Конечно-элементное моделирование усталостного поведения медицинского имплантата, изготовленного из титана в крупнозернистом и наноструктурном состояниях

© 2022

Капустин Алексей Владимирович^{*1}, аспирант кафедры материаловедения и физики металлов *Еникеев Нариман Айратович*^{1,2,3}, доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник лаборатории «Металлы и сплавы при экстремальных воздействиях»,

профессор кафедры материаловедения и физики металлов

¹Уфимский государственный авиационный технический университет, Уфа (Россия)

²Башкирский государственный университет, Уфа (Россия)

*E-mail: kapustin129@yandex.ru

³ORCID: https://orcid.org/0000-0002-7503-8949

Поступила в редакцию 27.04.2022

Принята к публикации 02.08.2022

Аннотация: В настоящее время для повышения качества жизни широко используется дентальная имплантация, и обеспечение надежного функционирования и долговечности имплантируемых изделий представляет собой одну из важнейших задач современной стоматологии. Разработка новых биоматериалов с улучшенными свойствами, таких как наноструктурные материалы, расширяет возможности миниатюризации медицинских изделий для создания имплантатов нового поколения. При проектировании этих устройств большую роль играет компьютерное моделирование, позволяющее эффективно определять дизайн имплантата в зависимости от используемых материалов и условий эксплуатации. В настоящей работе представлены результаты моделирования методом конечных элементов для сравнительного анализа деформированного поведения имплантата в условиях циклической нагрузки. В качестве материала имплантата рассматривали крупнозернистый технически чистый титан и наноструктурный титан с улучшенными свойствами. Рассматривали различные компоновки имплантируемого устройства в соответствии с условиями проведения усталостных испытаний – с учетом и без учета влияния абатмента и реакции основания. Установлены характеристики имплантата, такие как усталостная долговечность и коэффициент запаса для конкретного типа компоновки и типа материала, а также распределение эквивалентных напряжений, в том числе с учетом знака. Показано, что наиболее реалистичные результаты достигаются при моделировании устройства в компоновке «абатмент – имплантат – база». Продемонстрировано, что прочностные характеристики, определяющие разрушение изделия, описываются максимальными главными напряжениями, а исследованная конфигурация имплантата обеспечивает его длительное надежное функционирование в случае изготовления исключительно из наноструктурного титана с повышенными свойствами.

Ключевые слова: дентальный имплантат; метод конечных элементов; наноструктурные материалы; титан; прочность; усталостные свойства.

Благодарности: Н.А. Еникеев признателен поддержке научно-исследовательской лаборатории Евразийского НОЦ «Металлы и сплавы при экстремальных воздействиях» ФГБОУ ВО «УГАТУ» в рамках государственного задания (соглашение № 075-03-2021-014/4) Министерства науки и высшего образования РФ.

Для цитирования: Капустин А.В., Еникеев Н.А. Конечно-элементное моделирование усталостного поведения медицинского имплантата, изготовленного из титана в крупнозернистом и наноструктурном состояниях // Frontier Materials & Technologies. 2022. № 3. С. 85–95. DOI: 10.18323/2782-4039-2022-3-1-85-95.

введение

Разработка имплантатов для дентального протезирования – актуальное направление современной стоматологии, представляющее большое значение для развития лечебно-реабилитационной сферы здравоохранения. Это направление получает дополнительные возможности для проектирования и создания передовых имплантатов нового поколения в результате разработки биоматериалов со значительно улучшенными механическими и функциональными свойствами, в частности за счет наноструктурирования. Как показано в недавнем обзоре [1], наноструктурирование, например деформационными методами, используется для измельчения зеренной структуры поликристаллических материалов и позволяет получать объемные образцы широкого спектра металлов и сплавов, демонстрирующих

Frontier Materials & Technologies. 2022. № 3-1

существенно улучшенные прочностные и функциональные свойства, в том числе привлекательные для применения в биомедицине. Получаемые материалы характеризуются, как правило, значениями размеров зерен в диапазоне 100-1000 нм, что позволяет относить их к категории ультрамелкозернистых материалов. В то же время эти материалы могут обладать рядом особенностей, характерных для наноразмерного масштаба (двойники, выделения, сегрегации легирующих элементов, конфигурации дефектов и т. д.), которые могут существенно влиять на их свойства. Для отражения значимости этих эффектов используется термин «наноструктурные материалы» [1]. Наноструктурные материалы медицинского назначения, такие как биосовместимый технически чистый титан, могут демонстрировать значительно увеличенные (в 1,5-2 раза) прочностные характеристики как при статических, так и усталостных испытаниях по сравнению с крупнозернистым состоянием материала [2]. Более того, наноструктурный титан характеризуется повышенной биосовместимостью, что было подтверждено сравнительными in vivo испытаниями технически чистого титана в ультрамелкозернистом состоянии с точки зрения образования воспалительных клеток (макрофагов) на поверхности имплантата в работе [3]. Авторы [4] показали, что ультрамелкозернистый титан обеспечивает также лучшую адгезию, пролиферацию и живучесть остеобластов по сравнению с материалом в крупнозернистом состоянии. Эти преимущества открыли возможность создания передовых миниатюризированных конструкций зубных имплантатов, крайне привлекательных с клинической точки зрения [2; 5].

В процессе эксплуатации дентальный имплантат и связанные с ним биологические ткани подвергаются разнообразным длительным нагрузкам, возникают риски повреждений и усталостного разрушения имплантата. Компьютерное моделирование позволяет эффективно прогнозировать надежное функционирование модернизированных имплантируемых устройств. В работе [6] приводится обзор результатов применения численных расчетов для стоматологии и челюстно-лицевой хирургии. Авторы указывают, что метод конечных элементов (МКЭ) является эффективным инструментом для разработки зубных и челюстных имплантатов. Результаты верификации численных расчетов МКЭ экспериментальными методами in vitro [7] доказывают высокую надежность конечно-элементных численных расчетов механического поведения биоматериалов. Авторы [8] применили МКЭ для анализа биомеханического поведения конструкции имплантатов, варьируя тип соединения, длину и диаметр устройства, что позволило найти конфигурацию параметров, обеспечивающую оптимальное распределение напряжений.

Моделирование МКЭ зарекомендовало себя также и при разработке изделий, изготовленных из материалов с модифицированными свойствами, в первую очередь из наиболее биосовместимого металла – титана. В работе [5] приведены данные, свидетельствующие, что МКЭ может успешно учитывать повышенные свойства ультрамелкозернистого титана Grade 4, полученного интенсивной пластической деформацией, а в работе [9] применение МКЭ позволило численно рассчитать конструкции, изготовленные из пористого материала, синтезированного аддитивными технологиями.

Несмотря на то, что моделирование МКЭ уже длительное время успешно применяется для проектирования имплантируемых систем, работы, посвященные исследованию влияния наноструктурного состояния материала на поведение имплантата под воздействием эксплуатационных нагрузок, мало представлены в литературе. Кроме того, открытым остается вопрос о деформационном поведении имплантата в различных режимах функциональной нагрузки: поскольку при эксплуатации возможно неравномерное распределение нагрузки на верхнюю часть дентального имплантата, важно учитывать эффект ее локализации на длительность надежного функционирования имплантата. Дополнительное значение имеет вид компоновки моделируемой конструкции [10], поскольку имплантат является частью сборной системы, включающей в себя основание, сам имплантат и абатмент, имитирующий верхнюю часть зуба пациента и представляющий собой связующее звено между имплантатом, заменяющим корень зуба, и коронкой.

Цель работы – оценка влияния локализации нагрузки и схемы компоновки на результаты усталостных испытаний полноценной модели зубного имплантата, изготовленного из титана в крупнозернистом и наноструктурном состояниях с помощью конечно-элементного моделирования.

МЕТОДИКА ПРОВЕДЕНИЯ ИССЛЕДОВАНИЯ

Для прочностных исследований при различных нагрузках конструкций дентального имплантата в настоящее время принят международный стандарт ISO 14801-2007 или его российский аналог ГОСТ Р ИСО 14801-2012, согласно которому были выбраны параметры моделирования.

Вначале был произведен статический расчет имплантата под действием сил F. Затем был задан ряд T(t), описывающий изменение системы сил F со временем. Изменение системы внешних сил со временем определили по формуле

$$F(t) = k_{sc} FT(t) ,$$

где k_{sc} – множитель, уточняющий значения *F* по интервалу меняющейся нагрузки.

В силу линейности системы компоненты тензора напряжения в точке (x, y, z) были рассчитаны как

$$\sigma_{ij}(t) = \sigma_{ij}^{FE} k_{sc} FT(t) \, ,$$

где $i, j = \overline{x, y, z}$, σ_{ij}^{FE} – значение компонент тензора

напряжения из статического решения.

Историю нагружения определили через T(t) и его дальнейшее преобразование.

Параметры истории многоосного нагружения привели к эквивалентным характеристикам, получаемым в условиях одноосного нагружения, путем применения соотношения, базирующегося на критериях прочности в статике.

Для анализа усталостного поведения имплантата в среде ANSYS были рассчитаны значения максимального главного напряжения и напряжения по фон Мизесу, которые используются в литературе для оценки вероятности разрушения и распределения напряжений в деталях [11].

Максимальное главное напряжение (Max Principal, M/P):

$$\begin{cases} \sigma_a^{\mathrm{np}} = \begin{cases} \sigma_{1a}, |\sigma_{1a}| \ge |\sigma_{3a}| \\ \sigma_{3a}, |\sigma_{1a}| < |\sigma_{3a}| \end{cases} \\ \sigma_m^{\mathrm{np}} = \begin{cases} \sigma_{1m}, |\sigma_{1m}| \ge |\sigma_{3m}| \\ \sigma_{3m}, |\sigma_{1m}| < |\sigma_{3m}| \end{cases} \end{cases}$$

где σ_{1a} , σ_{2a} , σ_{3a} , и σ_{1m} , σ_{2m} , σ_{3m} – главные напряжения тензоров амплитудных и средних значений напряжений соответственно.

Equivalent von-Mises (*E/M*), или напряжение по фон Мизесу – эквивалентное напряжение, выраженное как сумма всех главных напряжений, действующих на механическую конструкцию во всех направлениях:

$$\begin{cases} \sigma_a^{\text{np}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{(\sigma_{1a} - \sigma_{2a})^2 + (\sigma_{2a} - \sigma_{3a})^2 + (\sigma_{3a} - \sigma_{1a})^2} \\ \sigma_m^{\text{np}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{(\sigma_{1m} - \sigma_{2m})^2 + (\sigma_{2m} - \sigma_{3m})^2 + (\sigma_{3m} - \sigma_{1m})^2} \end{cases}$$

Signed von-Mises (S/M), или напряжение по фон Мизесу со знаком:

$$\begin{cases} \sigma_{a}^{\rm np} = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{(\sigma_{1a} - \sigma_{2a})^{2} + (\sigma_{2a} - \sigma_{3a})^{2} + (\sigma_{1a})^{2}}{(\sigma_{1a} - \sigma_{1a})^{2}}} \\ \sigma_{m}^{\rm np} = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{(\sigma_{1m} - \sigma_{2m})^{2} + (\sigma_{2m} - \sigma_{3m})^{2} + (\sigma_{1m})^{2}}{(\sigma_{1m} - \sigma_{1m})^{2}}} \\ * \operatorname{sigm}(\sigma_{1m}), \end{cases}$$

где sigm $(x) = \begin{cases} 1, x > 0 \\ -1, x < 0 \end{cases}$.

Эта величина аналогична напряжению по фон Мизесу и отличается тем, что напряжение по фон Мизесу всегда показывает положительное значение, а формулировка *S/M* учитывает, что напряжение по фон Мизесу принимает знак наибольшего абсолютного основного напряжения. По этому параметру можно определить, испытывает объект растяжение или сжатие.

В большинстве случаев соотношения получены при симметричном цикле нагружения и, как следствие, не учитывают наличие средних напряжений, которые существенно влияют на сопротивление усталости. Полученные характеристики были сведены к эквивалентным по повреждаемости в условиях симметричного цикла нагружения. Для выполнения данного перехода использовали соотношения для амплитуды эквивалентного симметричного цикла напряжений $\sigma_{a \ экв}$ на основании соотношения Гудмана, которое применяется для малопластичных материалов [12; 13]:

$$\sigma_{a \ \mathsf{3kb}} = \begin{cases} \frac{\sigma_a^{\mathsf{np}}}{1 - \frac{\sigma_m^{\mathsf{np}}}{\sigma_{\mathsf{b}}}}, \sigma_a^{\mathsf{np}} \ge 0\\ 1 - \frac{\sigma_m^{\mathsf{np}}}{\sigma_{\mathsf{b}}}, \sigma_a^{\mathsf{np}} < 0 \end{cases}$$

где $\sigma_{\rm B}$ – предел прочности материала; σ_m – предел текучести материала.

Был рассчитан ряд определяющих характеристик сопротивления усталости, широко применяющихся при конечно-элементном анализе на платформе ANSYS [12; 13].

Усталостная долговечность (*Life*) *N* – это характеристика выносливости металлов при напряжениях выше предела выносливости, определяемая числом циклов напряжения (деформации) до образования трещины заданной протяженности *N*.

Коэффициент запаса по долговечности (*Damage*) определяется по формуле

$$n_{SF}^N = \frac{N_6}{N} \,,$$

где *N* – текущая долговечность;

 $N_{\rm 6}$ – расчетная долговечность, по умолчанию $N_{\rm 6} = 10^8$.

Данный коэффициент определяется как расчетный срок службы, деленный на имеющийся срок службы. Значение *Damage* больше 1 указывает на то, что деталь выйдет из строя из-за усталостных эффектов до того, как будет достигнут расчетный срок службы. Таким образом, для дентального имплантата при заданном расчетном сроке службы данный параметр должен быть меньше 1.

Коэффициент запаса по амплитудам напряжений (Safety Factor, *S/F*), определяемый по формуле $n_{SF}^{\sigma} = \frac{\sigma_{1a}}{\sigma_{a \ ЭKB}}$, представляет собой контурную диаграмму

коэффициента безопасности по отношению к усталостному разрушению при заданном расчетном сроке службы и показывает отношение избыточного запаса прочности. При расчете данный параметр не должен падать ниже 1, иначе деталь при расчетном сроке службы рискует выйти из строя. Конструкция с S/F=1 будет поддерживать только расчетную нагрузку, и любая дополнительная нагрузка приведет к разрушению конструкции.

Эквивалентная амплитуда напряжений (Equivalent Alternating Stress, E/A/S, $\sigma_{a \ _{3KB}}$) представляет собой результат сведения приведенных выше характеристик одноосного цикла нагружения к эквивалентным по повреждаемости характеристикам симметричного цикла. Эта величина не должна превышать предела прочности или предела текучести материала, используемого в изготовлении дентального имплантата.

Объектом исследования был выбрана конструкция, соответствующая дизайну имплантата Timplant s.r.o. с диаметром 2,4 мм, разработанного для изготовления из нанотитана, полученного методами интенсивной пластической деформации, и показавшего высокую клиническую эффективность [2], что позволяет рассматривать его как основу для проектирования усовершенствованных имплантатов, изготовленных из наноструктурных биоматериалов [14]. Технический чертеж имплантата представлен на рис. 1.

Моделирование МКЭ выполняли на платформе ANSYS, материалы при расчетах рассматривались как изотропные и гомогенные в рамках линейного и упругого поведения.

Характеристики материала имплантата, используемые для численных расчетов в крупнозернистом и наноструктурном состояниях, приведены в таблице 1 и на рис. 2 согласно литературным данным [2]. Отличие усталостного поведения материала в разных состояниях учитывали аналогично [15]. Абатмент был выполнен из конструкционной стали в соответствии с [16], так же как и база.

Были рассмотрены несколько вариантов различных конструктивных схем с целью оценки влияния параметров нагрузки на усталостные характеристики имплантата. За основу взяли конструктивную компоновку «абатмент – имплантат – база», выполненную по ГОСТ Р ИСО 14801-2012 (рис. 3). Для расчетов были выбраны конструктивные компоновки вида «абатмент – имплантат»,



Puc. 1. Технический чертеж дентального имплантата Fig. 1. Design drawing of a dental implant

Таблица 1. Свойства материалов имплантата, использованные в расчетах Table 1. Properties of implant materials used in calculations

Параметр	Крупнозернистый титан	Наноструктурный титан		
Модуль Юнга, ГПа	110	110		
Коэффициент Пуассона	0,32	0,32		
Предел прочности, МПа	730	1255		
Предел текучести, МПа	500	1200		



Рис. 2. Усталостные кривые для наноструктурного (1) и крупнозернистого (2) титана **Fig. 2.** Fatigue curves for nanostructured (1) and coarse-grained (2) titanium



Puc. 3. Схема конструктивной сборки: «абатмент – имплантат – база» Fig. 3. Constructional assembling scheme: "abutment – implant – base"

«имплантат – база», «имплантат», чтобы установить возможные пути упрощения процедуры моделирования для оптимизации счетного времени. Испытания проводили с учетом того, что площадь контакта имплантата во всех схемах одинакова (рис. 4).

Испытание имплантата осуществлялось путем равномерной нагрузки на полусферу абатмента с вектором нагрузки под углом 30° к оси имплантата согласно ГОСТ Р ИСО 14801-2012.

Рассматривали несколько вариантов локализации нагрузки без абатмента (рис. 5) для схем «имплантат – база» и «имплантат». Выбор вариантов обусловлен особенностями функционирования конструкции дентального имплантата (рис. 4). Вариант 1 предполагает контактную нагрузку через абатмент, при этом она сосредоточена на одном из краев имплантата (при откусывании). При варианте 2 нагрузка распределена в объеме контактной площади абатмент – имплантат (при жевании). Вариант 3 подразумевает, что абатмент передает вертикальную контактную нагрузку, распределенную по верхней оконечности имплантата (при ударном воздействии).

Сетка моделирования была представлена треугольными элементами с размерами ячеек 0,1 мм. Усталостное испытание имплантата осуществлялось путем нагружения верхней части с переменной локализацией нагрузки с использованием модуля «Анализ усталости», количество циклов составило 2 075 000, значение периодической силы равнялось 75,6 Н. Распределение вектора нагрузки, приведенное к осям системы координат, связанной с имплантатом, составило -37,8 Н (по оси *x*) и -65,5 Н (по оси *y*).

В рамках представленного выше подхода рассчитали следующие параметры:

1) максимальное главное напряжение (Max Principal, M/P);

2) напряжение по фон Мизесу (Equivalent von-Mises, E/M);

3) напряжение по фон Мизесу со знаком (Signed von-Mises, S/M).

РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

Результаты моделирования представлены в таблице 2 и на рис. 6. Таблица 2 суммирует все значения рассчитанных величин для рассмотренных вариантов компоновки и локализации нагрузки с учетом структурного состояния материала. Подразумевалось, что разрушение материала может происходить при достижении расчетных величин критических значений, при этом «Разрушение 1» означает, что критической величины (предела прочности материала) достигло эквивалентное напряжение; «Разрушение 2» означает, что *Damage>*1; «Разрушение 3» - Life=0. Видно, что компоновки, не учитывающие реакцию основания, дают нереалистичную оценку прогнозируемой функциональности имплантата в условиях циклической нагрузки по сравнению с базовой конфигурацией «абатмент – имплантат – база». Как следствие, в дальнейшем имеет смысл рассматривать только компоновки типа «абатмент - имплантат – база» или «имплантат – база».

Значения коэффициента запаса для имплантата, изготовленного из крупнозернистого и наноструктурного титана, представлены на рис. 6. Рассчитанные значения свидетельствуют о том, что компоновка без учета абатмента дает завышенные значения запаса прочности рассчитываемой конструкции. В отличие от компоновки «абатмент – имплантат – база», она предсказывает надежное функционирование изделия, выполненного из титана в крупнозернистом состоянии.

На рис. 7 представлены распределения напряжений в изделии из наноструктурного и крупнозернистого



Puc. 4. Схема контакта крепления основания и рассмотренные конструктивные компоновки:
a – «абатмент – имплантат – база»; b – «имплантат – база»; c – «абатмент – имплантат»; d – «имплантат»
Fig. 4. A scheme of a base fixation contact and considered structural arrangements:
a – "abutment – implant – base"; b – "implant – base"; c – "abutment – implant"; d – "implant"



Puc. 5. Различная локализация нагрузки на верхнюю часть имплантата (выделено темным цветом):
a – вариант 1 – краевая нагрузка; b – вариант 2 – нагрузка по всей контактной площади; c – вариант 3 – вертикальная нагрузка
Fig. 5. Various localizations of a load on the implant upper part (highlighted by the dark colour):
a – variant 1 – edge load; b – variant 2 – the load over the entire contact area; c – variant 3 – vertical load

титана, рассчитанные для промоделированных компоновок типа «абатмент – имплантат – база». Из рис. 7 видно, что максимальные значения главных напряжений концентрируются в зоне, соответствующей шейке имплантата, а уровень максимальных значений выше для крупнозернистого титана (757 МПа), чем для наноструктурного (528 МПа).

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Анализ полученных результатов показывает, что при различной компоновке и локализации нагрузок моделируемый имплантат демонстрирует различное поведение. Как следует из сделанных наблюдений, конструкции, не учитывающие реакцию основания, существенно занижают способность изделия противостоять заданной циклической нагрузке вне зависимости от наличия абатмента. С другой стороны, конструкция типа «имплантат – база» дает завышенные значения для показателей коэффициента запаса при любом варианте локализации нагрузки. При этом максимальные значения напряжений достигаются при локализации приложенной нагрузки по всей контактной площади верхней части имплантата. Это обстоятельство можно учитывать при выборе схемы моделирования усталостных процессов в данной компоновке. Результаты моделирования компоновки «абатмент – имплантат – база» (таблица 2) дают наиболее реалистичное предсказание усталостного поведения протезируемого устройства в зависимости от используемого для его изготовления материала. В литературе встречаются работы, для упрощения расчетных процедур не учитывающие эффекты, связанные с наличием абатмента в формировании напряженно-деформированного состояния. Настоящее исследование демонстрирует, что для обеспечения корректного проектирования медицинских имплантатов роль абатмента необходимо принимать во внимание.

Известно, что численные оценки усталостного поведения при помощи МКЭ показывают хорошее соответствие опытным данным [17]. В то же время свойства материала, используемого для изготовления имплантата, могут заметно повлиять на параметры его функционирования под циклическими нагрузками [5; 18]. Использование наноструктурного титана в качестве материала для имплантата позволяет обеспечить его надежное функционирование при заданной циклической **Таблица 2.** Результаты моделирования МКЭ для различных вариантов компоновки устройства, локализации нагрузки и состояния материала **Table 2.** The results of FEM simulation for various device arrangement options, load localization and material's state

Компоновка	Nº	Тип	E/A/S	Damage	Life, циклы	E/A/S	Damage	Life, циклы	
			МПа			ΜПа			
			Max	Max	Min	Max	Max	Min	
			Наноструктурный титан			Крупнозернистый титан			
Абатмент – имплантат – база	1	E/M	418			550	$1 \cdot 10^{-7}$	2,075·10 ¹³	
	2	M/P	528	528 9,6·10 ⁻⁸ 2,2·10 ¹³		Разрушение 1			
	3	S/M	343			427	$1 \cdot 10^{-7}$	2,075·10 ¹³	
Абатмент – имплантат	4	_	Разрушение 1, 2, 3						
Имплантат (1 вариант)	7	E/M	Разрушение 2, 3						
	8	M/P	Разрушение 1, 2, 3			Разрушение 1, 2, 3			
	9	S/M	Разрушение 2, 3						
Имплантат (2 вариант)	10	E/M	Разрушение 3						
	11	M/P	Разрушение 2, 3						
	12	S/M	Разрушение 3						
Имплантат (3 вариант)	13	E/M	Разрушение 2, 3						
	14	M/P	Разрушение 1, 2, 3						
	15	S/M	Разрушение 2, 3						
Имплантат (1 вариант) – база	16	E/M	248	9,6·10 ⁻⁸	2,2.1013	289	1.10 ⁻⁷	2,075·10 ¹³	
	17	M/P	288			346			
	18	S/M	207			212			
Имплантат (2 вариант) – база	19	E/M	171			171			
	20	M/P	234			234			
	21	S/M	171			171			
Имплантат (3 вариант) – база	22	E/M	290			350			
	23	M/P	350			438			
	24	S/M	236			261			

нагрузке – максимальная эквивалентная амплитуда напряжений E/A/S не достигает критического уровня предела текучести $\sigma_{\rm T}$ материала: $\sigma_{\rm эквив}$ (528 МПа) $<\sigma_{\rm T}$ (1200 МПа). При использовании крупнозернистого титана имплантат либо разрушается, либо $\sigma_{\rm эквив}$ (550 МПа) достигает значений, заметно превышающих $\sigma_{\rm T}$ материала (500 МПа), что может привести к его деформации. Наибольшие оценки внутренних напряжений позволяет сделать величина максимального главного напряжения M/P.

Коэффициент запаса по амплитудам напряжений для наноструктурного имплантата демонстрирует показатели не меньше порогового значения (*S*/*F*>1,2), для крупнозернистого титана наблюдается обратная картина – $S/F\approx0,9$, что согласуется с данными по максимальным значениям напряжений из таблицы 2. В связи с этим выбранный дизайн миниатюризированного имплантата позволяет использовать для его изготовления материал только в наноструктурном состоянии. Это утверждение подтверждается сопоставлением с экспериментальными данными, которые свидетельствуют о том, что наноструктурный титан обеспечивает надежное функционирование имплантата с таким дизайном (диаметр – 2,4 мм) [2], в отличие от крупнозернистого материала.



Рис. 6. Значения коэффициента запаса по амплитудам напряжений для компоновок имплантата, учитывающих реакцию основания:

1 — наноструктурный титан; 2 — крупнозернистый титан

Fig. 6. Safety factor values according to the stress amplitudes for implant arrangements considering base reaction: 1 - nanostructured titanium; 2 - coarse-grained titanium



Puc. 7. Вид напряженного состояния имплантата для компоновки «абатмент – имплантат – база», изготовленного из титана в наноструктурном (a) и крупнозернистом (b) состоянии
Fig. 7. A view of the implant stress state for the "abutment – implant – base" arrangement produced from titanium in nanostructured (a) and coarse-grained (b) states

Есть основания полагать, что корректный учет типа материала основания позволит еще более прецизионно моделировать процессы, связанные с усталостной прочностью имплантируемых устройств, изготовленных из материала с улучшенными свойствами. Как показано в [19] с применением комбинации моделирования МКЭ и поликристаллической пластичности, реализованной методом реалистичных элементов объема, а также в [20] в рамках многомасштабного моделирования, учет кристаллографической текстуры может быть критичен, особенно для материалов с более низкой кристаллической симметрией, чем кубическая - таких как титан с гексагональной плотноупакованной решеткой. Для развития данной темы запланирован ряд работ по моделированию влияния кристаллографической текстуры и анизотропии механических свойств на усталостное поведение изделий, выполненных из поликристаллических материалов, полученных деформационными методами.

выводы

По результатам конечно-элементного моделирования дентального имплантата в различной компоновке, изготовленного из биосовместимого титана в крупнозернистом и наноструктурном состоянии, можно сделать следующие выводы.

1. Вариации компоновки и локализации нагрузок на имплантат оказывают значимое влияние на поведение имплантируемого устройства в условиях циклической нагрузки. Варианты компоновки, не учитывающие реакцию опоры, дают нереалистично заниженную жизнеспособность имплантата, независимо от материала изготовления. Вариант, не учитывающий наличие абатмента, завышает показатели надежности функционирования имплантата в условиях заданной схемы нагружения. Наиболее корректные результаты обеспечиваются моделированием схемы «абатмент – имплантат – база».

2. Максимальная концентрация напряжений локализуется у шейки имплантата, при этом надежное функционирование имплантата, выбранного для исследования дизайна, обеспечивается только при использовании наноструктурного титана в качестве материала исследования. При использовании крупнозернистого титана максимальное главное напряжение и напряжение по фон Мизесу превышают предел прочности и предел текучести материала соответственно.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

 Edalati K., Bachmaier A., Beloshenko V.A., Beygelzimer Ya., Blank V.D., Botta W.J., Bryla K., Cizek J., Divinski S., Enikeev N.A., Estrin Yu., Faraji G., Figueire-do R.B., Fuji M., Furuta T., Grosdidier T., Gubicza J., Hohenwarter A., Horita Z., Huot J., Ikoma Y., Janecek M., Kawasaki M., Kral P., Kuramoto S., Langdon T.G., Leiva D.R., Levitas V.I., Mazilkin A., Mito M., Miyamoto H., Nishizaki T., Pippan R., Popov V.V., Popova E.N., Purcek G., Renk O., Revesz A., Sauvage X., Sklenicka V., Skrotzki W., Straumal B.B., Suwas S., Toth L.S., Tsuji N., Valiev R.Z., Wilde G., Zehetbauer M.J., Zhu X. Nanomaterials by severe plastic deformation: review of historical developments and recent advances // Materials Research Letters. 2022. Vol. 10. № 4. P. 163–256. DOI: <u>10.1080/21663831.</u> 2022.2029779.

- Polyakov A.V., Dluhoš L., Dyakonov G.S., Raab G.I., Valiev R.Z. Recent Advances in Processing and Application of Nanostructured Titanium for Dental Implants // Advanced Engineering Materials. 2015. Vol. 17. № 12. P. 1869–1875. DOI: <u>10.1002/adem.201500212</u>.
- Bindu S., Sanosh K., Smetana K., Balakrishnan A., Kim T.N. An in vivo evaluation of ultra-fine grained titanium implants // Journal of Materials Science and Technology. 2009. Vol. 25. № 4. P. 556–560.
- An B., Li Z., Diao X., Xin H., Zhang Q., Jia X., Wu Y., Li K., Guo Y. In vitro and in vivo studies of ultrafinegrain Ti as dental implant material processed by ECAP // Materials Science and Engineering C. 2016. Vol. 67. P. 34–41. DOI: <u>10.1016/j.msec.2016.04.105</u>.
- Valiev R.Z., Prokofiev E.A., Kazarinov N.A., Raab G.I., Minasov T.B. Stráský J. Developing Nanostructured Ti Alloys for Innovative Implantable Medical Devices // Materials. 2020. Vol. 13. № 4. P. 967–981. DOI: <u>10.</u> <u>3390/mal13040967</u>.
- Van Staden R.C., Guan H., Loo Y.C. Application of the finite element method in dental implant research // Computer Methods in Biomechanics and Biomedical Engineering. 2006. Vol. 9. № 4. P. 257–270. DOI: <u>10.</u> <u>1080/10255840600837074</u>.
- Rezende C.E.E., Chase-Diaz M., Costa M.D., Albarracin M.L., Paschoeto G., Sousa E.A.C., Rubo J.H., Borges A.F.S. Stress distribution in single dental implant system: three-dimensional finite element analysis based on an in vitro experimental model // Journal of Craniofacial Surgery. 2015. Vol. 26. № 7. P. 2196– 2200. DOI: 10.1097/SCS.000000000001977.
- Borie E., Orsi I.A., Noritomi P.Y., Kemmoku D.T. Three-dimensional finite element analysis of the biomechanical behaviors of implants with different connections, lengths, and diameters placed in the maxillary anterior region // International Journal of Oral and Maxillofacial Implants. 2016. Vol. 31. № 1. P. 101–110. DOI: <u>10.11607/jomi.4120</u>.
- Huang C.-C., Li M.-J., Tsai P.-I., Kung P.-C., Chen S.-Y., Sun J.-S., Tsou N.-T. Novel design of additive manufactured hollow porous implants // Dental Materials. 2020. Vol. 36. № 11. P. 1437–1451. DOI: <u>10.1016/j.</u> <u>dental.2020.08.011</u>.
- 10. Akça K., Çehreli M.C., Iplikçioğlu H. Evaluation of the mechanical characteristics of the implant-abutment complex of a reduced-diameter morse-taper implant: A nonlinear finite element stress analysis // Clinical Oral Implants Research. 2003. Vol. 14. № 4. P. 444– 454. DOI: 10.1034/j.1600-0501.2003.00828.x.
- Kul E., Korkmaz I.H. Effect of different design of abutment and implant on stress distribution in 2 implants and peripheral bone: A finite element analysis study // Journal of Prosthetic Dentistry. 2021. Vol. 126. № 5. P. 664. e1–664.e9. DOI: 10.1016/j.prosdent.2020.09.058.
- Darwich A., Alammar A., Heshmeh O., Szabolcs S., Nazha H. Fatigue loading effect in custom-made all-on-4 implants system: A 3D finite elements analysis // IRBM. 2021. DOI: <u>10.1016/j.irbm.2021.06.008</u>.
- 13. Kayabaşi O., Yüzbasıoğlu E., Erzincanli F. Static, dynamic and fatigue behaviors of dental implant using

finite element method // Advances in Engineering Software. 2006. Vol. 37. № 10. P. 649–658. DOI: <u>10.1016/</u><u>j.advengsoft.2006.02.004</u>.

- Valiev R.Z., Parfenov E.V., Parfenova L.V. Developing nanostructured metals for manufacturing of medical implants with improved design and biofunctionality // Materials Transactions. 2019. Vol. 60. № 7. P. 1356–1366. DOI: <u>10.2320/matertrans.MF201943</u>.
- 15. Fintová S., Dlhý P., Mertová K., Chlup Z., Duchek M., Procházka R., Hutař P. Fatigue properties of UFG Ti grade 2 dental implant vs. conventionally tested smooth specimens // Journal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials. 2021. Vol. 123. Article number 104715. DOI: <u>10.1016/j.jmbbm.2021.104715</u>.
- 16. Ayllón J.M., Navarro C., Vázquez J., Domínguez J. Fatigue life estimation in dental implants // Engineering Fracture Mechanics. 2014. Vol. 123. P. 34–43. DOI: <u>10.</u> <u>1016/j.engfracmech.2014.03.011</u>.
- Duan Y., Gonzalez J.A., Kulkarni P.A., Nagy W.W., Griggs J.A. Fatigue lifetime prediction of a reduceddiameter dental implant system: Numerical and experimental study // Dental Materials. 2018. Vol. 34. № 9. P. 1299–1309. DOI: <u>10.1016/j.dental.2018.06.002</u>.
- Çallıoğlu Ş., Acar P. Design of β-Titanium microstructures for implant materials // Materials Science and Engineering C. 2020. Vol. 110. Article number 110715. DOI: 10.1016/j.msec.2020.110715.
- Segurado J., Llorca J. Simulation of the deformation of polycrystalline nanostructured Ti by computational homogenization // Computation Materials Science. 2013. Vol. 76. P. 3–11. DOI: <u>10.1016/j.commatsci.2013.03.008</u>.
- 20. Mishnaevsky L., Levashov E., Valiev R.Z., Segurado J., Sabirov I., Enikeev N., Prokoshkin S., Solov'yov A.V., Korotitskiy A., Gutmanas E., Gotman I., Rabkin E., Psakj'E S., Dluhos L., Seefeldt M., Smolin A. Nanostructured titanium-based materials for medical implants: Modeling and development // Materials Science and Engineering R: Reports. 2014. Vol. 81. № 1. P. 1–19. DOI: 10.1016/j.mser.2014.04.002.

REFERENCES

- K., 1. Edalati Bachmaier A., Beloshenko V.A., Beygelzimer Ya., Blank V.D., Botta W.J., Bryla K., Cizek J., Divinski S., Enikeev N.A., Estrin Yu., Faraji G., Figueire-do R.B., Fuji M., Furuta T., Grosdidier T., Gubicza J., Hohenwarter A., Horita Z., Huot J., Ikoma Y., Janecek M., Kawasaki M., Kral P., Kuramoto S., Langdon T.G., Leiva D.R., Levitas V.I., Mazilkin A., Mito M., Miyamoto H., Nishizaki T., Pippan R., Popov V.V., Popova E.N., Purcek G., Renk O., Revesz A., Sauvage X., Sklenicka V., Skrotzki W., Straumal B.B., Suwas S., Toth L.S., Tsuji N., Valiev R.Z., Wilde G., Zehetbauer M.J., Zhu X. Nanomaterials by severe plastic deformation: review of historical developments and recent advances. Materials Research Letters, 2022, vol. 10, no. 4, pp. 163-256. DOI: 10.1080/21663831. 2022.2029779.
- Polyakov A.V., Dluhoš L., Dyakonov G.S., Raab G.I., Valiev R.Z. Recent Advances in Processing and Application of Nanostructured Titanium for Dental Implants. *Advanced Engineering Materials*, 2015, vol. 17, no. 12, pp. 1869–1875. DOI: <u>10.1002/adem.201500212</u>.

- 3. Bindu S., Sanosh K., Smetana K., Balakrishnan A., Kim T.N. An in vivo evaluation of ultra-fine grained titanium implants. *Journal of Materials Science and Technology*, 2009, vol. 25, no. 4, pp. 556–560.
- An B., Li Z., Diao X., Xin H., Zhang Q., Jia X., Wu Y., Li K., Guo Y. In vitro and in vivo studies of ultrafinegrain Ti as dental implant material processed by ECAP. *Materials Science and Engineering C*, 2016, vol. 67, pp. 34–41. DOI: <u>10.1016/j.msec.2016.04.105</u>.
- Valiev R.Z., Prokofiev E.A., Kazarinov N.A., Raab G.I., Minasov T.B. Stráský J. Developing Nanostructured Ti Alloys for Innovative Implantable Medical Devices. *Materials*, 2020, vol. 13, no. 4, pp. 967–981. DOI: <u>10.</u> <u>3390/mal13040967</u>.
- Van Staden R.C., Guan H., Loo Y.C. Application of the finite element method in dental implant research. *Computer Methods in Biomechanics and Biomedical Engineering*, 2006, vol. 9, no. 4, pp. 257–270. DOI: <u>10</u>. <u>1080/10255840600837074</u>.
- Rezende C.E.E., Chase-Diaz M., Costa M.D., Albarracin M.L., Paschoeto G., Sousa E.A.C., Rubo J.H., Borges A.F.S. Stress distribution in single dental implant system: three-dimensional finite element analysis based on an in vitro experimental model. *Journal of Craniofacial Surgery*, 2015, vol. 26, no. 7, pp. 2196– 2200. DOI: 10.1097/SCS.000000000001977.
- Borie E., Orsi I.A., Noritomi P.Y., Kemmoku D.T. Three-dimensional finite element analysis of the biomechanical behaviors of implants with different connections, lengths, and diameters placed in the maxillary anterior region. *International Journal of Oral and Maxillofacial Implants*, 2016, vol. 31, no. 1, pp. 101–110. DOI: <u>10.11607/jomi.4120</u>.
- Huang C.-C., Li M.-J., Tsai P.-I., Kung P.-C., Chen S.-Y., Sun J.-S., Tsou N.-T. Novel design of additive manufactured hollow porous implants. *Dental Materials*, 2020, vol. 36, no. 11, pp. 1437–1451. DOI: <u>10.1016/</u> <u>j.dental.2020.08.011</u>.
- Akça K., Çehreli M.C., Iplikçioğlu H. Evaluation of the mechanical characteristics of the implant-abutment complex of a reduced-diameter morse-taper implant: A nonlinear finite element stress analysis. *Clinical Oral Implants Research*, 2003, vol. 14, no. 4, pp. 444–454. DOI: <u>10.1034/j.1600-0501.2003.00828.x</u>.
- Kul E., Korkmaz I.H. Effect of different design of abutment and implant on stress distribution in 2 implants and peripheral bone: A finite element analysis study. *Journal of Prosthetic Dentistry*, 2021, vol. 126, no. 5, pp. 664. e1–664.e9. DOI: <u>10.1016/j.prosdent.2020.09.058</u>.
- Darwich A., Alammar A., Heshmeh O., Szabolcs S., Nazha H. Fatigue loading effect in custom-made all-on-4 implants system: A 3D finite elements analysis. *IRBM*, 2021. DOI: <u>10.1016/j.irbm.2021.06.008</u>.
- Kayabaşi O., Yüzbasıoğlu E., Erzincanli F. Static, dynamic and fatigue behaviors of dental implant using finite element method. *Advances in Engineering Software*, 2006, vol. 37, no. 10, pp. 649–658. DOI: <u>10</u>. <u>1016/j.advengsoft.2006.02.004</u>.
- Valiev R.Z., Parfenov E.V., Parfenova L.V. Developing nanostructured metals for manufacturing of medical implants with improved design and biofunctionality. *Materials Transactions*, 2019, vol. 60, no. 7, pp. 1356–1366. DOI: <u>10.2320/matertrans.MF201943</u>.

- 15. Fintová S., Dlhý P., Mertová K., Chlup Z., Duchek M., Procházka R., Hutař P. Fatigue properties of UFG Ti grade 2 dental implant vs. conventionally tested smooth specimens. *Journal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials*, 2021, vol. 123, article number 104715. DOI: 10.1016/j.jmbbm.2021.104715.
- 16. Ayllón J.M., Navarro C., Vázquez J., Domínguez J. Fatigue life estimation in dental implants. *Engineering Fracture Mechanics*, 2014, vol. 123, pp. 34–43. DOI: <u>10.1016/j.engfracmech.2014.03.011</u>.
- Duan Y., Gonzalez J.A., Kulkarni P.A., Nagy W.W., Griggs J.A. Fatigue lifetime prediction of a reduceddiameter dental implant system: Numerical and experimental study. *Dental Materials*, 2018, vol. 34, no. 9, pp. 1299–1309. DOI: <u>10.1016/j.dental.2018.06.</u> <u>002</u>.
- Çallıoğlu Ş., Acar P. Design of β-Titanium microstructures for implant materials. *Materials Science and Engineering C*, 2020, vol. 110, article number 110715. DOI: <u>10.1016/j.msec.2020.110715</u>.
- Segurado J., Llorca J. Simulation of the deformation of polycrystalline nanostructured Ti by computational homogenization. *Computation Materials Science*. 2013, vol. 76, pp. 3–11. DOI: <u>10.1016/j.commatsci.2013.03.008</u>.
- 20. Mishnaevsky L., Levashov E., Valiev R.Z., Segurado J., Sabirov I., Enikeev N., Prokoshkin S., Solov'yov A.V., Korotitskiy A., Gutmanas E., Gotman I., Rabkin E., Psakj'E S., Dluhos L., Seefeldt M., Smolin A. Nanostructured titanium-based materials for medical implants: Modeling and development. *Materials Science* and Engineering R: Reports, 2014, vol. 81, no. 1, pp. 1–19. DOI: <u>10.1016/j.mser.2014.04.002</u>.

Finite-element simulation of fatigue behavior of a medical implant produced from titanium in the large-grained and nanostructured states

© 2022

Aleksey V. Kapustin^{*1}, postgraduate student of Chair of Materials Science and Physics of Metals Nariman A. Enikeev^{1,2,3}, Doctor of Sciences (Physics and Mathematics), senior researcher of laboratory "Metals and Alloys under the Extreme Conditions", professor of Chair of Materials Science and Physics of Metals

¹Ufa State Aviation Technical University, Ufa (Russia)

²Bashkir State University, Ufa (Russia)

*E-mail: kapustin129@yandex.ru

³ORCID: <u>https://orcid.org/0000-0002-7503-8949</u>

Received 27.04.2022

Accepted 02.08.2022

Abstract: Nowadays, to improve the quality of life, dental implantation is widely used, and ensuring proper functioning and durability of the implantable devices is one of the most crucial tasks for modern-day dentistry. The development of new biomaterials with improved properties, such as nanostructured materials, widens the possibilities of medical goods miniaturization to create new-generation implants. Computer simulation plays a large part when designing these devices, which allows effectively specifying an implant design depending on the materials used and operation conditions. This paper presents the results of modeling using the finite-element method for the comparative analysis of an implant's deformed behavior within the cyclic load conditions. The authors considered large-grained commercially pure titanium and nanostructured titanium with improved properties as implant material. The authors analyzed various arrangements of an implanted device according to the fatigue testing conditions – considering and not considering the influence of an abutment and the base reaction. The study identified the implant's characteristics, such as fatigue endurance and safety factor for a specific type of arrangement and material type, as well as the equivalent stress distribution, including taking into account a sign. The research shows that the most realistic results can be achieved when modeling a device in the "abutment – implant – base" arrangement. The study demonstrates that strength characteristics crucial for product destruction are described by the maximum principal stresses, and the studied implant configuration ensures its longstanding proper function-ing in the case of its production exceptionally from nanostructured titanium with enhanced properties.

Keywords: dental implant; finite-element method; nanostructured materials; titanium; strength; fatigue properties.

Acknowledgments: N.A. Enikeev is grateful to the support of the research laboratory of Eurasian REC "Metals and Alloys under the Extreme Conditions" of the Federal State Budgetary Educational Institution of Higher Education "USATU" within the state assignment (agreement No. 075-03-2021-014/4) of the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation.

For citation: Kapustin A.V., Enikeev N.A. Finite-element simulation of fatigue behavior of a medical implant produced from titanium in the large-grained and nanostructured states. *Frontier Materials & Technologies*, 2022, no. 3, pp. 85–95. DOI: 10.18323/2782-4039-2022-3-1-85-95.