

# 流场中复杂液滴的变形运动与吸附

白博峰\*, 骆政园

西安交通大学动力工程多相流国家重点实验室, 西安 710049

\* 联系人, E-mail: bfbai@mail.xjtu.edu.cn

2015-03-04 收稿, 2015-05-19 接受

国家杰出青年科学基金(51425603)资助

**摘要** 液滴动力学是多相流热物理学的重要基础研究方向. 随着科学研究的逐步深入和工业技术的不断发展, 人们发现液滴的界面可由多种物质分子组成且可出现复杂的结构, 如石油工程中表面活性剂、固体颗粒等物质吸附于油水液滴界面, 细胞等生物液滴由具有复杂分子组成和结构的膜包裹等. 研究发现复杂的分子组成和结构使液滴界面具有剪切弹性、面积扩张弹性、抗弯特性等显著不同于普通液滴表面张力的力学性质, 而复杂的界面力与流场黏性力、壁面物理化学吸附力等相互耦合导致液滴在流场中展现复杂的变形、运动、吸附等动力学行为. 本文介绍了复杂液滴界面的力学性质及其模型描述, 综述了近年来关于流场中复杂界面液滴的变形、运动、吸附行为的研究进展, 并给出了后续研究的建议.

## 关键词

多相流  
复杂液滴  
复杂界面  
复合液滴  
变形  
运动  
吸附

不同相态或组分物质形成的多相流体广泛存在于自然界以及能源、动力、石油、化学等工程领域中, 对其流动和传热传质等能质运输的持续探索一直处于流体力学、化学、工程等科学研究的前沿. 液滴两相流属于典型的多相流形式, 通常液滴由界面包裹少量液体而成, 其界面力学性质可用两侧分子引力不平衡而产生的表面张力描述. 然而, 人们发现自然界、日常生活、工业过程中广泛存在界面具有复杂分子组成和结构的复杂液滴. 例如, 石油工程领域中, 沥青质、胶质、石蜡等天然表面活性剂, 以及为提高石油采收率而添加的人工表面活性剂等物质能吸附于油水相界面, 导致油水液滴界面分子组成非常复杂<sup>[1-4]</sup>; 聚合物工程领域中的液滴, 界面可存在高分子链形成的复杂网络结构<sup>[5-7]</sup>; 细胞等生物液滴, 界面与液滴内液体的分子组成不同, 通常为磷脂双分子层, 其表面和内部镶嵌大量蛋白质大分子, 互相结合形成复杂网络结构<sup>[8-13]</sup>. 复杂分子组成和结构可导致界面具有剪切黏弹性、面积扩张黏弹性等不同于表面张力的力学性质以及其他特殊物理化学性质, 对液

滴行为产生重大影响.

复杂液滴在流场中的变形、运动、壁面吸附等动力学行为, 是多相流研究领域的重要内容, 也是发展传统工业技术和创新前沿技术的重要基础理论, 近些年来逐步成为一个热点. 一方面, 液滴动力学是液滴群悬浮液流动研究的基础. 研究发现可变形液滴的动力学行为显著影响液滴群悬浮液流动的有效黏度、流动阻力等特性<sup>[10,14-24]</sup>, 如液滴变形能力增强可减小悬浮液流动的有效黏度、液滴吸附可增大悬浮液流动阻力等. 研究复杂液滴的动力学可促进对液滴两相流流动现象的深入理解. 另一方面, 某些传统工业技术和创新前沿技术的发展理念即是以液滴动力学为理论基础. 例如, 石油工程领域的残余油开采中, 原油吸附于复杂孔隙壁面, 表面活性剂驱等提高采收率技术, 即是通过添加表面活性剂改变油水界面或岩石壁面特性, 使油滴更容易脱附、更容易从油藏多孔介质中流出<sup>[25-29]</sup>; 生物医学工程领域中, 基于壁面吸附和捕获的细胞分离技术, 即是模拟血流中白细胞或癌细胞吸附于血管壁进行迁移的体内过

**引用格式:** 白博峰, 骆政园. 流场中复杂液滴的变形运动与吸附. 科学通报, 2015, 60: 1-18

Bai B F, Luo Z Y. Deformation, motion and adhesion of complex droplets under flow (in Chinese). Chin Sci Bull, 2015, 60: 1-18, doi: 10.1360/N972014-01322

程, 利用化学改性的微通道壁面对主流中特定细胞的吸附作用, 达到细胞捕获并分离的目的<sup>[30~33]</sup>; 药物输送这一前沿技术, 其理念是模拟血流中红细胞的氧气输送功能, 将特定药物包裹于复杂液滴中并通过控制液滴行为达到药物输送的目的<sup>[34~36]</sup>. 可以看出, 复杂液滴在流场中的变形、运动、吸附等动力学行为是这些技术的共性基础问题.

本文综述了近年来关于流场中复杂液滴动力学的研究工作, 首先介绍了具有不同分子组成和结构的界面复杂力学性质, 然后综述了具有复杂界面的液滴在流场中的变形、运动和壁面吸附动力学的研究进展, 最后总结了该研究方向的已有工作, 并给出了后续研究工作的展望和建议.

## 1 液滴的界面力学性质

普通液滴的界面力学性质可用表面张力描述. 以蒸汽中的水滴为例, 界面分子受液滴内侧水分子的引力大于液滴外侧分子的引力, 导致界面受到指向液滴内侧的力, 即表面张力, 通常表征为单位长度所受的力 $\sigma$  ( $\text{N m}^{-1}$ ). 表面张力是液滴不受外力时保持球形的原因, 通常均匀温度条件下球形液滴界面上各点处的表面张力大小相同. 石油工程等领域中, 表面活性剂等异质吸附能改变液滴界面的力学性质<sup>[1~4, 37~40]</sup>. 一端亲水、一端疏水的表面活性剂分子吸附在液滴界面降低表面张力, 液滴变形、液滴内外流体流动等因素使界面上表面活性剂浓度分布不均匀, 导致界面上形成表面张力梯度, 产生马兰戈尼应力. 另外, 表面活性剂吸附层还会使液滴界面产生一些取决于界面变形的弹性应力, 如剪切弹性应力和膨胀弹性应力. 液滴内外流体中和液滴界面上的对流扩散, 以及液滴界面上的吸附脱附等过程控制了界面上的表面活性剂浓度大小及分布, 对液滴界面力学性质有显著影响.

普通液滴界面的分子组成和结构简单, 为表面张力界面, 界面由两侧流体材料共同组成, 流体性质在界面处不连续, 表面张力方向沿界面法向. 表面活性剂等异质吸附, 在液滴界面可形成一层膜, 细胞等生物液滴以及模拟细胞的聚合物液滴也由膜包裹而成. 这类液滴界面的材料与液滴内外流体不同, 而界面两侧的流体可以相同、也可不同, 可称为材料界面液滴, 此时界面通常既有法向力也有切向力, 其力学性质不能用表面张力描述. 液滴材料界面展现与其

变形相关联的弹性力学性质<sup>[6~13, 41~46]</sup>. 界面变形包括平面内(In-plane deformation)的剪切变形和面积扩张变形、以及平面外(Out-of-plane deformation)的弯曲变形, 其中剪切变形为界面微元保持面积不变时形状的变化、而面积扩张变形为形状不变时面积的变化. 与之对应材料界面具有剪切弹性、面积扩张弹性及抗弯曲特性. 另外材料界面上的分子可像流体分子一样流动, 从而界面还可具有黏性.

界面的材料组成和结构不同, 其表现出的力学性质也不同. 磷脂分子组装形成的液滴(Vesicle), 其界面为有限厚度的磷脂分子层, 表现抗弯力学特性, 界面弯曲总能量 $W_b$ 常用Helfrich模型<sup>[47, 48]</sup>描述:

$$W_b = \frac{E_b}{2} \int_S (2\kappa - \kappa_0)^2 dS + E_g \int_S \kappa_g dS, \quad (1)$$

式中 $\kappa$ ,  $\kappa_0$ ,  $\kappa_g$ 分别为界面的平均曲率、自发曲率和高斯曲率,  $S$ 为液滴表面积,  $E_b$ 和 $E_g$ 为与平均曲率和高斯曲率相关联的弯曲模量. 界面自发曲率 $\kappa_0$ 的产生有两个原因: 磷脂分子头部与尾部的不对称性和组成界面的两层磷脂分子层面积不相等<sup>[49]</sup>. 聚合物工程中的液滴(capsule, 也可称polymerized vesicle)<sup>[5]</sup>, 其界面可形成高分子链相互连接的网络结构; 细胞等生物液滴的界面存在蛋白质分子网络结构. 该类界面除了具有弯曲特性外, 还具有剪切弹性. 弹性应变能函数 $W_e$ 可由NH模型描述<sup>[50~52]</sup>:

$$W_e = \frac{E_s}{6} \left( \lambda_1^2 + \lambda_2^2 + \frac{1}{\lambda_1^2 \lambda_2^2} \right), \quad (2)$$

式中 $\lambda_1$ 和 $\lambda_2$ 为主方向拉伸比,  $E_s$ 为剪切弹性模量. 生物液滴界面通常由磷脂双分子层组成, 磷脂分子可在界面上任意流动, 但磷脂分子之间的距离很难改变(即膜具有很强的抗拉伸的力学特性), 不考虑界面与流体间的物质交换时该类界面具有面积守恒特性, 此时可采用SK力学本构模型<sup>[53]</sup>描述材料界面力学特性, 其应变能函数 $W_e$ 为

$$W_e = \frac{E_s}{8} \left[ (\lambda_1^4 + \lambda_2^4 - 2\lambda_1^2 - 2\lambda_2^2 + 2) + \frac{E_a}{E_s} (\lambda_1^2 \lambda_2^2 - 1)^2 \right], \quad (3)$$

$E_a$ 为面积扩张弹性模量, 其值越大, 界面抵抗面积变化的能力越强. 值得注意的是, 也有一些其他力学本构模型被用于描述材料界面的弹性和抗弯特性, 不同的本构模型控制下界面的弹性力学性质也略有差别<sup>[51, 54]</sup>.

对于由磷脂分子组成的材料界面(如vesicle, capsule等液滴界面), 其分子组成和结构相对清楚,

已有的力学本构模型能较好描述, 因此研究重点为界面弹性模量、弯曲模量等力学特性参数的测量. 研究发现石油工程领域的油水液滴在异质吸附作用下可在表面形成膜, 也可展现黏弹性. 然而对于这类油水液滴, 界面出现的异质吸附复杂多变, 各种活性剂分子、分子团、沥青质、胶质、石蜡、固体颗粒等不同吸附结构以及界面分子物理化学性质各不相同, 导致界面力学性质变化多样, 因此建立合适的力学本构模型并测量相关力学特性参数是研究难点.

## 2 复杂液滴的变形

液滴处在流场中时, 流体流动带来的黏性力促使液滴变形, 而液滴的界面力使其保持初始形状. 研究表面张力界面液滴在流场中的动力学行为已取得丰富的成果<sup>[1,55~61]</sup>. 近年来, 表面活性剂吸附下的液滴动力学行为, 如对流扩散造成的界面上表面活性剂浓度分布变化、温度梯度和表面活性剂浓度梯度造成的表面张力梯度等的影响, 引起了学者们的关注. 与表面张力界面液滴相比, 材料界面液滴界面剪切弹性、抗弯特性等复杂力学性质导致液滴的动力学行为显著不同, 并且模型方法也更加复杂. 随着材料界面液滴在生物液滴动力学基础研究和石油工程提高采收率、生物医学工程药物输送、化学工程微反应器等技术研究领域的应用, 材料界面液滴在流场中的动力学研究近些年也取得了较大进展. 下面重点综述了具有材料界面的复杂液滴(如细胞等生物液滴, 以及Vesicle, Capsule等生物液滴模型)在流场中的动力学研究. 首先介绍可变形液滴(包括表面张力界面液滴和材料界面液滴)在流场中变形的力学机制, 然后结合流动条件逐步复杂的研究趋势重点介绍了材料界面液滴变形的研究工作.

### 2.1 流场中液滴变形的力学机制

当液滴尺寸相对流动特征尺度(如流道最小尺寸)很小时, 液滴当地流场的速度梯度 $\nabla \mathbf{u}$ 是其变形的原因. 速度梯度由应变率张量 $\mathbf{e}$ 和旋转率张量 $\boldsymbol{\omega}$ 组成, 其中应变率 $\mathbf{e}$ 导致液滴变形, 而旋转率 $\boldsymbol{\omega}$ 促使液滴旋转,  $\boldsymbol{\omega}$ 方向与主拉伸应变方向不平行时会抑制液滴变形. 不同的流场形式具有不同的应变率 $\mathbf{e}$ 和旋转率 $\boldsymbol{\omega}$ , 因此液滴的变形行为也有所区别. 由于液滴周围流场的均匀性和稳定性在实验中很难实现, 已有研究主要针对一些特殊的流场形式, 如线性剪切流 $\mathbf{u} = (0,$

$0, z)$ , 平面双曲流 $\mathbf{u} = \gamma(x, -y, 0)$ , 拉伸流 $\mathbf{u} = \gamma(x, -0.5y, -0.5z)$ ,  $\gamma$ 为剪切率, 其应变率和旋转率分别为

$$\mathbf{e} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\omega} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \text{线性剪切流,}$$

$$\mathbf{e} = \text{diag}(1, -1, 0), \quad \boldsymbol{\omega} = 0, \quad \text{平面双曲流, (4)}$$

$$\mathbf{e} = \text{diag}\left(1, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right), \quad \boldsymbol{\omega} = 0, \quad \text{拉伸流.}$$

线性剪切流实验最容易实现(类似于流变仪的线性剪切流产生装置即可). 另外, 速度呈抛物线分布的流场是实际应用中最常见的流场形式, 如石油开采孔道中的油水液滴运移、微流体通道中的液滴流动、生物体内血流中的细胞运动等, 液滴相对抛物线流特征尺度很小时, 液滴周围流场可近似为线性剪切流. 因此, 线性剪切流中的液滴动力学研究最多, 本文主要针对线性剪切流场综述液滴动力学的研究工作.

液滴在线性剪切流场中变形的物理模型见图1(a)所示, 半径为 $R$ 、黏度为 $\lambda\mu$ 的液滴悬浮于黏度为 $\mu$ 的流体中( $\lambda$ 为液滴内外黏度比), 处于矩形( $L_x \times L_y \times L_z$ )空间的中心, 线性剪切流场通过上下平面以速度 $U$ 向相反方向运动产生, 剪切率为 $\gamma = 2U/L_z$ . 球形液滴变形的典型过程如图1(c)所示<sup>[62]</sup>, 液滴在流体黏性力的

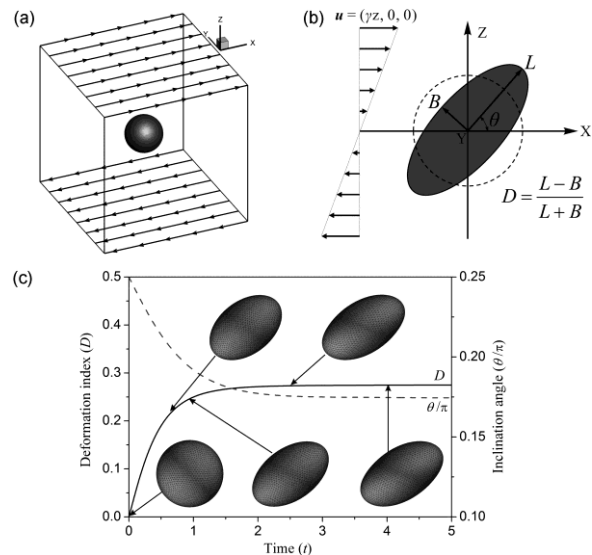


图1 线性剪切流场中液滴变形的模型. (a) 液滴在线性剪切流场中变形的示意图; (b) 液滴变形参数示意图; (c) 球形液滴变形的典型过程<sup>[62]</sup>

Figure 1 Flow configuration of drop deformation in linear shear flow. (a) Schematic of capsule deformation in linear shear flows; (b) parameters describing capsule deformation; (c) a typical case of deformation of spherical capsules<sup>[62]</sup>

作用下变形逐渐增大呈椭球形,并在界面力和黏性力共同作用下最终达到平衡状态,液滴形状不再改变,且相对于流动方向呈稳定倾角.液滴行为可用变形指数 $D=(L-B)/(L+B)$ 和倾角 $\theta$ 描述,如图1(b)所示,其中 $L$ 和 $B$ 分别为椭球的长轴和短轴长度, $\theta$ 为椭球长轴与流动方向的夹角.球形液滴的 $D=0$ ,随液滴变形增大, $D$ 增大.

液滴变形是黏性力与界面力相互平衡的结果,液滴内外流体流动由质量和动量守恒方程控制,忽略流体惯性且通过特征长度 $R$ 和特征时间 $\gamma^{-1}$ 无量纲化后方程为

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = 0, \boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{I} + \lambda(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T), \text{液滴内,} \\ \nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = 0, \boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{I} + (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T), \text{液滴外.} \end{aligned} \quad (5)$$

边界条件为

$$\mathbf{u} = (\mathbf{e} + \boldsymbol{\omega}) \cdot \mathbf{x}, \quad \text{当} |\mathbf{x}| \rightarrow \infty. \quad (6)$$

液滴界面满足速度连续和应力平衡条件:

$$[\mathbf{u}]_s = 0, \quad (7)$$

$$[\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}]_s = (\boldsymbol{\sigma}_{\text{ext}} - \boldsymbol{\sigma}_{\text{int}}) \cdot \mathbf{n} = -\frac{\mathbf{f}_m}{Ca}, \quad (8)$$

其中 $[\ ]_s$ 表示跨过界面的变化量, $\mathbf{f}_m$ 是界面力.毛细数 $Ca$ 为黏性力与界面力的比值.表面张力界面和材料界面的性质差别体现于 $\mathbf{f}_m$ 和 $Ca$ ,如具有剪切弹性的材料界面的毛细数为 $Ca = \mu R \gamma / E_s$ .

## 2.2 材料界面液滴的变形

材料界面液滴变形的研究仍集中于忽略流体惯性的简单流动条件,研究趋势由小变形液滴向大变形液滴发展<sup>[50-52,54,63-79]</sup>.Barthes-Biesel和Rallison<sup>[79]</sup>采用小变形理论分析方法发现 $Ca \ll 1$ 时,液滴变形 $D$ 的稳态值随 $Ca$ 满足线性增加,稳态倾角 $\theta = \pi/4$ (即液滴长轴与流场主拉伸应变方向一致).近些年的数值模拟研究发现液滴变形较大时,随 $Ca$ 增大, $D$ 呈非线性增加趋势,倾角 $\theta$ 在 $[0, \pi/4]$ 间逐渐减小.液滴变形还受液滴内外侧流体黏性力( $\boldsymbol{\sigma}_{\text{int}}$ 和 $\boldsymbol{\sigma}_{\text{ext}}$ )影响,见式(7), $Ca$ 只体现了液滴外侧流体黏性力的作用,因此液滴内外黏度比 $\lambda$ 是决定液滴变形的另一个控制参数<sup>[15,50,52,76,80]</sup>.Barthes-Biesel等人<sup>[76]</sup>发现 $\lambda \ll 1$ 时, $\lambda$ 不影响液滴变形,此时液滴外侧流体黏性力起主导作用;而 $\lambda \gg 1$ 时, $Ca$ 不影响液滴变形,此时液滴内侧流体黏性力起主导作用, $D$ 随 $\lambda$ 满足反比例关系减小, $\theta =$

0.总的来说,随 $Ca$ 增大、 $\lambda$ 减小,液滴变形增大,倾角在 $[0, \pi/4]$ 间减小.对于材料界面的复杂力学特性,此处定义的 $Ca$ 只考虑了剪切弹性.研究发现当 $Ca$ 很小或者很大时液滴界面内可能产生压应力,导致界面出现褶皱等不稳定现象;而考虑界面抗弯特性时,这种不稳定性能得到抑制.另外界面的弯曲模量 $E_b$ 和膨胀模量 $E_e$ 增大都能使液滴变形减小,此时液滴保持初始形状的能力更强.

## 2.3 流体惯性影响

流体惯性对液滴变形作用的大小可体现于颗粒雷诺数 $Re = \rho \gamma R^2 / \mu$ (惯性力与黏性力的比值), $\rho$ 为液滴外流体密度.对于半径 $10 \mu\text{m}$ 的液滴(常见生物液滴和聚合物液滴的大小)悬浮于水( $\rho = 1000 \text{ kg m}^{-3}$ ,  $\mu = 0.001 \text{ Pa s}$ )中,流场剪切率为 $1 \sim 100 \text{ s}^{-1}$ (常见实验参数和毛细血管流动参数), $Re \approx 10^{-4} \sim 10^{-2}$ ,此时惯性作用通常可忽略<sup>[45,81]</sup>.然而实际应用中流场剪切率可出现很高的值(例如人体大血管中的血流剪切率可超过 $100000 \text{ s}^{-1}$ ),液滴大小也可达到几十几百微米,此时 $Re$ 可超过 $10$ <sup>[82-85]</sup>.另外,近年来惯性微流体技术获得越来越多的关注与应用,较高雷诺数的流动被用来操控液滴的运动<sup>[86-88]</sup>.此时,流体惯性对液滴变形的作用可能十分重要.考虑惯性时液滴内外侧流体的流动通过完整的纳维斯托克斯方程控制:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -p\mathbf{I} + \frac{1}{Re}(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T), \quad (9)$$

$Re \approx 1$ 时,流体惯性可显著影响液滴内外黏性力( $\boldsymbol{\sigma}_{\text{int}}$ 和 $\boldsymbol{\sigma}_{\text{ext}}$ )的大小和分布,进而影响液滴的变形行为.

式(8)左侧对流项(非线性项)的引入,使得常用的理论分析、边界积分/边界元等方法无法适用,大部分研究集中于忽略流体惯性的Stokes流动中的液滴变形.我们课题组基于界面追踪法(Front Tracking Method)建立液滴两相流动力学模型,考虑液滴材料界面的剪切弹性等特殊力学性质的同时针对完整的纳维斯托克斯方程求解流场,从而能合理考虑流体惯性对材料界面液滴变形的影响,模拟研究了 $Re \approx 10^{-2} \sim 10$ 的线性剪切流中液滴的变形行为<sup>[78,85]</sup>.如图2所示,与低雷诺数下的液滴变形显著不同,较高雷诺数下( $Re \approx 1 \sim 10$ ),液滴的变形 $D$ 和倾角 $\theta$ 随时间出现振荡,最终达到稳定,并且振荡幅值和响应时间随 $Re$ 升高而增大;液滴变形振荡过程中,

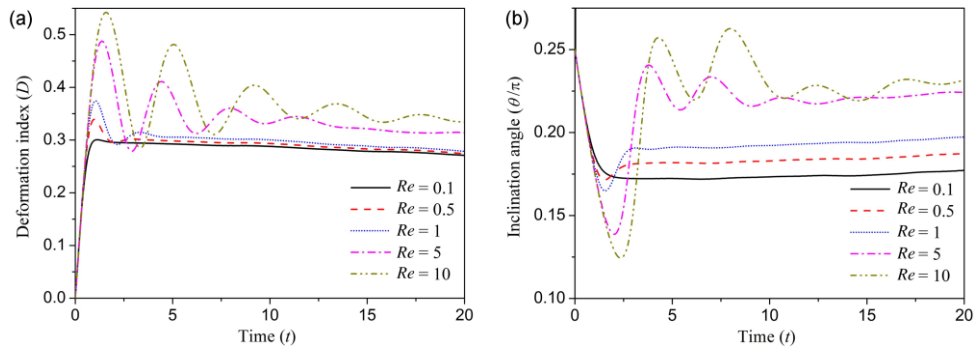


图2 (网络版彩色)线性剪切流中不同雷诺数下液滴的变形 $D$ (a)和倾角(b)随无量纲时间 $t$ 的变化<sup>[85]</sup>

Figure 2 (Color online) Deformation index (a) and inclination angle (b) of capsules in linear shear flows at different Reynolds numbers plotted as functions of dimensionless time<sup>[85]</sup>

倾角可能大于 $\pi/4$ ;  $Re \approx 1 \sim 10$ 范围内, 随 $Re$ 升高, 液滴达到稳态后的变形和倾角显著增大. 另外 $Re < 0.1$ 时, 雷诺数增大对液滴变形影响很小, 而 $Re > 0.1$ 时, 雷诺数的增大对液滴的瞬态变形和稳态变形特性都有显著影响, 据此提出雷诺数达到 $10^{-1}$ 量级以上时, 可变形液滴在流场中的动力学研究必须考虑流体惯性的影响.

## 2.4 液滴内部复合结构影响

通常液滴内部为均匀流体, 但内部结构复杂时会使液滴的变形行为受到影响. 实际应用中存在内部包裹相界面的复杂液滴, 如石油工程中的油水多重液滴, 白细胞、癌细胞、寄生虫感染的红细胞等含有内核结构的生物液滴. 我们课题组建立了具有材料界面的复合液滴模型(即液滴内部包裹另一个液滴)<sup>[89]</sup>, 研究了球形复合液滴在线性剪切流中的变形行为. 发现外部线性剪切流引起外层界面的旋转运动, 使其内部流场(即内层液滴所处流场)变化为旋转流动形式, 从而降低了内层液滴周围流场的应变率 $e$ . 该效应在外层液滴变形很小时(接近球形)尤其明显, 因此外层界面能减小内层液滴的变形, 起到保护作用. 当内层液滴较大时, 内外层界面靠近, 两者之间的水动力学作用明显. 通过流场应力分布分析, 发现内外层界面之间形成由椭球形液滴短轴指向长轴的压力梯度, 该压力梯度阻碍外层液滴变形而促进内层液滴变形. 因此, 内层液滴体积增大或变形减小, 内外层界面之间距离越近, 两者之间的相互作用越明显, 导致外层液滴变形减小而内层液滴变形增大, 一定条件下内层液滴的变形甚至可大于外层液滴(即使内层界面的毛细数更小), 例如内层液滴体积率为

0.2, 内外层界面毛细数比值小至0.35时, 内层液滴的变形仍可大于外层液滴.

## 2.5 壁面影响

上述研究通常认为液滴处于无限大流场中(即液滴尺寸远小于流动特征尺度), 壁面作用可忽略. 然而很多实际应用中通道壁面与液滴相距很近, 如石油开采的孔道-喉道结构与油水液滴大小相近、毛细血管尺寸可接近甚至小于红细胞尺寸、单液滴操控微流体装置中通道尺寸往往与液滴尺寸接近甚至更小, 此时通道壁面对液滴变形影响不可忽略. 我们课题组研究发现通道尺寸与液滴尺寸相近时, 线性剪切流场中液滴与壁面之间形成高压区域, 导致液滴变形增大, 倾角更接近流动方向(即 $\theta$ 更小)<sup>[90]</sup>. 值得注意的是, 研究线性剪切流场中液滴变形可作为液滴相对通道很小时抛物线流中液滴变形的基础, 但当通道较小时, 液滴周围流场的剪切率不再是定值, 而是显著变化的, 此时研究抛物线流中的液滴变形更加重要. 已有研究发现液滴周围剪切率的变化, 使得液滴在抛物线流场中能展现出更加复杂的形状和变形行为<sup>[23,91-97]</sup>, 如液滴不再展现线性剪切流中的椭球形, 而展现子弹形状、雨伞形状, 甚至出现不对称的形状, 见图3<sup>[93]</sup>. 抛物线流场中剪切率的非线性分布特点, 以及壁面与液滴的相互作用等导致对液滴动力学的研究更加困难.

## 3 复杂液滴的运动

表面张力界面液滴与材料界面液滴界面力学性质的差异导致两者在剪切流场中的运动显著不同. 静止流体中表面张力界面液滴平衡状态下为球形,

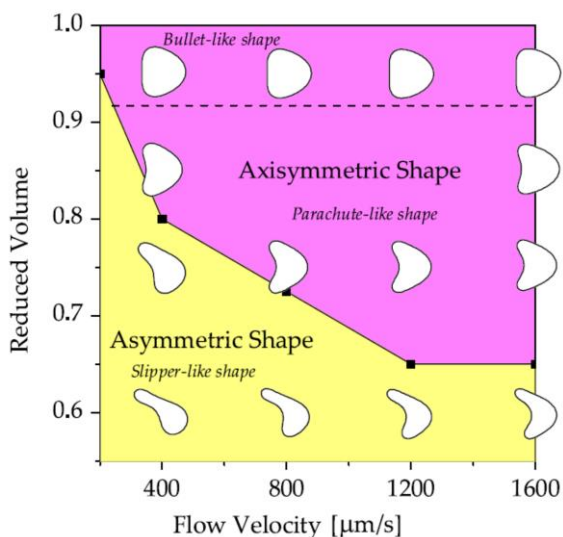


图 3 (网络版彩色)材料界面液滴(vesicle)在二维抛物线流场中的形状分布相图<sup>[93]</sup>

Figure 3 (Color online) Phase diagram for shape of vesicles in two-dimensional parabolic flows<sup>[93]</sup>

而材料界面液滴可呈椭球形、双凹碟形等更加复杂的形状,复杂的平衡态形状使材料界面液滴在剪切流场中能展现坦克履带式运动、翻滚式运动等多种运动模式.液滴运动模式显著影响液滴群悬浮液的有效黏度,因此,对流场中液滴运动模式的深入理解能促进对液滴悬浮液流动特性的研究,并且是对物质输送等功能液滴实现微流操控的理论基础.这部分将首先介绍具有不同界面力学性质的液滴在静止流体中的形状,然后综述不同初始形状的材料界面液滴在线性剪切流场以及考虑流体惯性、壁面影响等流动条件下的运动行为等研究进展.

### 3.1 静止流体中液滴的形状

具有表面张力界面的液滴在静止流体中平衡状态下通常保持球形,因为球形的表面积最小,从而表

面能最低.然而具有材料界面的液滴平衡状态下却可展示多种多样的形状<sup>[98-101]</sup>.例如磷脂分子组装而成的界面包裹流体形成的液滴(vesicle),其表面积往往由磷脂分子数量确定,不同渗透压条件下液滴体积可不同.当表面积 $A$ 和体积 $V$ 确定时,液滴形状可通过界面弯曲能量最小预测,见式(1),且通常不是球形.定义等效半径 $R$ 描述与液滴体积相同的球形的大小,形状参数(the excess area)或(the reduced volume)描述液滴形状与球形的差别:

$$R = \left( \frac{V}{4\pi/3} \right)^{1/3}, \quad \Delta = \frac{A}{R^2} - 4\pi, \quad \nu = \frac{V}{4\pi/3(A/4\pi)^{3/2}}. \quad (10)$$

液滴为球形时,  $\Delta = 0$  为最小值而  $\nu = 1$  为最大值.正常红细胞平衡状态下( $A = 134 \mu\text{m}^2$ ,  $V = 94 \mu\text{m}^3$ )为双凹碟形,其形状函数<sup>[85,102,103]</sup>为

$$z = \frac{R_0}{2} \sqrt{1 - \frac{x^2 + y^2}{R_0^2}} \left[ C_0 + C_2 \frac{x^2 + y^2}{R_0^2} + C_4 \frac{(x^2 + y^2)^2}{R_0^4} \right], \quad (11)$$

式中系数 $C_0, C_2, C_4$ 分别为0.207, 2.003, -1.123,  $R_0$ 为对称面圆的半径(可用来调整细胞体积),其形状参数值为 $\Delta = 4.28$ 和 $\nu = 0.65$ .结合实验观察和理论预测定量研究材料界面液滴平衡状态时的形状是基础研究方向之一.<sup>[98-101]</sup>

### 3.2 线性剪切流场中液滴的运动

将椭球形固体颗粒置于线性剪切流场中,流体黏性力作用于颗粒促使颗粒呈现翻滚运动,即颗粒沿着流动方向旋转,长轴与流动方向的夹角 $\theta$ 在 $[0, 2\pi]$ 之间周期性的变化.非球形的材料界面液滴在剪切率较小的线性剪切流场中展现类似于固体颗粒的翻滚式运动(tumbling, TU),见图4(b)<sup>[104]</sup>.流场剪切率较大时,液滴可呈现坦克履带式运动(tank-treading, TT),见图4(a)<sup>[105]</sup>,即液滴形状和倾角保持

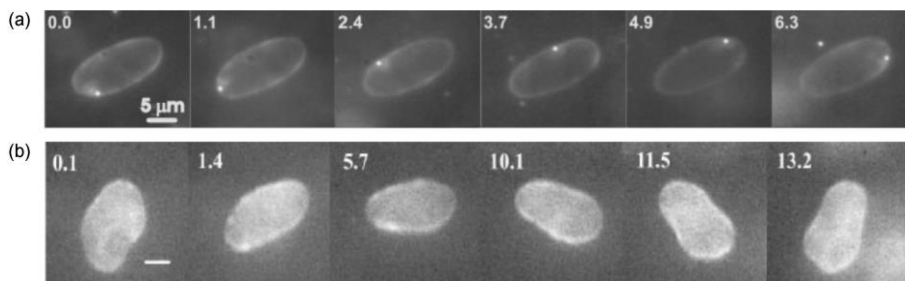


图 4 线性剪切流中材料界面液滴(Vesicle)的运动. (a) 坦克履带式运动<sup>[105]</sup>; (b) 翻滚式运动<sup>[104]</sup>

Figure 4 Dynamics of vesicles in linear shear flows. (a) Tank-treading<sup>[105]</sup>; (b) tumbling<sup>[104]</sup>

稳定,但液滴界面和内部流体围绕液滴中心呈旋转运动,此时外部流体黏性力作用于液滴的能量通过液滴界面和内部流体的旋转被耗散. TU与TT的最大区别体现在液滴倾角 $\theta$ 的变化: TT时 $\theta$ 为定值, TU时 $\theta$ 在 $[0, 2\pi]$ 之间周期性变化.

很多学者采用理论分析<sup>[106~116]</sup>、数值模拟<sup>[103,117~130]</sup>和实验方法<sup>[104,105,131~137]</sup>对材料界面液滴的运动模式特性及转变进行了研究. Keller和Skalak<sup>[106]</sup>理论分析了 $Ca \ll 1$ 时椭球形液滴(长短轴分别为 $L$ 和 $B$ )的运动,假设液滴运动时不发生变形,通过黏性力与界面力的力矩平衡、黏性力做功与液滴能量耗散平衡,获得了倾角 $\theta$ 的求解方程:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = A_1 + A_2 \cos 2\theta, \quad (12)$$

$$A_1 = -\left(\frac{\gamma}{2} + \frac{2LB}{L^2 + B^2} \frac{\partial \varphi}{\partial t}\right), \quad A_2 = \frac{\gamma}{2} \frac{L^2 - B^2}{L^2 + B^2},$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = -\frac{\gamma f_3}{f_2 - \lambda f_1} \cos 2\theta,$$

其中 $\varphi$ 为界面上某一定点的相位角, $\partial \varphi / \partial t$ 为界面旋转频率, $f_1, f_2, f_3$ 为只与液滴形状相关的系数<sup>[106,109]</sup>.  $A_2 = -A_1$ 时,液滴运动发生TT-TU转变. 对于形状一定的液滴当内外黏度比超过临界值 $\lambda_c$ 时液滴运动由TT转变为TU,且 $\lambda_c$ 随 $\Delta$ 升高而降低. KS模型的局限在于只适用于小变形量的材料界面液滴,且 $\lambda_c$ 与流场剪切率无关. 然而细胞等生物液滴在流动中可展现很大变形,实验也观察到增大流场剪切率能使液滴运动从

TU转变为TT.数值模拟也发现液滴变形对TT-TU转变有显著影响: TT-TU转变的 $\lambda_c$ 随液滴毛细数 $Ca$ 升高而升高,即越容易变形的液滴越容易出现坦克履带式运动. 另外,液滴很强的变形能力使液滴运动模式在TT-TU转变区域出现新的运动模式,例如,呼吸式运动(vacillating-breathing, VB),液滴运动与TT相似,但液滴展现很大变形且形状出现周期性振荡,而倾角 $\theta$ 在0附近周期性振荡;摇摆式运动(Swinging, SW),液滴运动与VB相似,只是倾角 $\theta$ 在一大于0的值附近周期性振荡. SW等运动模式也在实验中获得验证. 实验还发现了液滴的颤抖式运动(Trembling, TR),液滴形状和倾角都出现不规则的振荡.

红细胞由于具有特殊的形状(双凹碟形)、极强的变形能力和复杂的界面特性,在剪切流中展现非常复杂的运动<sup>[103,120,127,130,131,134,138~145]</sup>. 翻滚式运动和坦克履带式运动最早在红细胞流动实验中被观察到<sup>[138,139]</sup>, Abkarian等人<sup>[131]</sup>2007年实验观察到红细胞的摇摆式运动. 当红细胞的对称轴不在剪切流场的剪切平面时, Dupire等人<sup>[134]</sup>2012年的实验发现了红细胞更多的运动模式,如对称轴垂直于剪切平面时的滚动式(rolling, R),红细胞对称轴的运动与其形状变化的叠加使其体现出来的运动更加复杂. 数值模拟研究进一步展示了红细胞在剪切流中的复杂形态变化. 毛细数较大时,红细胞变形为椭球形,展现典型的坦克履带式运动,见图5(a);毛细数较小时,红细胞能保持双凹碟形,展现典型的翻滚运动,见图5(b);

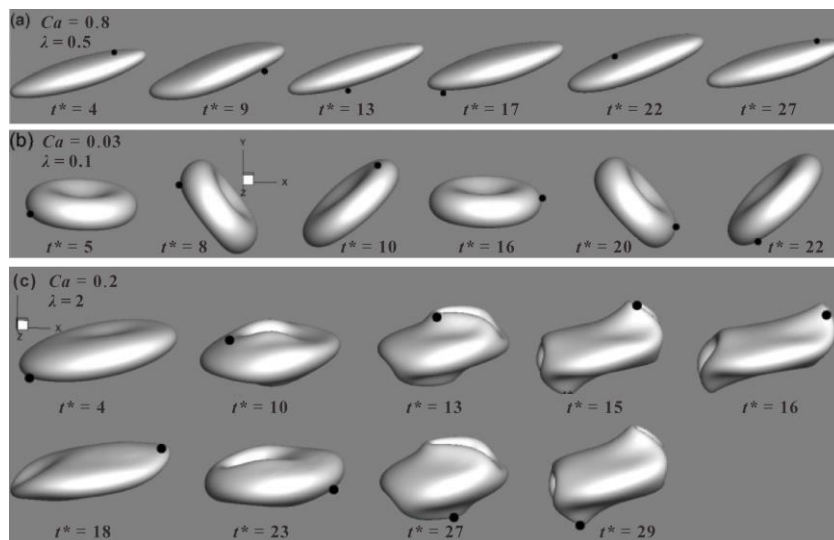


图5 线性剪切流中双凹碟形液滴的运动. (a) 坦克履带式运动; (b) 翻滚式运动; (c) 呼吸式运动<sup>[103]</sup>

Figure 5 Dynamics of biconcave vesicles in linear shear flows. (a) Tank-treading; (b) tumbling; (c) vacillating-breathing<sup>[103]</sup>

在中等毛细数范围, 红细胞既不是光滑的椭球形, 也不能保持双凹碟形的形状, 展现呼吸式运动, 见图 5(c)<sup>[103]</sup>. 复杂的形态变化使得红细胞运动模式的识别更加困难. 另外, 界面的剪切模量、膨胀模量、弯曲模量以及初始应力状态都对红细胞在剪切流动中的动力学行为有显著影响. 针对材料界面液滴(如红细胞及红细胞模型)运动的研究, 重点之一仍然是形状参数、内外黏度比、界面力学性质等因素对液滴运动模式转变和各种运动模式特性的影响规律及内在机理, 而考虑更加复杂的形状(如比表面积很大的形状)和界面性质(剪切模量、弯曲模量、膨胀模量、界面黏性、自发曲率、初始应力状态等)仍然存在挑战性, 是研究趋势.

国内研究者也对具有复杂界面的生物液滴在剪切流动中的运动进行了数值模拟研究. 上海交通大学鲁传敬教授课题组针对红细胞流体力学开展了研究<sup>[146~149]</sup>, 由于红细胞界面具有弹性、抗弯等特殊力学性质, 浸入边界法被用于捕捉流场中的红细胞界面, 模拟了二维红细胞和三维球形弹性液滴在线性

剪切流场中的变形与运动, 研究了液滴的坦克履带式运动特性, 展示了界面不同力学本构关系(包括线性胡克定律、非线性胡克定律、非线性Skalak定律)对液滴运动的影响. 同济大学陈硕教授课题组介绍了耗散粒子动力学方法在红细胞等复杂液滴动力学研究中的应用<sup>[150]</sup>.

### 3.3 复杂流动条件下液滴的运动

除界面特性复杂之外, 关于材料界面液滴运动的研究正逐步关注复杂的流动条件或者复杂的液滴内部结构<sup>[85,90,132,151~166]</sup>. 例如, 因为体内血流中红细胞往往处于非稳态流场中, 液滴在非稳态流场或周期性变化流场中的动力学已有少数研究. 另外, 体内大血管流动、惯性微流体流动等很多实际应用中, 流体惯性影响往往是不可忽略的. 我们课题组研究发现雷诺数增大到0.1~10时, 流体惯性对椭球形液滴和红细胞的运动有显著影响, 见图6<sup>[85]</sup>. 保持其他参数不变而只增大 $Re$ 可引发液滴运动由TU向SW的转变;  $Re$ 增大可抑制液滴的TU运动而促进SW运动; 从液

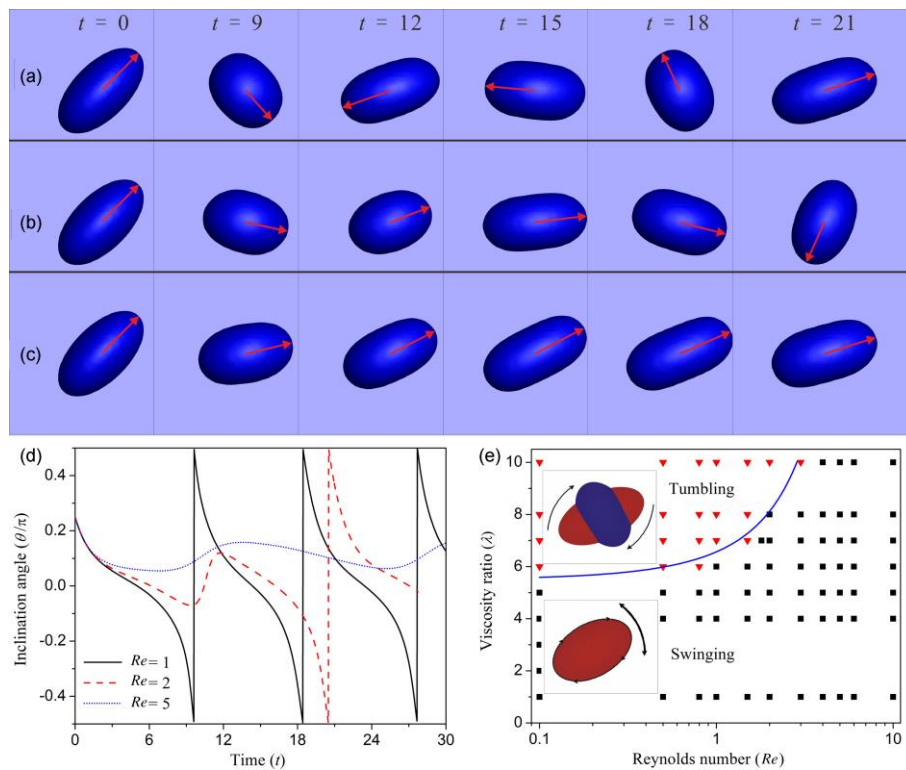


图 6 (网络版彩色)线性剪切流中雷诺数对材料界面液滴(vesicle)运动的影响. (a) 翻滚式运动; (b) 摇摆式向翻滚式转变; (c) 摇摆式运动; (d) 倾角随无量纲时间的变化; (e) 液滴运动模式的 $\lambda-Re$ 分布相图<sup>[85]</sup>  
**Figure 6** (Color online) Effects of Reynolds number on dynamics of vesicles in linear shear flows. (a) Tumbling; (b) swinging-to-tumbling transition; (c) swinging; (d) inclination angle as dimensionless time; (e)  $\lambda-Re$  phase diagram<sup>[85]</sup>



滴运动模式的 $\lambda-Re$ 分布相图发现,  $Re$ 增大提高SW-TU转变的临界黏度比. 除此以外, 微流体通道、毛细血管等流动条件下, 流场不满足无限大条件, 此时壁面作用凸显. 我们课题组关于壁面限制条件下线性剪切流中液滴运动的研究发现<sup>[90]</sup>: 液滴与壁面靠近时会产生局部高压区域, 限制液滴的TU运动, 因此减小通道尺寸能使液滴运动由TU向SW转变. 实际应用中通道流动通常为抛物线流动形式, 此时液滴除了展现TT, TU等运动模式外, 还会产生垂直于流动方向的横向迁移运动, 导致液滴的动力学行为更加复杂.

当液滴内部包裹其他固体颗粒或者液滴时(即复合液滴), 可展现单层界面液滴没有的新特性<sup>[152,162,166]</sup>. 如单层界面液滴黏度比为1时不能展现TU运动, 而复合液滴内部的颗粒或液滴足够大时能使液滴展现TU运动; 球形的单层界面液滴体现TT运动, 而复合液滴内部包裹的椭球形颗粒翻滚时能使复合液滴展现SW运动. 尽管复合液滴体现了更多有趣且更加复杂的动力学行为, 但由于内层颗粒或液滴的引入导致内外层液滴间相互作用明显, 对复合液滴进行探究更加困难, 因此复合液滴动力学研究仍处于起步阶段. 血流中的白细胞、以及寄生虫感染的红细胞等生物液滴呈现典型的复合液滴结构, 石油工程中也存在油-水-油或水-油-水等复合液滴, 另外液滴的复合结构也被用于实现空心微球制备等材料工程和多药物输送等生物医学工程技术中, 因此需要进一步探索研究复合液滴的运动, 从而可促进对生理和病理条件下的血液流动特性的理解以及各种相关前沿技术的发展.

## 4 复杂液滴的吸附

液滴与固体壁面靠近时, 两者间的相互作用体现于两者之间流体层内的速度场和应力场变化, 显著影响液滴的动力学行为; 当液滴与壁面接触时, 两者间的相互作用通过吸附作用体现, 是控制液滴行为的关键因素之一. 液滴与壁面的吸附很常见, 如石油工程中吸附于复杂岩石壁面上的原油在水驱作用下的脱附过程, 白细胞、癌细胞等生物液滴从血流吸附于血管壁进而迁移到血管外的生物过程等. 普通液滴与壁面接触时, 分子间作用力导致两者之间形成物理吸附; 当液滴表面为材料界面时, 界面上的物质与壁面上的物质可发生化学反应形成化学吸附. 流

场黏性力、界面弹性和壁面吸附力的共同作用使液滴展现复杂的吸附动力学行为, 而界面力学性质的差异导致材料界面液滴的吸附行为与表面张力界面液滴显著不同. 本部分将综述液滴与壁面间的吸附作用及其模型描述, 以及流场中材料界面液滴在物理吸附或化学吸附作用下体现的复杂吸附动力学行为.

### 4.1 液滴与壁面的吸附作用

表面张力界面液滴与壁面接触时形成三相接触线和接触角, 静止状态下微小液滴呈球冠状(重力作用不显著时), 其形状由液滴体积和接触角决定, 外部流场驱动液滴运动时, 三相接触线的移动规律及机理是理解液滴运动的关键<sup>[5,167,168]</sup>. 当液滴表面为材料界面时, 壁面通过吸附能 $W_a$ 影响液滴行为, 静止状态下材料界面液滴的形状是界面变形能与壁面吸附能相平衡的结果<sup>[5,169-173]</sup>. 只考虑界面抗弯曲特性时, 界面弯曲能量 $W_b$ (式(1))与 $W_a$ 相互平衡, 吸附力很弱时, 初始为球形的液滴吸附在壁面的形状仍近似球形; 而吸附力很强时, 液滴呈现与壁面有平铺接触面的近似球冠状. 考虑界面剪切弹性等其他力学特性时, 界面应变能 $W_e$ (式(2))也非常重要, 不同初始形状、不同吸附能等条件下, 材料界面液滴在壁面吸附作用下达到平衡时可展现多种复杂形状.

研究流场中材料界面液滴在壁面上的吸附动力学时, 材料界面与壁面的吸附力及其模型描述十分关键. Seifert和Lipowsky<sup>[169]</sup>提出接触势能模型(contact potential), 假设界面与壁面之间没有流体、完全接触, 接触势能与吸附面积成正比. 该模型模拟液滴沿壁面移动时存在困难, 需要引入移动接触线模型<sup>[173]</sup>. Cantat等人<sup>[170]</sup>提出有限范围势能模型(finite-ranged potential), 液滴被长程吸引力(long-range attractive)和短程排斥力(short-range repulsive)共同作用, 界面与壁面之间存在流体薄层, 其吸附能 $W_a$ 表达式为

$$W_a = w \left( \frac{\delta_a}{z} \right)^2 \left[ \left( \frac{\delta_a}{z} \right)^2 - 2 \right], \quad (13)$$

式中 $\delta_a$ 为平衡状态时界面与壁面间流体薄层厚度,  $w$ 为单位面积吸附能,  $z$ 为界面与壁面之间的距离. 对于弱吸附或物理吸附作用(weak adhesion或non-specific adhesion), 吸附能来源于范德华力、静电力、水合力等分子作用力,  $\delta_a$ 和 $w$ 的值取决于液滴界面和壁面的物理性质, 通常 $\delta_a$ 在30~100 nm间,  $w$ 在

$5 \times 10^{-10} \sim 10^{-6} \text{ J m}^{-2}$ 间<sup>[171,173-175]</sup>. 很多情况下液滴界面与壁面可形成强吸附或化学吸附作用(strong adhesion或specific adhesion)<sup>[171,176-181]</sup>, 如细胞与血管壁或化学改性壁面的抗体-抗原作用. 尽管势能模型通过增大 $w$ 值也可用于化学吸附作用的模拟, 但其不能考虑界面与壁面间吸附键形成和断裂的非稳态过程. Bell<sup>[176]</sup>和Dembo等人<sup>[177]</sup>及其他学者发展了反应动力学模型, 可成功考虑吸附键的形成与断裂, 模拟单个吸附键为系数 $k_b$ 的弹簧, 界面与壁面间的吸附力 $f_a$ 为

$$f_a = N_b f_b = N_b k_b (l_b - l_{b0}), \quad (14)$$

式中 $N_b$ 为吸附键密度,  $f_b$ ,  $l_b$ ,  $l_{b0}$ 分别为单个吸附键的吸附力、长度和原长. 吸附键的形成与断裂是可逆过程,  $N_b$ 通过反应动力学方程控制:

$$\frac{\partial N_b}{\partial t} = k_f (N_l - N_b)(N_r - N_b) - k_r N_b, \quad (15)$$

式中 $N_l$ 和 $N_r$ 为液滴界面和壁面上化学物质的分布密度,  $k_f$ 和 $k_r$ 为吸附键形成和断裂的速率.

## 4.2 流场中材料界面液滴的吸附动力学

材料界面液滴在流场黏性力和壁面吸附力的共同作用下可展现复杂的吸附、脱附等动力学行为. Cantat等人<sup>[182-185]</sup>研究了剪切流场中液滴在物理吸附作用下从壁面脱附的动力学过程. 如图7, 在剪切率较小的流场中, 液滴在流体拖曳力作用下沿流动方向滑动; 剪切率较高( $\gamma \approx 2.5 \text{ s}^{-1}$ )时, 流体剪切带来的升力克服壁面吸附力使液滴脱离壁面. Hammer研究小组采用反应动力学模型对白细胞等生物液滴在壁面化学吸附作用下的吸附动力学进行了系列研究<sup>[186-191]</sup>, 模拟生物液滴为不可变形的刚性颗粒, 重点分析了剪切率、吸附键参数等对颗粒吸附动力学的影响, 发现剪切率较低时颗粒可吸附不动(firm adhesion), 剪切率增大可使颗粒吸附动力学状态转变为滚动(rolling adhesion). 对比可看出物理吸附作用下, 吸附力垂直于壁面, 液滴在很小剪切率下即可沿流

动方向滑动, 且由于物理吸附力很弱, 液滴在很低剪切率下( $\gamma \approx 2.5 \text{ s}^{-1}$ )即可脱离壁面; 而化学吸附作用下, 吸附力在流动方向及垂直壁面方向都有分力, 液滴不能滑动, 且化学吸附力很强, 使得液滴在很高剪切率下( $\gamma > 400 \text{ s}^{-1}$ )才能脱附.

Hammer等人的研究模拟白细胞为刚性颗粒, 外部流体对颗粒的作用采用Stokes阻力公式, 通过颗粒受力平衡和力矩平衡模拟获得颗粒吸附动力学状态. 然而液滴在流场作用下可展现很大变形. 一些学者采用浸入边界法、流体体积法、耗散粒子动力学等两相流动力学方法求解液滴内外流场, 考虑液滴变形的同时结合反应动力学模型考虑壁面化学吸附作用<sup>[30,192-197]</sup>. 如图8, 液滴变形使其底面更容易与壁面接触, 从而加强液滴的吸附, 由此可看出考虑液滴变形在吸附动力学研究中的重要性. 我们课题组采用界面追踪法和水平集法与反应动力学模型相结合, 研究了可变形液滴在高剪切率下的吸附动力学<sup>[30,198-200]</sup>. 发现剪切率高于某一临界值时, 液滴的吸附动力学状态由滚动转变为脱附; 液滴内部流体黏度升高导致液滴变形减小, 使得界面与壁面吸附面积减小, 从而可降低临界剪切率的值. 另外我们建立了复合液滴吸附动力学的模型, 发现内层液滴的存在使复合液滴整体变形减小, 外部流体的拖曳力和升力都会更大, 从而将吸附在壁面的液滴拉得更加细长, 证明了白细胞的复合结构是导致其吸附特性与血小板显著不同的的重要原因.

## 5 总结和展望

本文总结了具有复杂分子组成和结构的界面流体力学性质, 以及流场中具有复杂界面的液滴变形、运动和吸附的基础研究工作. 已有研究表明复杂的分子组成和结构给液滴界面带来显著不同于表面张力的流体力学性质, 导致液滴在剪切流中展现复杂的变形、运动和吸附动力学行为. 简单流场中的单液滴动力学

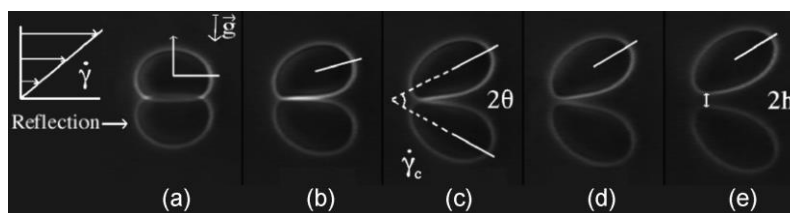


图7 剪切流中液滴(vesicle)在物理吸附作用下的动力学.  $\gamma =$  (a) 0; (b)  $0.4 \text{ s}^{-1}$ ; (c)  $0.9 \text{ s}^{-1}$ ; (d)  $1.1 \text{ s}^{-1}$ ; (e)  $2.5 \text{ s}^{-1}$ <sup>[184]</sup>

Figure 7 Dynamics of vesicles in linear shear flows under non-specific adhesion of walls.  $\gamma =$  (a) 0; (b)  $0.4 \text{ s}^{-1}$ ; (c)  $0.9 \text{ s}^{-1}$ ; (d)  $1.1 \text{ s}^{-1}$ ; (e)  $2.5 \text{ s}^{-1}$ <sup>[184]</sup>

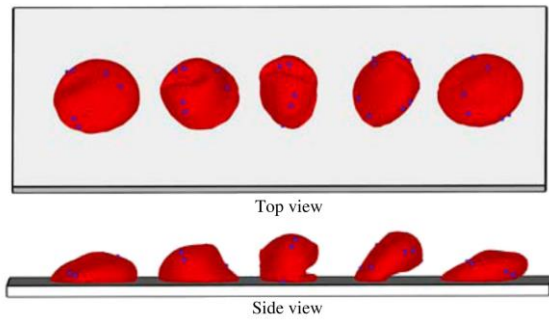


图8 (网络版彩色)线性剪切流中红细胞在化学吸附作用下动力学的模拟<sup>[201]</sup>

Figure 8 (Color online) Simulation of red blood cell dynamics in linear shear flows under specific adhesion of walls<sup>[201]</sup>

已有较全面认识,很多实验现象得到了理论分析和数值模拟的解释。尽管如此,实验结果与理论预测仍然存在定量差距,并且复杂流动条件下的液滴动力学行为仍然需要进一步探索,例如已有初步研究表明,中高雷诺数流动、非稳态流动、抛物线流动等复杂流动条件,液滴内部包含相界面的复合结构等都对液滴动力学行为有显著影响,但对其影响规律和内在机理的认识还不全面。

液滴自身结构和外部流场的复杂性的增加对研究方法提出了更高要求。实验研究方面,实现高剪切率的复杂流场,制备具有复杂界面和内部结构的液滴,以及观测流场中微小尺度液滴的界面动力学行为等实验技术仍然是难点。微液滴尺寸通常为微米级(约1~100  $\mu\text{m}$ ),且界面和内部结构复杂,导致单个液滴的制备和操控困难。观测液滴的运动过程并捕捉液滴界面的动力学行为需要很高空间和时间分辨率的观测手段,而流场速度较大时液滴跟随流体运动,致使高倍数但视窗小的相机捕捉液滴困难。以流变仪为基础的实验装置已成功应用于液滴动力学研究,但该方法通常针对液滴群悬浮液研究,难以观测单个复杂液滴的界面动力学行为。近些年微流体技术的发展为微小液滴动力学的研究提供了手段,可通过微流体平台制备微小液滴、操控液滴移至实验观测段、结合显微技术观察液滴行为,该方法已被用于细胞等生物液滴动力学的研究。然而微通道流动通常为抛物线流,线性剪切流等其他流场形式难以实现,流场剪切率小也是该方法的局限。理论分析研究,基于液滴受力平衡和能量守恒的KS模型,或是基于Stokes流动速度场分析解的小变形理论,能深入分析控制液滴变形运动的内在机理。然而,理论分析

方法局限于近球形液滴,液滴变形很小,近似于刚性颗粒,且考虑的流场形式和界面力学性质都相对简单,一些学者仍然致力于该方法的发展。数值模拟研究方面,相对实验研究具有流场形式和液滴结构易于控制、流场和界面运动的细节易于获取、可分析复杂液滴行为的内在机理等优势,相对理论分析方法其能实现的参数范围更宽、流场形式多样、液滴变形大且更接近实际应用。边界积分(Boundary integral method, BIM)/边界元(boundary element method, BEM)方法已在材料界面液滴动力学研究中广泛应用,但该方法基于Stokes流动求解,无法用于流体惯性影响下的液滴动力学研究。流体体积法(volume-of-fluid, VOF)、水平集法(Level Set, LS)等两相界面捕捉方法被用于材料界面液滴动力学的研究,然而如何考虑界面剪切弹性等特殊力学性质是该类方法的难点。浸入边界法(immersed boundary method, IBM)、界面追踪法(front tracking method, FTM)等方法采用拉格朗日网格追踪界面,考虑流体惯性的同时可结合界面有限元方法求解界面弹性应力,目前该类方法的发展重点在于提高界面曲率等高阶几何特征量的计算精度。除此以外,耗散粒子动力学(dissipative particle dynamics, DPD)等颗粒离散动力学方法在材料界面液滴动力学研究也获得了应用。总的来说,数值模拟方法研究三维问题(尤其液滴内部结构复杂或液滴变形极大时)计算量很大,提高数值方法的计算效率仍是重点。

单液滴动力学的基础研究对实际应用的指导意义可体现在两方面。一方面单液滴动力学研究可促进对液滴群悬浮液流动特性的理解及预测。然而由单液滴动力学向液滴群悬浮液流动研究的推广仍然存在液滴间相互作用机理不清及模型建立困难、液滴群模拟计算量巨大等挑战。另一方面单液滴动力学研究对理解微小尺度通道内液滴运动及液滴实现传质等特定功能有重要意义。如石油开采中油藏孔道-喉道的尺寸略大于甚至小于油水液滴尺寸,红细胞可流过尺寸比其直径还小的毛细血管,单液滴操控及药物输送等技术中,液滴自身的动力学行为及其与质量传输的耦合作用是研究重点。研究实际应用的复杂通道中单液滴的运动、以及考虑液滴内外流体间的传质过程仍是液滴动力学研究的挑战。本文综述的材料界面液滴动力学研究对表面活性剂吸附的表面张力界面液滴研究也有借鉴意义。表面活性剂

吸附除了降低表面张力外,还可使液滴界面展现剪切黏弹性、面积扩张黏弹性等与材料界面相似的力学特性,因此研究手段和力学本构模型可互相借鉴。然而值得注意的是,对于表面活性剂吸附的表面张力界面液滴,表面活性剂在界面两侧流体中和界面上的传质过程对液滴动力学研究非常关键,另外液滴破碎和融合是除了变形、运动、吸附以外需要重点研究的液滴动力学行为。

我们对复杂液滴动力学研究提出以下几点建议。

(1) 研究具有复杂分子组成和结构的液滴界面力学、质量输运等基础性性质,从界面层内分子间相互作用的微观过程出发,查清复杂分子组成和结构影响界

面力学和传质性质的机理,对科学描述界面复杂性提供依据。(2) 创新实验、数值模拟等研究方法,探索流体惯性、壁面作用等复杂流动条件以及液滴内部复杂结构对液滴动力学的影响,进一步研究实际应用中复杂流动条件下的复杂液滴流动,如人体大血管流动或惯性微流体装置中的中高雷诺数流动、石油工程中岩石壁面复杂物理化学作用下的液滴动力学等。(3) 石油工程采油过程中温度变化显著,表面活性剂浓度分布也不均匀,而温度和表面活性剂浓度对界面力学性质都有显著影响,因此研究传热传质影响下复杂界面的力学性质及复杂液滴的动力学行为也具有重要意义。

## 参考文献

- 1 Fischer P, Erni P. Emulsion drops in external flow fields—The role of liquid interfaces. *Curr Opin Colloid In*, 2007, 12: 196–205
- 2 Karbaschi M, Lotfi M, Kragel J, et al. Rheology of interfacial layers. *Curr Opin Colloid In*, 2014, 19: 514–519
- 3 Langevin D. Rheology of adsorbed surfactant monolayers at fluid surfaces. *Annu Rev Fluid Mech*, 2014, 46: 47–65
- 4 Mendoza A J, Guzman E, Martinez-Pedrero F, et al. Particle laden fluid interfaces: Dynamics and interfacial rheology. *Adv Colloid Interfac*, 2014, 206: 303–319
- 5 Schwarz U S, Safran S A. Physics of adherent cells. *Rev Mod Phys*, 2013, 85: 1327–1381
- 6 Barthes-Biesel D. Modeling the motion of capsules in flow. *Curr Opin Colloid In*, 2011, 16: 3–12
- 7 Neubauer M P, Poehlmann M, Fery A. Microcapsule mechanics: From stability to function. *Adv Colloid Interfac*, 2014, 207: 65–80
- 8 Abkarian M, Faivre M, Horton R, et al. Cellular-scale hydrodynamics. *Biomed Mater*, 2008, 3: 034011
- 9 Abkarian M, Viallat A. Vesicles and red blood cells in shear flow. *Soft Matter*, 2008, 4: 653–657
- 10 Vlahovska P M, Podgorski T, Misbah C. Vesicles and red blood cells in flow: From individual dynamics to rheology. *Comptes Rendus Phys*, 2009, 10: 775–789
- 11 Wan J D, Forsyth A M, Stone H A. Red blood cell dynamics: From cell deformation to atp release. *Integr Biol-UK*, 2011, 3: 972–981
- 12 Li X J, Vlahovska P M, Karniadakis G E. Continuum- and particle-based modeling of shapes and dynamics of red blood cells in health and disease. *Soft Matter*, 2013, 9: 28–37
- 13 Vlahovska P M, Barthes-Biesel D, Misbah C. Flow dynamics of red blood cells and their biomimetic counterparts. *Comptes Rendus Phys*, 2013, 14: 451–458
- 14 Vitkova V, Mader M A, Polack B, et al. Micro-macro link in rheology of erythrocyte and vesicle suspensions. *Biophys J*, 2008, 95: L33–L35
- 15 Bagchi P, Kalluri R M. Rheology of a dilute suspension of liquid-filled elastic capsules. *Phys Rev E*, 2010, 81: 056320
- 16 Farutin A, Misbah C. Rheology of vesicle suspensions under combined steady and oscillating shear flows. *J Fluid Mech*, 2012, 700: 362–381
- 17 Tan M H Y, Le D V, Chiam K H. Hydrodynamic diffusion of a suspension of elastic capsules in bounded simple shear flow. *Soft Matter*, 2012, 8: 2243–2251
- 18 Thiebaud M, Misbah C. Rheology of a vesicle suspension with finite concentration: A numerical study. *Phys Rev E*, 2013, 88: 062707
- 19 Zhao H, Shaqfeh E S G. The dynamics of a non-dilute vesicle suspension in a simple shear flow. *J Fluid Mech*, 2013, 725: 709–731
- 20 Gires P Y, Srivastav A, Misbah C, et al. Pairwise hydrodynamic interactions and diffusion in a vesicle suspension. *Phys Fluids*, 2014, 26: 013304
- 21 Gross M, Krueger T, Varnik F. Rheology of dense suspensions of elastic capsules: Normal stresses, yield stress, jamming and confinement effects. *Soft Matter*, 2014, 10: 4360–4372
- 22 Kaoui B, Jonk R J W, Harting J. Interplay between microdynamics and macrorheology in vesicle suspensions. *Soft Matter*, 2014, 10: 4735–4742

- 23 McWhirter J L, Noguchi H, Gompper G. Flow-induced clustering and alignment of vesicles and red blood cells in microcapillaries. *Proc Natl Acad Sci USA*, 2009, 106: 6039–6043
- 24 Fedosov D A, Pan W X, Caswell B, et al. Predicting human blood viscosity in silico. *Proc Natl Acad Sci USA*, 2011, 108: 11772–11777
- 25 Somasundaran P, Zhang L. Adsorption of surfactants on minerals for wettability control in improved oil recovery processes. *J Petrol Sci Eng*, 2006, 52: 198–212
- 26 Bera A, Ojha K, Mandal A, et al. Interfacial tension and phase behavior of surfactant-brine-oil system. *Colloid Surf A-Physicochem Eng Asp*, 2011, 383: 114–119
- 27 Ravari R R, Strand S, Austad T. Combined surfactant-enhanced gravity drainage (segd) of oil and the wettability alteration in carbonates: The effect of rock permeability and interfacial tension (ift). *Energ Fuel*, 2011, 25: 2083–2088
- 28 Wang Y, Xu H, Yu W, et al. Surfactant induced reservoir wettability alteration: Recent theoretical and experimental advances in enhanced oil recovery. *Petrol Sci*, 2011, 8: 463–476
- 29 Iglauer S, Ferno M A, Shearing P, et al. Comparison of residual oil cluster size distribution, morphology and saturation in oil-wet and water-wet sandstone. *J Colloid Interf Sci*, 2012, 375: 187–192
- 30 Bai B, Luo Z, Lu T, et al. Numerical simulation of cell adhesion and detachment in microfluidics. *J Mech Med Biol*, 2013, 13: 1350002
- 31 Chaffer C L, Weinberg R A. A perspective on cancer cell metastasis. *Science*, 2011, 331: 1559–1564
- 32 Nagrath S, Sequist L V, Maheswaran S, et al. Isolation of rare circulating tumour cells in cancer patients by microchip technology. *Nature*, 2007, 450: 1235–1239
- 33 Cheng X H, Irimia D, Dixon M, et al. A microfluidic device for practical label-free cd4+t cell counting of hiv-infected subjects. *Lab on a Chip*, 2007, 7: 170–178
- 34 Datta S S, Abbaspourrad A, Amstad E, et al. 25th anniversary article: Double emulsion templated solid microcapsules: Mechanics and controlled release. *Adv Mater*, 2014, 26: 2205–2218
- 35 Dinsmore A D, Hsu M F, Nikolaidis M G, et al. Colloidosomes: Selectively permeable capsules composed of colloidal particles. *Science*, 2002, 298: 1006–1009
- 36 Herranz-Blanco B, Arriaga L R, Makila E, et al. Microfluidic assembly of multistage porous silicon-lipid vesicles for controlled drug release. *Lab Chip*, 2014, 14: 1083–1086
- 37 Liggieri L, Miller R. Relaxation of surfactants adsorption layers at liquid interfaces. *Curr Opin Colloid In*, 2010, 15: 256–263
- 38 Baret J C. Surfactants in droplet-based microfluidics. *Lab Chip*, 2012, 12: 422–433
- 39 Bykov A, Liggieri L, Noskov B, et al. Surface dilational rheological properties in the nonlinear domain. *Adv Colloid Interface Sci*, 2015, 222: 110–118
- 40 Sagis L M, Fischer P. Nonlinear rheology of complex fluid-fluid interfaces. *Curr Opin Colloid In*, 2014, 19: 520–529
- 41 Barthes-Biesel D. Capsule motion in flow: Deformation and membrane buckling. *Comptes Rendus Phys*, 2009, 10: 764–774
- 42 Guido S, Tomaiuolo G. Microconfined flow behavior of red blood cells *in vitro*. *Comptes Rendus Phys*, 2009, 10: 751–763
- 43 Finken R, Kessler S, Seifert U. Micro-capsules in shear flow. *J Phys-Condens Mat*, 2011, 23: 184113
- 44 Abreu D, Levant M, Steinberg V, et al. Fluid vesicles in flow. *Adv Colloid Interfac*, 2014, 208: 129–141
- 45 Freund J B. Numerical simulation of flowing blood cells. *Annu Rev Fluid Mech*, 2014, 46: 67–95
- 46 Viallat A, Abkarian M. Red blood cell: From its mechanics to its motion in shear flow. *Int J Lab Hematol*, 2014, 36: 237–43
- 47 Helfrich W. Elastic properties of lipid bilayers: Theory and possible experiments. *Z Naturforsch C*, 1973, 28: 693–703
- 48 Zhongcan O Y, Helfrich W. Bending energy of vesicle membranes: General expressions for the first, second, and third variation of the shape energy and applications to spheres and cylinders. *Phys Rev A*, 1989, 39: 5280–5288
- 49 Dobreiner H G. Properties of giant vesicles. *Curr Opin Colloid In*, 2000, 5: 256–263
- 50 Ramanujan S, Pozrikidis C. Deformation of liquid capsules enclosed by elastic membranes in simple shear flow: Large deformations and the effect of fluid viscosities. *J Fluid Mech*, 1998, 361: 117–143
- 51 Barthes-Biesel D, Diaz A, Dhenin E. Effect of constitutive laws for two-dimensional membranes on flow-induced capsule deformation. *J Fluid Mech*, 2002, 460: 211–222
- 52 Li X Y, Sarkar K. Front tracking simulation of deformation and buckling instability of a liquid capsule enclosed by an elastic membrane. *J Comput Phys*, 2008, 227: 4998–5018
- 53 Skalak R, Tozeren A, Zarda R P, et al. Strain energy function of red blood cell membranes. *Biophys J*, 1973, 13: 245–280
- 54 Lac E, Barthes-Biesel D, Pelekasis N A, et al. Spherical capsules in three-dimensional unbounded stokes flows: Effect of the membrane constitutive law and onset of buckling. *J Fluid Mech*, 2004, 516: 303–334
- 55 Taylor G I. The formation of emulsions in definable fields of flow. *Proc R Soc Lond Ser A*, 1934, 146: 0501–0523
- 56 Rallison J M. The deformation of small viscous drops and bubbles in shear flows. *Annu Rev Fluid Mech*, 1984, 16: 45–66

- 57 Stone H A. Dynamics of drop deformation and breakup in viscous fluids. *Annu Rev Fluid Mech*, 1994, 26: 65–102
- 58 Vlahovska P M, Loewenberg M, Blawdziewicz J. Deformation of a surfactant-covered drop in a linear flow. *Phys Fluids*, 2005, 17: 103103
- 59 Vlahovska P M, Blawdziewicz J, Loewenberg M. Small-deformation theory for a surfactant-covered drop in linear flows. *J Fluid Mech*, 2009, 624: 293–337
- 60 Komrakova A E, Shardt O, Eskin D, et al. Lattice boltzmann simulations of drop deformation and breakup in shear flow. *Int J Multiph Flow*, 2014, 59: 24–43
- 61 Muradoglu M, Tryggvason G. Simulations of soluble surfactants in 3d multiphase flow. *J Comput Phys*, 2014, 274: 737–757
- 62 Luo Z, He L, Bai B. Three-dimensional numerical simulation of dynamics of elastic capsules (in Chinese). *J Eng Thermophys*, 2014, 35: 1132–1135 [骆政园, 和龙, 白博峰. 具有复杂界面的三维弹性液滴动力学模拟. *工程热物理学报*, 2014, 35: 1132–1135]
- 63 Breyiannis G, Pozrikidis C. Simple shear flow of suspensions of elastic capsules. *Theor Comput Fluid Dyn*, 2000, 13: 327–347
- 64 Sui Y, Chew Y T, Low H T. A lattice Boltzmann study on the large deformation of red blood cells in shear flow. *Int J Mod Phys C*, 2007, 18: 993–1011
- 65 Sui Y, Chew Y T, Roy P, et al. Transient deformation of elastic capsules in shear flow: Effect of membrane bending stiffness. *Phys Rev E*, 2007, 75: 066301
- 66 Gao T, Hu H H. Deformation of elastic particles in viscous shear flow. *J Comput Phys*, 2009, 228: 2132–2151
- 67 Sui Y, Chew Y T, Roy P, et al. Inertia effect on the transient deformation of elastic capsules in simple shear flow. *Comput Fluids*, 2009, 38: 49–59
- 68 Sui Y, Chen X B, Chew Y T, et al. Numerical simulation of capsule deformation in simple shear flow. *Comput Fluids*, 2010, 39: 242–250
- 69 Eggleton C D, Popel A S. Large deformation of red blood cell ghosts in a simple shear flow. *Phys Fluids*, 1998, 10: 1834–1845
- 70 Kwak S, Pozrikidis C. Effect of membrane bending stiffness on the axisymmetric deformation of capsules in uniaxial extensional flow. *Phys Fluids*, 2001, 13: 1234–1242
- 71 Pozrikidis C. Effect of membrane bending stiffness on the deformation of capsules in simple shear flow. *J Fluid Mech*, 2001, 440: 269–291
- 72 Pozrikidis C. Numerical simulation of the flow-induced deformation of red blood cells. *Ann Biomed Eng*, 2003, 31: 1194–1205
- 73 Lac E, Barthes-Biesel D. Deformation of a capsule in simple shear flow: Effect of membrane prestress. *Phys Fluids*, 2005, 17: 072105
- 74 Le D V. Effect of bending stiffness on the deformation of liquid capsules enclosed by thin shells in shear flow. *Phys Rev E*, 2010, 82: 016318
- 75 Sui Y, Low H T, Chew Y T, et al. A front-tracking lattice boltzmann method to study flow-induced deformation of three-dimensional capsules. *Comput Fluids*, 2010, 39: 499–511
- 76 Foessel E, Walter J, Salsac A V, et al. Influence of internal viscosity on the large deformation and buckling of a spherical capsule in a simple shear flow. *J Fluid Mech*, 2011, 672: 477–486
- 77 Le D V, Tan Z J. Large deformation of liquid capsules enclosed by thin shells immersed in the fluid. *J Comput Phys*, 2011, 229: 4097–4116
- 78 Bai B F, Luo Z Y, Wang S Q, et al. Inertia effect on deformation of viscoelastic capsules in microscale flows. *Microfluid Nanofluid*, 2013, 14: 817–829
- 79 Barthes-Biesel D, Rallison J M. The time-dependent deformation of a capsule freely suspended in a linear shear-flow. *J Fluid Mech*, 1981, 113: 251–267
- 80 Doddi S K, Bagchi P. Lateral migration of a capsule in a plane poiseuille flow in a channel. *Int J Multiph Flow*, 2008, 34: 966–986
- 81 Squires T M, Quake S R. Microfluidics: Fluid physics at the nanoliter scale. *Rev Modern Phys*, 2005, 77: 977–1026
- 82 Popel A S, Johnson P C. Microcirculation and hemorheology. *Ann Rev Fluid Mecha*, 2005, 37: 43–69
- 83 Vennemann P, Lindken R, Westerweel J. In vivo whole-field blood velocity measurement techniques. *Exper Fluids*, 2007, 42: 495–511
- 84 Bark D L, Ku D N. Wall shear over high degree stenoses pertinent to atherothrombosis. *J Biomech*, 2010, 43: 2970–2977
- 85 Luo Z Y, Wang S Q, He L, et al. Inertia-dependent dynamics of three-dimensional vesicles and red blood cells in shear flow. *Soft Matter*, 2013, 9: 9651–9660
- 86 Di Carlo D. Inertial microfluidics. *Lab Chip*, 2009, 9: 3038–46
- 87 Di Carlo D, Irimia D, Tompkins R G, et al. Continuous inertial focusing, ordering, and separation of particles in microchannels. *Proc Natl Acad Sci USA*, 2007, 104: 18892–18897
- 88 Hur S C, Henderson-MacLennan N K, McCabe E R B, et al. Deformability-based cell classification and enrichment using inertial microfluidics. *Lab Chip*, 2011, 11: 912–920
- 89 Luo Z, He L, Bai B. Deformation of spherical compound capsules in simple shear flow. *J Fluid Mech*, 2015, 775: 77–104

- 90 Luo Z Y, He L, Xu F, et al. Three-dimensional numerical simulation of vesicle dynamics in microscale shear flows. *J Nanosci Nanotechnol*, 2015, 15: 3081–3086
- 91 Noguchi H, Gompper G. Shape transitions of fluid vesicles and red blood cells in capillary flows. *Proc Natl Acad Sci USA*, 2005, 102: 14159–14164
- 92 Danker G, Vlahovska P M, Misbah C. Vesicles in poiseuille flow. *Phys Rev Lett*, 2009, 102: 148102
- 93 Kaoui B, Biroso G, Misbah C. Why do red blood cells have asymmetric shapes even in a symmetric flow? *Phys Rev Lett*, 2009, 103: 188101
- 94 Coupier G, Farutin A, Minetti C, et al. Shape diagram of vesicles in poiseuille flow. *Phys Rev Lett*, 2012, 108: 178106
- 95 Shi L L, Pan T W, Glowinski R. Deformation of a single red blood cell in bounded poiseuille flows. *Phys Rev E*, 2012, 85: 016307
- 96 Kuriakose S, Dimitrakopoulos P. Deformation of an elastic capsule in a rectangular microfluidic channel. *Soft Matter*, 2013, 9: 4284–4296
- 97 Fedosov D A, Peltomaeki M, Gompper G. Deformation and dynamics of red blood cells in flow through cylindrical microchannels. *Soft Matter*, 2014, 10: 4258–4267
- 98 Seifert U. Configurations of fluid membranes and vesicles. *Adv Phys*, 1997, 46: 13–137
- 99 Bassereau P, Sorre B, Levy A. Bending lipid membranes: Experiments after W. Helfrich's model. *Adv Colloid Interfac*, 2014, 208: 47–57
- 100 Lipowsky R. Coupling of bending and stretching deformations in vesicle membranes. *Adv Colloid Interfac*, 2014, 208: 14–24
- 101 Tu Z C, OuYang Z C. Recent theoretical advances in elasticity of membranes following helfrich's spontaneous curvature model. *Adv Colloid Interfac*, 2014, 208: 66–75
- 102 Fedosov D A, Caswell B, Suresh S, et al. Quantifying the biophysical characteristics of plasmodium-falciparum-parasitized red blood cells in microcirculation. *Proc Natl Acad Sci USA*, 2011, 108: 35–39
- 103 Yazdani A Z K, Bagchi P. Phase diagram and breathing dynamics of a single red blood cell and a biconcave capsule in dilute shear flow. *Phys Rev E*, 2011, 84: 026314
- 104 Kantsler V, Steinberg V. Transition to tumbling and two regimes of tumbling motion of a vesicle in shear flow. *Phys Rev Lett*, 2006, 96: 036001
- 105 Kantsler V, Steinberg V. Orientation and dynamics of a vesicle in tank-treading motion in shear flow. *Phys Rev Lett*, 2005, 95: 258101
- 106 Keller S R, Skalak R. Motion of a tank-treading ellipsoidal particle in a shear flow. *J Fluid Mech*, 1982, 120: 27–47
- 107 Misbah C. Vacillating breathing and tumbling of vesicles under shear flow. *Phys Rev Lett*, 2006, 96: 028104
- 108 Lebedev V V, Turitsyn K S, Vergeles S S. Dynamics of nearly spherical vesicles in an external flow. *Phys Rev Lett*, 2007, 99: 218101
- 109 Skotheim J M, Secomb T W. Red blood cells and other nonspherical capsules in shear flow: Oscillatory dynamics and the tank-treading-to-tumbling transition. *Phys Rev Lett*, 2007, 98: 078301
- 110 Turitsyn K S, Vergeles S S. Wrinkling of vesicles during transient dynamics in elongational flow. *Phys Rev Lett*, 2008, 100: 028103
- 111 Kaoui B, Farutin A, Misbah C. Vesicles under simple shear flow: Elucidating the role of relevant control parameters. *Phys Rev E*, 2009, 80: 061905
- 112 Farutin A, Biben T, Misbah C. Analytical progress in the theory of vesicles under linear flow. *Phys Rev E*, 2010, 81: 061904
- 113 Noguchi H. Dynamic modes of microcapsules in steady shear flow: Effects of bending and shear elasticities. *Phys Rev E*, 2010, 81: 056319
- 114 Vlahovska P M, Young Y N, Danker G, et al. Dynamics of a non-spherical microcapsule with incompressible interface in shear flow. *J Fluid Mech*, 2011, 678: 221–247
- 115 Farutin A, Aouane O, Misbah C. Vesicle dynamics under weak flows: Application to large excess area. *Phys Rev E*, 2012, 85: 061922
- 116 Guedda M, Abaidi M, Benlahsen M, et al. Dynamic modes of quasispherical vesicles: Exact analytical solutions. *Phys Rev E*, 2012, 86: 051915
- 117 Noguchi H, Gompper G. Dynamics of fluid vesicles in shear flow: Effect of membrane viscosity and thermal fluctuations. *Phys Rev E*, 2005, 72: 011901
- 118 Bagchi P, Kalluri R M. Dynamics of nonspherical capsules in shear flow. *Phys Rev E*, 2009, 80: 016307
- 119 Biben T, Farutin A, Misbah C. Three-dimensional vesicles under shear flow: Numerical study of dynamics and phase diagram. *Phys Rev E*, 2011, 83: 031921
- 120 Dodson W R, Dimitrakopoulos P. Oscillatory tank-treading motion of erythrocytes in shear flows. *Phys Rev E*, 2011, 84: 011913
- 121 Walter J, Salsac A V, Barthes-Biesel D. Ellipsoidal capsules in simple shear flow: Prolate versus oblate initial shapes. *J Fluid Mech*, 2011, 676: 318–347
- 122 Yazdani A Z K, Kalluri R M, Bagchi P. Tank-treading and tumbling frequencies of capsules and red blood cells. *Phys Rev E*, 2011, 83: 046305
- 123 Dodson W R, Dimitrakopoulos P. Tank-treading of swollen erythrocytes in shear flows. *Phys Rev E*, 2012, 85: 021922

- 124 Farutin A, Misbah C. Squaring, parity breaking, and s tumbling of vesicles under shear flow. *Phys Rev Lett*, 2012, 109: 248106
- 125 Yazdani A, Bagchi P. Three-dimensional numerical simulation of vesicle dynamics using a front-tracking method. *Phys Rev E*, 2012, 85: 056308
- 126 Cordasco D, Bagchi P. Orbital drift of capsules and red blood cells in shear flow. *Phys Fluids*, 2013, 25: 091902
- 127 Dupont C, Salsac A V, Barthes-Biesel D. Off-plane motion of a prolate capsule in shear flow. *J Fluid Mech*, 2013, 721: 180–198
- 128 Wang Z, Sui Y, Spelt P D M, et al. Three-dimensional dynamics of oblate and prolate capsules in shear flow. *Phys Rev E*, 2013, 88: 053021
- 129 Yazdani A, Bagchi P. Influence of membrane viscosity on capsule dynamics in shear flow. *J Fluid Mech*, 2013, 718: 569–595
- 130 Peng Z, Mashayekh A, Zhu Q. Erythrocyte responses in low-shear-rate flows: Effects of non-biconcave stress-free state in the cytoskeleton. *J Fluid Mech*, 2014, 742: 96–118
- 131 Abkarian M, Faivre M, Viallat A. Swinging of red blood cells under shear flow. *Phys Rev Lett*, 2007, 98: 188302
- 132 Deschamps J, Kantsler V, Segre E, et al. Dynamics of a vesicle in general flow. *Proc Natl Acad Sci USA*, 2009, 106: 11444–11447
- 133 Deschamps J, Kantsler V, Steinberg V. Phase diagram of single vesicle dynamical states in shear flow. *Phys Rev Lett*, 2009, 102: 118105
- 134 Dupire J, Socol M, Viallat A. Full dynamics of a red blood cell in shear flow. *Proc Natl Acad Sci USA*, 2012, 109: 20808–20813
- 135 Koleva I, Rehage H. Deformation and orientation dynamics of polysiloxane microcapsules in linear shear flow. *Soft Matter*, 2012, 8: 3681–3693
- 136 Zabusky N J, Segre E, Deschamps J, et al. Dynamics of vesicles in shear and rotational flows: Modal dynamics and phase diagram. *Phys Fluids*, 2011, 23: 041905
- 137 Levant M, Steinberg V. Amplification of thermal noise by vesicle dynamics. *Phys Rev Lett*, 2012, 109: 268103
- 138 Schmid-schonbein H, Wells R. Fluid drop-like transition of erythrocytes under shear. *Science*, 1969, 165: 288–291
- 139 Fischer T M, Stohrliesen M, Schmid-schonbein H. The red cell as a fluid droplet tank tread-like motion of the human erythrocyte membrane in shear flow. *Science*, 1978, 202: 894–896
- 140 Sui Y, Chew Y T, Roy P, et al. Dynamic motion of red blood cells in simple shear flow. *Phys Fluids*, 2008, 20: 112106
- 141 Noguchi H. Swinging and synchronized rotations of red blood cells in simple shear flow. *Phys Rev E*, 2009, 80: 021902
- 142 Omori T, Ishikawa T, Barthes-Biesel D, et al. Tension of red blood cell membrane in simple shear flow. *Phys Rev E*, 2012, 86: 056321
- 143 Peng Z L, Li X J, Pivkin I V, et al. Lipid bilayer and cytoskeletal interactions in a red blood cell. *Proc Natl Acad Sci USA*, 2013, 110: 13356–13361
- 144 Peng Z L, Zhu Q. Deformation of the erythrocyte cytoskeleton in tank treading motions. *Soft Matter*, 2013, 9: 7617–7627
- 145 Forsyth A M, Wan J, Owrutsky P D, et al. Multiscale approach to link red blood cell dynamics, shear viscosity, and atp release. *Proc Natl Acad Sci USA*, 2011, 108: 10986–10991
- 146 Gong Z, Huang H, Lu C. Stability analysis of the immersed boundary method for a two-dimensional membrane with bending rigidity. *Commun. Comput Phys*, 2008, 3: 704–723
- 147 Gong Z X, Lu C J, Huang H X. Modeling two-dimensional cell deformation in shear flow (in Chinese). *Chin J Appl Mech*, 2008, 25: 547–550 [宫兆新, 鲁传敬, 黄华雄. 二维细胞在剪切流动中的运动特性. *应用力学学报*. 2008, 25: 547–550]
- 148 Gong Z X, Lu C J. Effect of elastic constitutive laws on the deformation of two-dimensional red blood cell. *J Shanghai Jiaotong Univ (English Ed)*, 2009, 14: 76–80
- 149 Gong Z X, Lu C J. Research on the spherical capsule motion in 3d simple shear flows. *J Shanghai Jiaotong Univ (English Ed)*, 2010, 15: 702–706
- 150 Chen S, Zhao J, Fan X J, et al. Research advances in the study of complex fluid flows by dissipative particle dynamics (in Chinese). *Bull Sci Tech*, 2006, 22: 596–602 [陈硕, 赵钧, 范西俊, 等. 复杂流体流动的耗散粒子动力学研究进展. *科技通报*. 2006, 22: 596–602]
- 151 Kaoui B, Harting J, Misbah C. Two-dimensional vesicle dynamics under shear flow: Effect of confinement. *Phys Rev E*, 2011, 83: 066319
- 152 Veerapaneni S K, Young Y N, Vlahovska P M, et al. Dynamics of a compound vesicle in shear flow. *Phys Rev Lett*, 2011, 106: 158103
- 153 Kaoui B, Kruger T, Harting J. How does confinement affect the dynamics of viscous vesicles and red blood cells? *Soft Matter*, 2012, 8: 9246–9252
- 154 Laadhari A, Saramito P, Misbah C. Vesicle tumbling inhibited by inertia. *Phys Fluids*, 2012, 24: 031901
- 155 Salac D, Miksis M J. Reynolds number effects on lipid vesicles. *J Fluid Mech*, 2012, 711: 122–146
- 156 Abreu D, Seifert U. Noisy nonlinear dynamics of vesicles in flow. *Phys Rev Lett*, 2013, 110: 238103
- 157 Dodson W R, Dimitrakopoulos P. Dynamics of strain-hardening and strain-softening capsules in strong planar extensional flows via an interfacial spectral boundary element algorithm for elastic membranes. *J Fluid Mech*, 2009, 641: 263–296
- 158 Zhao H, Spann A P, Shaqfeh E S G. The dynamics of a vesicle in a wall-bound shear flow. *Phys Fluids*, 2011, 23: 121901
- 159 Zhao M Y, Bagchi P. Dynamics of microcapsules in oscillating shear flow. *Phys Fluids*, 2011, 23: 111901



- 160 Tong G, Hu H H, Castaneda P P. Dynamics and rheology of elastic particles in an extensional flow. *J Fluid Mech*, 2013, 715: 573–96
- 161 Singh R K, Li X, Sarkar K. Lateral migration of a capsule in plane shear near a wall. *J Fluid Mech*, 2014, 739: 421–443
- 162 Kaoui B, Kruger T, Harting J. Complex dynamics of a bilamellar vesicle as a simple model for leukocytes. *Soft Matter*, 2013, 9: 8057–8061
- 163 Noguchi H. Dynamic modes of red blood cells in oscillatory shear flow. *Phys Rev E*, 2010, 81: 061920
- 164 Noguchi H. Dynamics of fluid vesicles in oscillatory shear flow. *J Phys Soc Jpn*, 2010, 79: 024801
- 165 Dupire J, Abkarian M, Viallat A. Chaotic dynamics of red blood cells in a sinusoidal flow. *Phys Rev Lett*, 2010, 104: 208102
- 166 Levant M, Steinberg V. Complex dynamics of compound vesicles in linear flow. *Phys Rev Lett*, 2014, 112: 138106
- 167 Snoeijer J H, Andreotti B. Moving contact lines: Scales, regimes, and dynamical transitions. *Annu Rev Fluid Mech*, 2013, 45: 269–292
- 168 Sui Y, Ding H, Spelt P D M. Numerical simulations of flows with moving contact lines. *Annu Rev Fluid Mech*, 2014, 46: 97–119
- 169 Seifert U, Lipowsky R. Adhesion of vesicles. *Phys Rev A*, 1990, 42: 4768–4771
- 170 Cantat I, Kassner K, Misbah C. Vesicles in haptotaxis with hydrodynamical dissipation. *Eur Phys J E*, 2003, 10: 175–189
- 171 Smith A S, Seifert U. Vesicles as a model for controlled (de-) adhesion of cells: A thermodynamic approach. *Soft Matter*, 2007, 3: 275–289
- 172 Das S, Du Q. Adhesion of vesicles to curved substrates. *Phys Rev E*, 2008, 77: 011907
- 173 Blount M J, Miksis M J, Davis S H. The equilibria of vesicles adhered to substrates by short-ranged potentials. *P Roy Soc A-Math Phys*, 2013, 469
- 174 Braun D, Fromherz P. Fluorescence interferometry of neuronal cell adhesion on microstructured silicon. *Phys Rev Lett*, 1998, 81: 5241–5244
- 175 Kloboucek A, Behrisch A, Faix J, et al. Adhesion-induced receptor segregation and adhesion plaque formation: A model membrane study. *Biophys J*, 1999, 77: 2311–2328
- 176 Bell G I. Models for the specific adhesion of cells to cells. *Science*, 1978, 200: 618–627
- 177 Dembo M, Torney D C, Saxman K, et al. The reaction-limited kinetics of membrane-to-surface adhesion and detachment. *Proc R Soc Lond Ser B-Biol Sci*, 1988, 234: 55–83
- 178 Alon R, Hammer D A, Springer T A. Lifetime of the p-selectin-carbohydrate bond and its response to tensile force in hydrodynamic flow. *Nature*, 1995, 374: 539–542
- 179 Lasky L A. Selectin-carbohydrate interactions and the initiation of the inflammatory response. *Ann Rev Biochem*, 1995, 64: 113–139
- 180 McEver R P, Zhu C. Rolling cell adhesion. *Annu Rev Cell Dev Biol*, 2010, 26: 363–396
- 181 Fenz S F, Bihl T, Merkel R, et al. Switching from ultraweak to strong adhesion. *Adv Mater*, 2011, 23: 2622–2626
- 182 Cantat I, Misbah C. Lift force and dynamical unbinding of adhering vesicles under shear flow. *Phys Rev Lett*, 1999, 83: 880–883
- 183 Seifert U. Hydrodynamic lift on bound vesicles. *Phys Rev Lett*, 1999, 83: 876–879
- 184 Abkarian M, Lartigue C, Viallat A. Tank treading and unbinding of deformable vesicles in shear flow: Determination of the lift force. *Phys Rev Lett*, 2002, 88: 068103
- 185 Abkarian M, Viallat A. Dynamics of vesicles in a wall-bounded shear flow. *Biophys J*, 2005, 89: 1055–1066
- 186 Chang K C, Tees D F J, Hammer D A. The state diagram for cell adhesion under flow: Leukocyte rolling and firm adhesion. *Proc Natl Acad Sci USA*, 2000, 97: 11262–11267
- 187 King M R, Hammer D A. Multiparticle adhesive dynamics: Hydrodynamic recruitment of rolling leukocytes. *Proc Natl Acad Sci USA*, 2001, 98: 14919–14924
- 188 Caputo K E, Hammer D A. Effect of microvillus deformability on leukocyte adhesion explored using adhesive dynamics simulations. *Biophys J*, 2005, 89: 187–200
- 189 Krasik E F, Yee K L, Hammer D A. Adhesive dynamics simulation of neutrophil arrest with deterministic activation. *Biophys J*, 2006, 91: 1145–1155
- 190 Caputo K E, Lee D, King M R, et al. Adhesive dynamics simulations of the shear threshold effect for leukocytes. *Biophys J*, 2007, 92: 787–797
- 191 Caputo K E, Hammer D A. Adhesive dynamics simulation of g-protein-mediated chemokine-activated neutrophil adhesion. *Biophys J*, 2009, 96: 2989–3004
- 192 N’Dri N A, Shyy W, Tran-Soy-Tay R. Computational modeling of cell adhesion and movement using a continuum-kinetics approach. *Biophys J*, 2003, 85: 2273–2286
- 193 Khismatullin D B, Truskey G A. A 3d numerical study of the effect of channel height on leukocyte deformation and adhesion in parallel-plate flow chambers. *Microvasc Res*, 2004, 68: 188–202

- 194 Jadhav S, Eggleton C D, Konstantopoulos K. A 3-d computational model predicts that cell deformation affects selectin-mediated leukocyte rolling. *Biophys J*, 2005, 88: 96–104
- 195 Khismatullin D B, Truskey G A. Three-dimensional numerical simulation of receptor-mediated leukocyte adhesion to surfaces: Effects of cell deformability and viscoelasticity. *Phys Fluids*, 2005, 17: 031505
- 196 Pappu V, Bagchi P. 3d computational modeling and simulation of leukocyte rolling adhesion and deformation. *Comput Biol Med*, 2008, 38: 738–753
- 197 Pappu V, Doddi S K, Bagchi P. A computational study of leukocyte adhesion and its effect on flow pattern in microvessels. *J Theor Biol*, 2008, 254: 483–498
- 198 Luo Z Y, Xu F, Lu T J, et al. Direct numerical simulation of detachment of single captured leukocyte under different flow conditions. *J Mech Med Biol*, 2011, 11: 273–284
- 199 Luo Z Y, Wang S Q, He L, et al. Front tracking simulation of cell detachment dynamic mechanism in microfluidics. *Chem Eng Sci*, 2013, 97: 394–405
- 200 Luo Z Y, He L, Wang S Q, et al. Two-dimensional numerical study of flow dynamics of a nucleated cell tethered under shear flow. *Chem Eng Sci*, 2014, 119: 236–244
- 201 Fedosov D A, Caswell B, Karniadakis G E. Wall shear stress-based model for adhesive dynamics of red blood cells in malaria. *Biophys J*, 2011, 100: 2084–2093

---

## Deformation, motion and adhesion of complex droplets under flow

BAI BoFeng & LUO ZhengYuan

*State Key Laboratory of Multiphase Flow in Power Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China*

The study of dynamics of droplets (i.e., small volume of liquids enclosed by an interface) has been an important branch of the discipline of multiphase flow thermophysics. Usually, the interface of droplets consists of the same molecules as the two fluids inside and outside the droplets, and the interface structure is simple and uniform. Notably, it is found that the interface of some complex droplets can consist of various types of molecules that are different from the external and internal fluids and can have complex structures such as networks of macromolecules. For instance, surfactants and solid particles can appear on the interface of oil-water droplets in petroleum engineering; bio-droplets (e.g., blood cells) are enclosed by membranes consisting of lipid bilayers supported by a network of spectrin proteins. The presence of various molecules and complex structures confers the interface of complex droplets many special mechanical properties, such as resistances to membrane deformation due to shear, area dilatation and bending. Such complex droplets are widely used for encapsulation, transport and release of active agents in numerous engineering and biomedical applications. Coupling effects among viscous stresses of the fluids inside and outside the droplet, elastic tension of the droplet interface and specific and/or non-specific adhesion forces of the channel walls confer the droplets complex dynamical behaviors of deformation, motion and adhesion in shear flows. Besides, the dynamical behaviors of complex droplets play a critical role in their functions (e.g., encapsulation, transport and release of substances) as well as flow behaviors of droplet suspensions. Therefore, it is critical to study the dynamics of complex droplets in various types of shear flows, especially to consider the effects of complex mechanical properties of the droplet interface. Extensive studies have been dedicated to the fluid mechanics of complex droplets under flow, which are revealed to be significantly affected by the mechanical properties of the droplet interface, the initial shape of the droplet, the shear rate and type of the external flow, the viscosity of the external and internal fluids and inertia of the external and internal flows. In this paper, we briefly highlighted various mechanical properties of complex interfaces and the constitutive laws proposed for governing these mechanical properties. Besides, the analytical, numerical and experimental studies on deformation, motion and adhesion of complex droplets in shear flows, especially in linear shear flows, were also reviewed.

**multiphase flow, complex drops, complex interfaces, compound drops, deformation, motion, adhesion**

doi: 10.1360/N972014-01322