

## Математическое моделирование напряжений в плазмонапыленных покрытиях медицинского назначения

### Аннотация

Для повышения биосовместимости имплантатов предлагается на их поверхность с помощью технологии плазменного напыления наносить пористое скэффолд-покрытие, которое может служить резервуаром для активных субстанций. В процессе эксплуатации в таких покрытиях возникают напряжения, которые суммируются с остаточными напряжениями и значительно снижают прочность покрытий. Численное значение напряжений экспериментальным путем получить практически невозможно, поэтому в рассматриваемой работе решается задача математического моделирования величин напряжений, возникающих в пористых покрытиях как в процессе их формирования, так и в процессе эксплуатации.

Согласно многочисленным исследованиям, наилучшими показателями биосовместимости обладают скэффолды на основе материалов биологического и синтетического происхождения, которые могут быть заполнены стволовыми клетками, факторами роста, белками плазмы крови и другими активными субстанциями, в том числе лекарственными препаратами [1]-[5]. Однако подобные имплантируемые конструкции, несмотря на отличную биосовместимость, не могут быть использованы для замещения участков органов и тканей, испытывающих серьезные нагрузки в процессе функционирования (например зубов или суставов конечностей). Наиболее оптимальным способом выхода из сложившейся ситуации представляется нанесение на поверхность металлических имплантационных конструкций пористых скэффолд-покрытий на основе гидроксиапатита, трикальцийфосфата и других биосовместимых материалов с заданными структурно-морфологическими параметрами и возможностью выполнения роли резервуара для активных субстанций.

Структура пористых покрытий включает в себя твердый каркас из специально подобранных биосовместимых материалов и поры, т. е. пустоты между частицами порошка, из которых формируется покрытие. Каркас покрытия целесообразно формировать таким образом, чтобы он содержал поры сравнительно больших размеров (макропоры) и капиллярные каналы, имеющие наноразмерный диаметр (наноканалы), которые образуются внутри объема частиц покрытия (рис. 1). Каркас покрытия, структурированный макропорами и наноканалами, можно представить как сложную гидравлическую систему, в которой поры являются емкостью для длительного хранения жидкого вещества, а наноканалы – транспортными артериями для перемещения жидкого вещества за счет капиллярных явлений и механических воздействий.

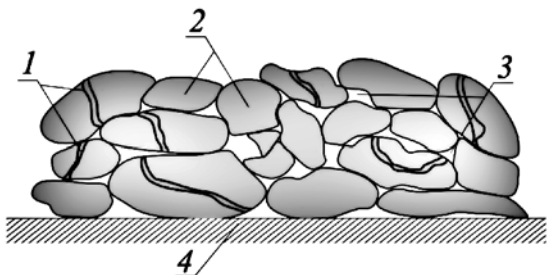


Рис. 1. Схема пористого плазмонапыленного покрытия: 1 – наноканалы; 2 – напыленные частицы; 3 – макропоры; 4 – основа

В качестве жидкости может быть использовано лекарственное вещество или другая активная субстанция, которые на протяжении длительного расчетного времени будут выделяться в прилежащие ткани и выполнять заданные функции.

В связи с этим представляет большой практический интерес задача формирования на имплантатах пористого покрытия с прогнозируемой структурой. Сложность решения данной задачи возникает в связи с тем, что повышение степени пористости неизбежно связано с уменьшением прочности покрытия. Оче-

видно, технология получения пористых покрытий имплантатов должна обеспечивать некоторое оптимальное соотношение между величинами прочности и пористости покрытия.

Среди различных методов нанесения пористых покрытий весьма перспективным является метод плазменного напыления порошковых материалов [6], так как этим методом можно получить покрытия с прогнозируемыми прочностными характеристиками. Важной процедурой в технологическом процессе напыления пористых покрытий является контроль прочности покрытия. Под прочностью покрытия понимается напряженное состояние напыленных частиц, величина которого не должна превышать предельно допустимого напряжения:

$$\sigma_n < [\sigma_n], \quad (1)$$

где  $\sigma_n$  – напряжение материала покрытия;  $[\sigma_n]$  – предельно допустимое напряжение покрытия.

Традиционными способами контроля прочности плазменных покрытий являются методы склеивания, штифтовый и метод разрушения покрытия «на срез» [7]. Эти методы обеспечивают контроль прочности всего объема покрытия без учета особенностей его пористой структуры.

Однако для покрытий медицинского применения наиболее важными являются прочностные характеристики, связанные с соединением отдельных напыленных частиц друг с другом и с основой.

Формирование плазменных покрытий осуществляется путем создания потока ускоренных и нагретых до высокой температуры частиц и укладки их на поверхности основы. При взаимодействии частиц с поверхностью основы они деформируются, и в местах их соприкосновения возникают контактные напряжения, которые после остывания частиц образуют так называемые остаточные напряжения [6].

Кроме того, в процессе функционального применения имплантата в материале покрытия возникают напряжения, обусловленные движениями пациента – носителя имплантата (например в процессе жевания или ходьбы).

Таким образом, прочность покрытия имплантата будет характеризоваться величиной остаточных напряжений, возникающих в процессе плазменного напыления, и напряжений, обусловленных движениями пациента:

$$\sigma_n = \sigma_{ост} + \sigma_{де}, \quad (2)$$

где  $\sigma_{ост}$  – остаточное напряжение покрытия;  $\sigma_{де}$  – напряжение, обусловленное движением пациента.

Очевидно, что непосредственное измерение напряжений в зоне соединения напыленных частиц для оценки величины прочности покрытия является задачей практически неосуществимой.

В то же время величины этих напряжений очень важны для прогнозирования качественных показателей покрытий имплантатов. В связи с этим в работе предлагается методика оценки величины напряжений в зоне взаимодействия напыленных частиц методом статистического моделирования.

Методика моделирования состоит в следующем. В пористой структуре покрытия выделяется некоторая геометричес-

кая конфигурация, включающая в себя несколько напыленных частиц. На основе этой геометрической конфигурации создается единичное абстрактное пористое образование, имеющее форму полого цилиндра или полой сферы (рис. 2).

Геометрические параметры абстрактных геометрических фигур в процессе моделирования устанавливаются таким образом, чтобы объемы их полых образований соответствовали усредненному объему реальной модельной пористой конфигурации:

$$V_n \sim V_u \sim V_c \quad (3)$$

В рассматриваемой работе абстрактные геометрические фигуры, моделирующие пористые образования, рассматриваются как объекты, представляющие собой модели оболочек [8].

В качестве модельных рассматриваются оболочки цилиндрической и сферической конфигураций, края которых соединяются друг с другом.

От действия внешних нагрузок в материале оболочек возникают нормальное усилие  $U$  (меридиональное) и  $T$  (кольцевое), поперечные силы  $Q$ , а также изгибающие моменты  $M_m$  (меридиональный) и  $M_l$  (кольцевой) (рис. 3).

К оболочкам прикладываются внешняя сила  $p$ , распорная сила  $Q$ , а также краевые нагрузки  $Q_0$  и  $M_0$ , которые являются реакциями заделки края оболочки на внешние или внутренние усилия и моменты (рис. 4).

Напряжения на наружной и внутренней поверхности оболочки определяются по формулам [9]:

$$\begin{cases} \sigma_{m_0} = \sigma_{m_0}^p + \sigma_{m_0}^{(Q_0-Q)} + \sigma_{m_0}^{M_0}; \\ \sigma_{l_0} = \sigma_{l_0}^p + \sigma_{l_0}^{(Q_0-Q)} + \sigma_{l_0}^{M_0}; \\ \sigma_{\max} = \max \{ \sigma_{m_0}; \sigma_{l_0} \}, \end{cases} \quad (4)$$

где  $\sigma_{m_0}$  – меридиональное напряжение;  $\sigma_{l_0}$  – тангенциальное (кольцевое) напряжение;  $\sigma_{m_0}^p, \sigma_{m_0}^{(Q_0-Q)}, \sigma_{m_0}^{M_0}$  – меридиональные напряжения, возникающие на краю оболочки от действия нагрузок  $p, (Q - Q_0), M_0$ ;  $\sigma_{l_0}^p, \sigma_{l_0}^{(Q_0-Q)}, \sigma_{l_0}^{M_0}$  – тангенциальные напряжения, возникающие на краю оболочки от действия соответственно нагрузок  $p, (Q - Q_0), M_0$ .

Согласно выводам, приведенным в работе [9], краевые нагрузки  $Q_0$  и  $M_0$  определяются расчетным путем по формулам:

$$\begin{cases} \Delta_p^u - \Delta_{Q_0}^u + \Delta_{M_0}^u = \Delta_p^c + \Delta_{(Q_0-Q)}^c + \Delta_{M_0}^c; \\ \Theta_p^u - \Theta_{Q_0}^u + \Theta_{M_0}^u = -\Theta_p^c - \Theta_{(Q_0-Q)}^c - \Theta_{M_0}^c, \end{cases} \quad (5)$$

где  $\Delta_p^u - \Delta_{Q_0}^u + \Delta_{M_0}^u$ ;  $\Theta_p^u, \Theta_{Q_0}^u, \Theta_{M_0}^u$  – соответственно радиальные и угловые деформации края цилиндрической оболочки под действием нагрузок  $p, Q_0, M_0$ ;  $\Delta_p^c, \Delta_{(Q_0-Q)}^c, \Delta_{M_0}^c$ ;  $\Theta_p^c, \Theta_{(Q_0-Q)}^c, \Theta_{M_0}^c$  – соответственно радиальные и угловые деформации сферической оболочки под действием нагрузок  $p, Q_0, M_0$ .

Радиальные и угловые деформации рассчитываются по формулам [9]:

$$\begin{cases} \Delta_p^u = \frac{(2-\mu)R^2}{2Es} p; \Delta_p^c = \frac{pa^2}{2Es} \left( 2-\mu - \frac{a^2}{b^2} \right); \\ \Delta_{Q_0}^u = \frac{2\beta R^2}{sE} Q_0; \Delta_{Q_0}^c = \frac{2\beta a^2}{sE} Q_0; \\ \Delta_{M_0}^u = \frac{2\beta^2 R^2}{sE} M_0; \Delta_{M_0}^c = \frac{2\beta^2 a^2}{sE} M_0; \\ \Theta_{Q_0}^u = \frac{2\beta^2 R^2}{sE} Q_0; \Theta_{Q_0}^c = \frac{2\beta^2 R^2}{s_3 E} Q_0; \\ \Theta_{M_0}^u = \frac{4\beta^3 R^2}{sE} M_0; \Theta_{M_0}^c = \frac{4\beta^3 R^2}{s_3 E} M_0; \\ \beta = \sqrt[4]{3(1-\mu^2)} \sqrt{Rs}; \beta_3 = \sqrt[4]{3(1-\mu^2)} \sqrt{as_3}; \\ R = \frac{D_u}{2}; a = \frac{D_c}{2}; b = \frac{D_c}{4}, \end{cases} \quad (6)$$

где  $\mu$  – коэффициент Пуассона;  $D_u$  – диаметр оболочки;  $D_c$  – диаметр сферической оболочки;  $s, b, a$  – толщина, ширина и радиус сферической оболочки.

Напряжения на краю оболочек рассчитываются по формулам [9]:

$$\begin{cases} \sigma_{m_0}^p = \frac{pR}{2s}; \sigma_{l_0}^p = \frac{pR}{s}; \\ \sigma_{m_0}^{M_0} = \frac{6M_0}{s^2}; \sigma_{l_0}^{M_0} = \frac{2M_0\beta^2 R}{s}; \\ \sigma_{m_0}^{Q_0} = 0; \sigma_{l_0}^{Q_0} = \frac{2Q_0\beta R}{s}. \end{cases} \quad (7)$$

Предположим, что в качестве движущей силы, обеспечивающей перемещение жидкого вещества в порах, будут исполь-

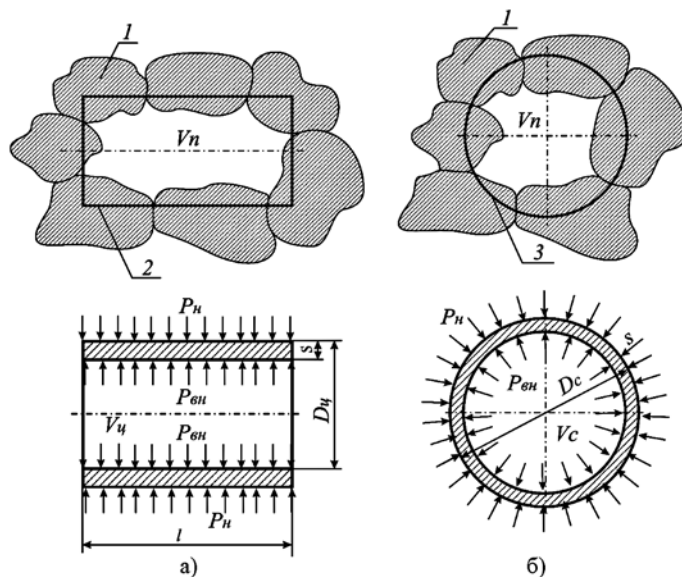


Рис. 2. Схема преобразования геометрической конфигурации частиц в абстрактную геометрическую фигуру: а) полой цилиндра; б) полой сферы;  $l$  – длина цилиндра;  $V_n$  – объем поры;  $V_u$  – объем полого цилиндра;  $V_c$  – объем полой сферы;  $D_u$  – диаметр оболочки;  $D_c$  – диаметр сферической оболочки; 1 – напыленные частицы; 2 – контур абстрактного цилиндра; 3 – контур абстрактной сферы

зваться разнообразными толчками и ударами, которые возникают в организме человека в процессе его жизнедеятельности и возбуждают в жидкости, находящейся в порах, пульсовые волны. Тогда в жидкости возникает избыточное давление, величину которого можно оценить по выражению [10]:

$$P = \rho C_p v = \rho C_p \frac{l}{t}, \quad (8)$$

где  $\rho$  – плотность жидкости;  $C_p$  – скорость распространения механической волны жидкости;  $v$  – скорость течения жидкости;  $l$  – длина определенной порции жидкости;  $t$  – время действия пульсовой волны.

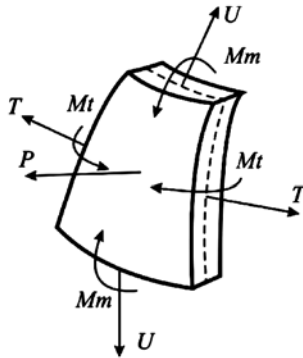


Рис. 3. Схема действия нагрузок на элемент стенки оболочки

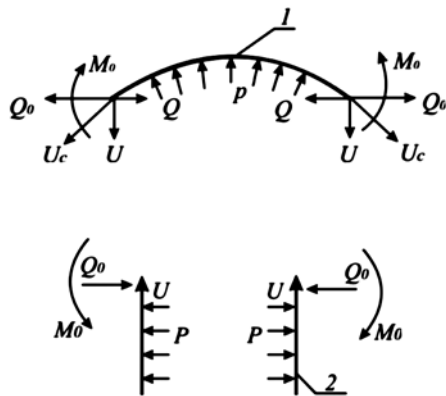


Рис. 4. Схема определения краевых нагрузок:

1 – сферическая оболочка; 2 – цилиндрическая оболочка

Рассчитанная по уравнению (8) величина  $P$  принимается в качестве внешней нагрузки, действующей на стенки оболочки.

Величина остаточных напряжений оценивается по формуле Герца [11]

$$\sigma = 0,418 \sqrt{q \frac{E}{\rho}}, \quad (9)$$

где  $q$  – нормальная нагрузка на единицу длины в контактных образованиях взаимодействующих напыленных частиц;  $E$  – модуль упругости материала напыленных частиц;  $\rho$  – приведенный радиус кривизны напыленных частиц ( $\rho = R_1 R_2 / (R_1 - R_2)$ );  $R_1, R_2$  – радиусы взаимодействующих частиц.

Предложенная система контроля прочности плазмонапыленных пористых покрытий реализована в виде следующего алгоритма:

1. На основе экспериментальных и экспертных оценок, основанных на изучении физических закономерностей процесса формирования плазменных покрытий, назначаются шкалы физических величин, взаимосвязанных математическими зависимостями с величиной прочности покрытия.

2. По результатам моделирования методом Монте-Карло определяются числовые значения величин, участвующих в моделировании.

3. По формулам (1)-(8) рассчитываются величины напряжений в порах покрытия.

4. Производятся многократные статистические испытания, по результатам которых определяется усредненное значение прочности покрытия.

5. Данные, полученные в результате статистических испытаний, сравниваются с результатами, полученными в процессе экспериментальных испытаний на лабораторных стендах реальных изделий с покрытиями.

6. Если результаты, полученные математическим моделированием, и результаты лабораторных испытаний существенно отличаются, то проводится корректировка технологического процесса напыления покрытий.

*Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 12-08-31217 мол\_а.*

#### Список литературы:

1. Биосовместимые материалы. Учебн. пособие / Под ред. В.И. Севастьянова, М.П. Кипичникова. – М.: ООО «Издательство Медицинское информационное агентство», 2011. 544 с.
2. Интернет-сайт: <http://stemcells.nih.gov>.
3. Horst O.V., Chavez M.G., Jheon A.H., Desai T., Klein O.D. Stem Cell and Biomaterials Research in Dental Tissue Engineering and Regeneration // Dent. Clin. N. Am. 2012. Vol. 56. PP. 495-520.
4. Вахрушев И.В., Ярыгин Н.В., Ярыгин К.Н. Тканевая инженерия кости путем трансплантации заселенных мезенхимальными стволовыми клетками скэффолдов // Хирург. 2011. № 1. С. 48-53.
5. Demarco F.F., Muniz Conde M.C., Cavalcanti B.N., Casagrande L., Sakai V.T., Nor J.E. Dental pulp tissue engineering // Braz. Dent. J. 2011. Vol. 22. № 1 Ribeirao Preto. PP. 3-14.
6. Протасова Н.В., Таран В.М., Лясникова А.В., Дударева О.А., Гришина И.П. Технологическое обеспечение качества плазменных покрытий на основе применения комбинированных физико-технических методов активации поверхности. – М.: Спецкнига, 2012. 350 с.
7. Тушинский Л.И., Плохов А.В. Исследование структуры и физико-механических свойств покрытий. – Новосибирск: Наука, 1986. 196 с.
8. Бегун П.И. Биомеханическое моделирование объектов протезирования. – М.: Политехника, 2011. 466 с.
9. Расчет и конструирование машин и аппаратов химических производств / Под общ. ред. М.Ф. Михалева. – Л.: Машиностроение (Ленинградское отделение), 1984. 301 с.
10. Парашин В.Б., Иткин Г.П. Биомеханика кровообращения. – М.: Издательство МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2005. 224 с.
11. Подскребка М.Д. Сопротивление материалов. Учебник. – Минск: Выс. шк., 2007. 797 с.

*Александра Владимировна Лясникова,  
д-р техн. наук, зав. кафедрой,  
Владимир Маркович Таран,  
д-р техн. наук, профессор,  
Ольга Анатольевна Маркелова,  
аспирант,*

*Олеся Александровна Дударева,  
канд. техн. наук, доцент,  
Ирина Петровна Гришина,  
аспирант,*

*кафедра «Биотехнические и медицинские аппараты и системы»,*

*ФГБОУ ВПО «Саратовский государственный университет имени Гагарина Ю.А.»,*

*г. Саратов,*

*e-mail: lyasnikovaav@mail.ru*