耗散力和随机力由下式得到:

$$\mathbf{F}_{ij}^D = -\zeta w^D(r_{ij})(\hat{\mathbf{r}}_{ij} \cdot \mathbf{v}_{ij})\hat{\mathbf{r}}_{ij}, \quad (6)$$

$$\mathbf{F}_{ij}^R = \mu w^R(r_{ij})\theta_{ij}\hat{\mathbf{r}}_{ij}, \quad (7)$$

式中 $\hat{\mathbf{r}}_{ij}$ 是 $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$ 方向上的单位矢量, $r_{ij} = |\mathbf{r}_{ij}|$; $\mathbf{v}_{ij} = \mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j$ 是第 i 个单体同第 j 个单体间的相对速度; ζ 为耗散力幅值; μ 为随机力幅值; w^D 和 w^R 为与相对位置有关的权重函数并且在 $r > r_c$ 时值为0; θ_{ij} 为高斯白噪声项, 满足统计平均值为0, 并且方差为 τ^{-1} , 其中 τ 为时间步长. 为了保证随机力和耗散力中的权重函数满足涨落耗散定理, 下列关系必须成立:

$$w^D(r) = [w^R(r)]^2, \quad (8)$$

$$\mu^2 = 2k_B T \zeta. \quad (9)$$

模拟中我们对囊泡外部和内部流体均取 $\zeta = 1$. 为了简洁方便[8], 取权重函数如下:

$$w^D(r) = [w^R(r)]^2 = \begin{cases} (1 - r/r_c)^2, & r \leq r_c, \\ 0, & r > r_c. \end{cases} \quad (10)$$

模拟是在LAMMPS分子动力学包[16]中的NVT系综下完成的. 时间步长 $\tau = 0.0001\tau_0$, 其中单位时间 $\tau_0 = \sqrt{m\sigma^2/(k_B T)}$, 同时每次模拟至少进行 1.5×10^7 步. 而所有统计结果都是15次以上随机样本取平均后得到的.

3 模拟结果与讨论

3.1 嫁接小囊泡的大小对复杂囊泡动力学行为的影响

首先研究了对称嫁接2个小囊泡的情形. 图2给出了不同流场大小($\dot{\gamma}$)和不同小囊泡大小(N_2)时复杂囊泡的动力学行为, 而图3则给出了不

同时刻复杂囊泡几种运动方式的构象图. 在流场较弱时 ($\dot{\gamma} < 0.02$), 囊泡做翻滚运动. 较弱的流场无法克服囊泡的弯曲能, 而剪切流场的速度梯度会使得囊泡接近其正常形态并在流场中做一种不稳定的翻转, 如图 3(I). 当剪切率增加到一个适当值时 ($\dot{\gamma} = 0.03$), 囊泡本身依然是在流场中翻转 (长轴和流场方向夹角不断改变), 这与低剪切率下的翻滚运动不同: 囊泡在运动过程中伴随了一定程度的拉伸和收缩 (呼吸), 如图 3(II), 类似于 Yazdani 等 [5] 发现的翻滚伴随呼吸运动方式, 而这种方式也是属于摇摆的一种, 为翻滚向坦克履行为的过渡. 当然, 摇摆类型还有其他复杂形式, 受囊泡内外黏度比等因素的影响 [5]. 而当剪切率增大至足以改变囊泡自身的构型时, 囊泡做稳定的坦克履带运动. 囊泡形变为一个椭圆, 并且在流场中的取向维持不变, 同时囊泡膜绕着其内部流体循环旋转, 如图 3(III).

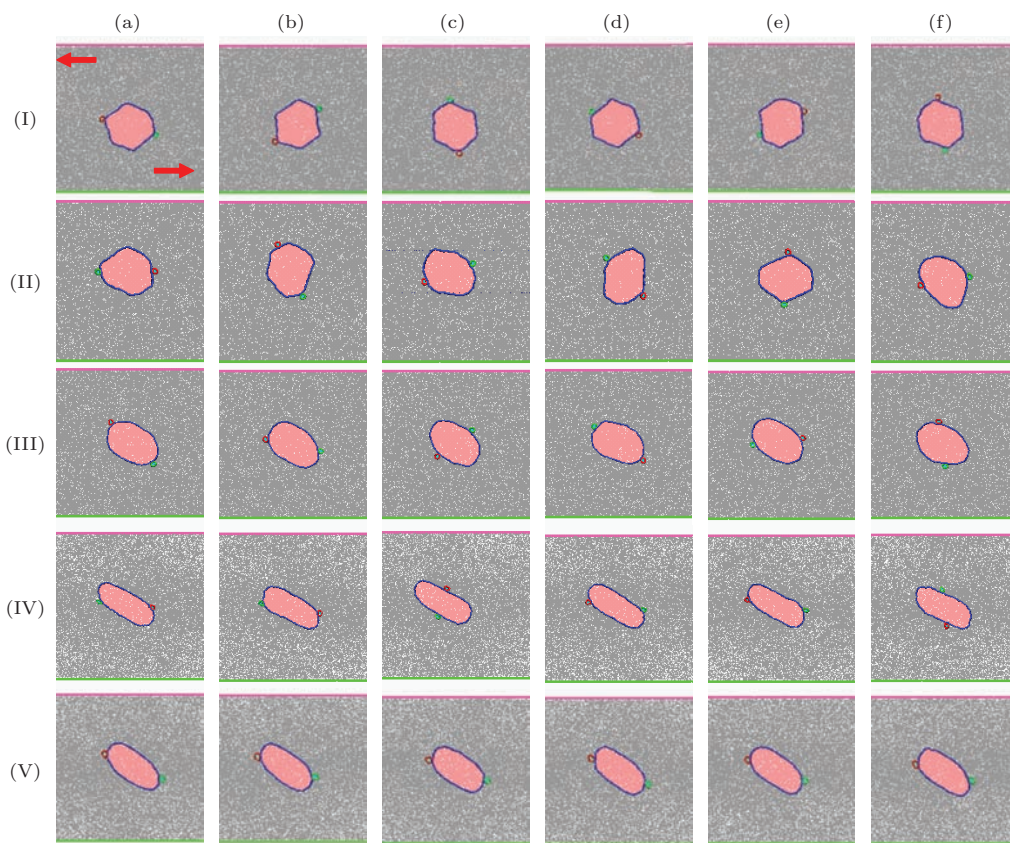


图 3 对称嫁接 2 个小囊泡的复杂囊泡在剪切流场中的不同动力学过程 (I) TB ($\dot{\gamma} = 0.01$, $N_2 = 15$); (II) TR ($\dot{\gamma} = 0.03$, $N_2 = 15$); (III) TT ($\dot{\gamma} = 0.05$, $N_2 = 15$); (IV) M ($\dot{\gamma} = 1.1$, $N_2 = 15$); (V) T ($\dot{\gamma} = 0.5$, $N_2 = 20$); 这里模拟的时间分别为 (a) $t = 0$, (b) $t = 2.2 \times 10^5 \tau$, (c) $t = 4.4 \times 10^5 \tau$, (d) $t = 6.6 \times 10^5 \tau$, (e) $t = 8.8 \times 10^5 \tau$, (f) $t = 1.1 \times 10^6 \tau$.

Fig. 3. Different dynamical processes for complex vesicles with two small grafting vesicles at different shear rates and different sizes of small grafting vesicles: (I) TB ($\dot{\gamma} = 0.01$, $N_2 = 15$); (II) TR ($\dot{\gamma} = 0.03$, $N_2 = 15$); (III) TT ($\dot{\gamma} = 0.05$, $N_2 = 15$); (IV) M ($\dot{\gamma} = 1.1$, $N_2 = 15$); (V) T ($\dot{\gamma} = 0.5$, $N_2 = 20$). Here the simulation times are (a) $t = 0$, (b) $t = 2.2 \times 10^5 \tau$, (c) $t = 4.4 \times 10^5 \tau$, (d) $t = 6.6 \times 10^5 \tau$, (e) $t = 8.8 \times 10^5 \tau$, (f) $t = 1.1 \times 10^6 \tau$.

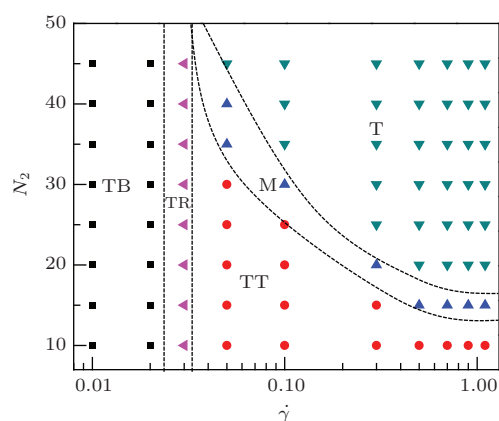


图 2 复杂囊泡在剪切流场中的运动方式随剪切率及嫁接小囊泡大小的关系 其运动方式有五种: 分别是 TB, TR, TT, M, T

Fig. 2. The diagram of dynamics states of complex vesicles under shear depending on shear rate $\dot{\gamma}$ and the size of grafted vesicles N_2 . Five motion types are observed: tumbling (TB), trembling (TR), tank-treading (TT), tank-treading/translation (M), translating (T).

当所嫁接的囊泡较小时, 其对复杂囊泡的运动方式没有明显的影响. 而当所嫁接囊泡足够大时 ($N_2 > 15$), 观察到复杂囊泡出现了新的运动方式, 即大囊泡虽然在流场中同流场方向保持一定的倾角, 但不同的是囊泡膜不再绕内部流体循环, 而是在流场中保持一定的平动速度, 同时由剪切流引起的囊泡转动消失了, 这就是我们所观察到的嫁接小囊泡后复杂囊泡在剪切流场中出现的新的特殊运动方式——平动 (translating, T), 如图 3 (V) 所示. 同时研究还发现: 其平动的方向具有随机性, 即在某些随机样本中平动的方向是向左的, 而在另外一些随机样本中平动的方向是向右的, 但向左和向右出现的概率几乎相等. 事实上, 在模拟中, 坦克履行为并非直接随剪切率及嫁接小囊泡的增大而转变到平动行为, 而是在两者之间存在过渡运动方式, 将其命名为坦克履与平动混合运动 (trank-treading/translating mixture, M), 其囊泡的运动方式为坦克履行为和与平动不规则地交替进行, 如图 3 (IV) 所示.

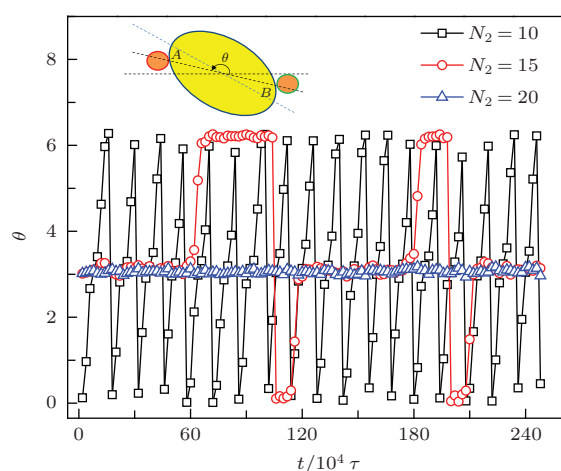


图 4 小囊泡所含不同大小的单体数 N_2 时嫁接点连线 AB 与流场方向的夹角 θ 随时间变化情况 (这里流场大小为 $\dot{\gamma} = 1.1$)

Fig. 4. θ as a function of time t for different sizes of small grafting vesicles at a shear rate of $\dot{\gamma} = 1.1$. Here θ is the angle between the flow direction and the line AB of two grafting points.

为了进一步细致描述囊泡的运动, 计算了两嫁接点连线 AB 同流场方向间的夹角 θ 随模拟时间的变化情况, 具体结果见图 4. 由于两嫁接点固定并且对称, 因此 θ 的变化能很好地反映囊泡自身的转动行为. 从图 4 可以看出, 不同运动方式下 θ 随时间 t 变化的规律存在非常显著的差异. 当剪切率为 $\dot{\gamma} = 1.1$, 嫁接囊泡较小时, 如 $N_2 = 10$, θ 随时间 t

呈现周期性振荡, 这就对应于囊泡的坦克履运动方式; 而当嫁接囊泡较大时, 如 $N_2 = 20$, θ 保持为一个恒定的常数, 其值约为 3.06, 反映囊泡此时的运动为平动. 而当嫁接囊泡大小适中时, 如 $N_2 = 15$, θ 随时间 t 的变化曲线中在 $\theta = 3.06$ 及 $\theta = 6.20$ 出现了若干个长度不等平台. 实际上由于两囊泡是对称嫁接的, 这两个平台是等价的, 因为 $\theta = 6.20$ 相当于在 $\theta = 3.06 + 3.14(\pi) = 6.20$ 做了一个 π 的平移, 这种运动方式也就是文中提到的坦克履同平动的混合运动方式.

图 5 定性解释了复杂囊泡在剪切流中由坦克履运动方式向平动运动方式转变的机理. 剪切流场中的速度梯度大到足以引起囊泡自身的一定形变时, 囊泡在剪切流中的运动方式为坦克履行为. 而复杂囊泡则是在简单囊泡上嫁接了小囊泡, 处在流场中的小囊泡同样由于流场的剪切作用使其对于大囊泡的坦克履行为具有一定的阻碍作用. 随着剪切率的增加, 由小囊泡提供的阻力增大, 同时对称嫁接使得小囊泡对坦克履行为的阻碍作用最大化, 因此在高剪切率下, 观察到了复杂囊泡的动力学行为由坦克履向平动转变. 而若嫁接的囊泡很小, 由流场剪切而导致其提供的阻力也较小, 无法影响大囊泡的坦克履行为, 所以在 $N_2 = 10$ 时, 就没有观察到平动行为的出现.

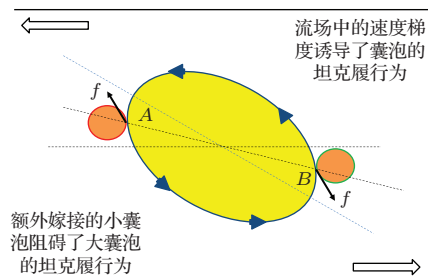


图 5 嫁接小囊泡对大囊泡运动行为的影响 在较大的流场时大囊泡的运动就从坦克履转变成平动

Fig. 5. The effect of small grafting vesicles on the dynamics of complex vesicle. At a large shear rate, the transition from the tank-treading motion to the translating motion occurs.

3.2 嫁接小囊泡的数目对复杂囊泡运动方式的影响

通过模拟还发现嫁接小囊泡的数目对于囊泡的运动方式也有很显著的影响. 图 6 给出了均匀嫁接 10 个小囊泡后在不同剪切率下不同时刻复杂囊泡的运动方式. 从图 6 可见, 复杂囊泡在剪切流场

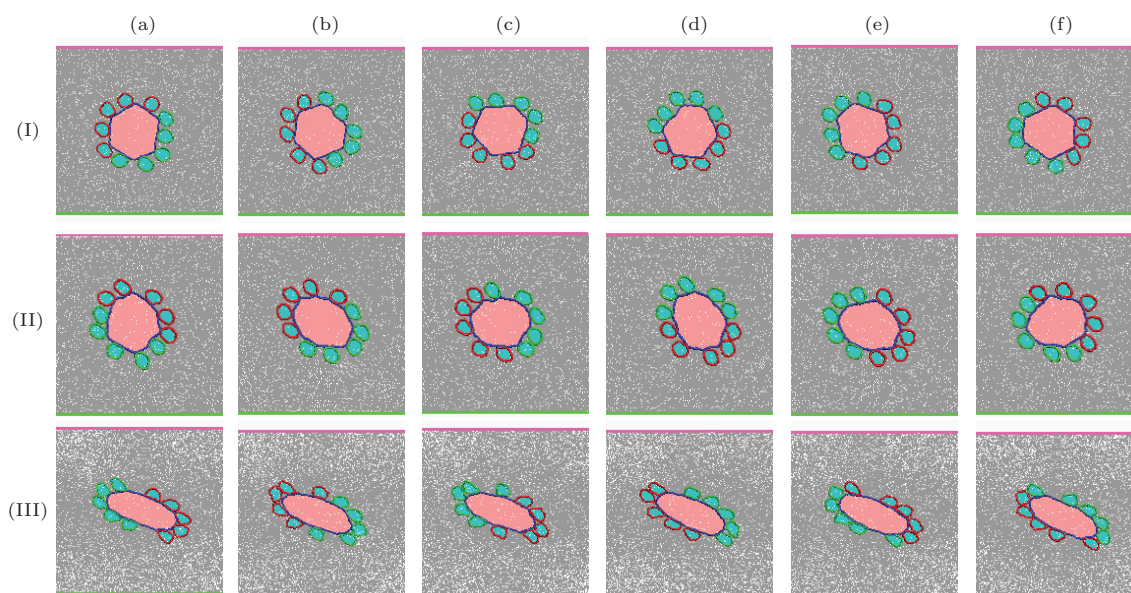


图6 均匀嫁接10个小囊泡后的复杂囊泡在不同剪切流场中的动力学过程 (I) TB ($\dot{\gamma} = 0.01$, $N_2 = 40$); (II) TR ($\dot{\gamma} = 0.03$, $N_2 = 40$); (III) TT ($\dot{\gamma} = 0.9$, $N_2 = 40$); 这里模拟时间分别为 (a) $t = 0$, (b) $t = 2.2 \times 10^5 \tau$, (c) $t = 4.4 \times 10^5 \tau$, (d) $t = 6.6 \times 10^5 \tau$, (e) $t = 8.8 \times 10^5 \tau$, (f) $t = 1.1 \times 10^6 \tau$

Fig. 6. Different dynamical processes for complex vesicles with ten small grafting vesicles at different shear rates. Here ten small vesicles are grafted uniformly. (I) TB ($\dot{\gamma} = 0.01$, $N_2 = 40$); (II) TR ($\dot{\gamma} = 0.03$, $N_2 = 40$); (III) TT ($\dot{\gamma} = 0.9$, $N_2 = 40$). The simulation time is (a) $t = 0$, (b) $t = 2.2 \times 10^5 \tau$, (c) $t = 4.4 \times 10^5 \tau$, (d) $t = 6.6 \times 10^5 \tau$, (e) $t = 8.8 \times 10^5 \tau$, (f) $t = 1.1 \times 10^6 \tau$.

中只存在三种经典的运动方式, 即翻滚, 摇摆和坦克履。没有观察到对称嫁接两小囊泡时出现的平动运动方式以及坦克履和平动混合运动方式。其实均匀嫁接10个小囊泡的复杂囊泡的运动方式与没有嫁接小囊泡的运动方式是一致的。

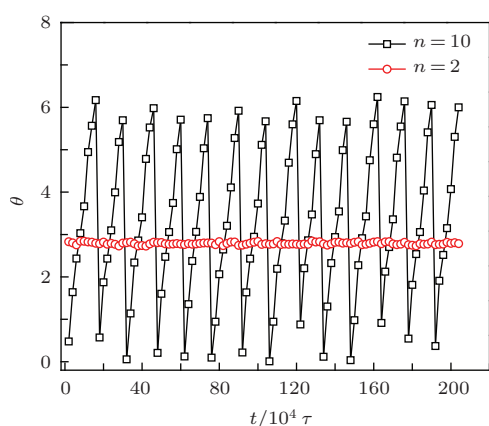


图7 嫁接不同小囊泡数目 n 时嫁接点连线 AB 同流场方向夹角 θ 随时间变化情况 ($\dot{\gamma} = 0.9$, $N_2 = 40$)

Fig. 7. θ as a function of time t for various numbers of small grafting vesicles. Here $\dot{\gamma} = 0.9$, $N_2 = 40$, and θ is the angle between the flow direction and the line AB of two grafting points.

为了进一步详细描述复杂囊泡的运动, 我们给出了剪切率为 $\dot{\gamma} = 0.9$, 小囊泡大小为 $N_2 = 40$ 时,

均匀嫁接10个小囊泡和对称嫁接2个小囊泡的复杂囊泡的 θ 角随模拟时间 t 的变化, 如图7所示。结果发现, 当均匀嫁接小囊泡后, 复杂囊泡表现为坦克履运动方式, 对应的 θ 角随时间 t 周期振荡; 而只嫁接两个小囊泡的复杂囊泡则是很明显的平动运动方式, 即 θ 角度保持不变。这是因为嫁接小囊泡的数量较多时, 由于其均匀分散在大囊泡表面, 各方向阻力相互抵消, 实际相当于未对囊泡的坦克履行为造成阻碍, 最终也就不会出现平动运动方式。

4 结 论

本文采用非平衡态分子动力学方法, 研究了复杂囊泡在剪切流下的动力学行为。当囊泡两端对称嫁接两个小囊泡以后, 在剪切流场中, 除了经典的翻滚、摇摆和坦克履行为外, 还观察到坦克履行为向平动的转变。在较大的剪切流中, 如果嫁接的小囊泡尺寸足够大, 复杂囊泡将在流场中维持特定取向的平动。研究还发现, 当均匀嫁接较多数目的小囊泡后, 就观察不到平动行为。虽然本文采用了二维的囊泡模型, 这与真实的三维体系存在一定的不同, 但初步研究发现, 对于三维的复杂囊泡体系, 在较强的剪切流下复杂囊泡同样会出现平动的运动

方式, 有关工作正在深入研究之中. 所有这些研究有助于对囊泡在剪切流场中复杂行为深入了解.

参考文献

- [1] Noguchi H, Gompper G 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 128103
- [2] de Haas K, Blom C, van den Ende D, Duits M H G, Mellema J 1997 *Phys. Rev. E* **56** 7132
- [3] Kantsler V, Steinberg V 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 258101
- [4] Zabusky N J, Segre E, Deschamps J, Kantsler V, Steinberg V 2011 *Phys. Fluids* **23** 041905
- [5] Yazdani A Z K, Bagchi P 2011 *Phys. Rev. E* **84** 026314
- [6] Doebereiner H G, Evans E, Krauss M, Seifert U, Wortis M 1997 *Phys. Rev. E* **55** 4458
- [7] Guo K, Wang J, Qiu F, Zhang H, Yang Y 2009 *Soft Matter* **5** 1646
- [8] Soddemann T, Dünweg B, Kremer K 2003 *Phys. Rev. E* **68** 046702
- [9] Finken R, Lamura A, Seifert U, Gompper G 2008 *Eur. Phys. J. E* **25** 309
- [10] Deng Z Y, Zhang D, Zhang L X 2015 *Materials Today Comm.* **3** 130
- [11] Kaoui B, Biro G, Misbah C 2009 *Phys. Rev. Lett.* **103** 188101
- [12] Kaoui B, Ristow G H, Cantat I, Misbah C, Zimmermann W 2008 *Phys. Rev. E* **77** 021903
- [13] Kaoui B, Kruger T, Harting J 2013 *Soft Matter* **9** 8057
- [14] Wen X H, Zhang D, Zhang L X 2012 *Polymer* **53** 873
- [15] Bai Z Q, Guo H X 2013 *Polymer* **54** 2146
- [16] Plimpton S J 1995 *J. Comput. Phys.* **117** 1

Dynamics of complex vesicles in shear flow^{*}

Deng Zhen-Yu Zhang Lin-Xi[†]

(Department of Physics, Zhejiang University, Hangzhou 310027, China)

(Received 24 February 2015; revised manuscript received 15 April 2015)

Abstract

Vesicles exposed to shear flow exhibit a remarkably rich dynamics. With the increase of shear rate, one can observe a tumbling-to-tank-treading transition. Besides, a complex oscillating motion, which has alternatively been called trembling, swinging, or vacillating breathing, has also been predicted theoretically and observed experimentally. While in biological systems, vesicles are always decorated by a large number of macromolecules, rendering the dynamics of vesicles in shear flow much more complex. As a powerful supplement to analytical techniques, the dissipative particle dynamics has been proved to be a useful tool in simulating nonequilibrium behaviors under shear. By replacing the conservative force in dissipative particle dynamics with a repulsive Lennard-Jones potential, the density distortion has been overcome and the no-slip boundary condition is achieved. In this article, a nonequilibrium molecular dynamic method is used to study the dynamics of two-dimensional complex vesicles in shear flow. The dynamical behaviors of the complex vesicles are closely related to shear rate and the size of small grafted vesicle. We first consider a vesicle with two small vesicles symmetrically grafted. At a weak flow, the complex vesicle maintains its equilibrium shape and undergoes an unsteady flipping motion, known as tumbling motion. At a moderate shear rate, the tumbling of the vesicle is accompanied with strong shape oscillation, which is consistent with Yazdani's simulation, in which a breathing-with-tumbling type of motion is observed, and is called trembling in this article. As the shear rate further increases, the vesicle is oriented at a fixed angle with respect to the flow direction, while the vesicle membrane circulates around its surface area, exhibiting a "well-known" tank-treading motion. For sufficiently large grafted vesicles and at a high enough shear rate, a transition from tank-treading to translating motion is observed, in which the flipping of the vesicle or the circulating of the vesicle membrane is hampered. A crossover regime, namely, the tank-treading/ translating mixture motion is also found, where translating motion alternates with tank-treading chaotically. However, when a sufficient number of small vesicles are uniformly grafted to the vesicle, the newly observed translating motion is eliminated. This study can give a deeper insight into the complexity of vesicle motions in shear flow.

Keywords: vesicle, shear flow, nonequilibrium dynamics

PACS: 82.35.Lr, 82.35.Np, 82.20.Wt

DOI: 10.7498/aps.64.168201

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 21174131, 21374102) and the Key Program of the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 20934004).

[†] Corresponding author. E-mail: lxzhang@zju.edu.cn.