

УДК 620.22:539.32:519.876.5

## ПРОГНОЗУВАННЯ ПРУЖНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ ШТУЧНОГО КІСТКОВОГО ЗАМІННИКА НА ОСНОВІ КОЛАГЕНУ ТА ГІДРОКСИПАТИТУ В ПАКЕТІ MATHCAD

М.Р. Романець<sup>1</sup>

<sup>1</sup>студентка групи 132-23-3, e-mail: [romanets.M.R@nmu.one](mailto:romanets.M.R@nmu.one)

<sup>1</sup>Національний технічний університет «Дніпровська політехніка», Дніпро, Україна

**Анотація.** У роботі проведено теоретичне прогнозування пружних властивостей штучного кісткового замітника на основі біокомпозиту "колаген – гідроксиапатит" (ГАП). Моделювання здійснено в програмному середовищі Mathcad. Для розрахунку ефективного модуля пружності використано комплексну мікромеханічну модель. Оцінку верхньої та нижньої теоретичних меж жорсткості виконано за класичними моделями Фойгта і Ройсса. Основний розрахунок проведено за напівемпіричною моделлю Халпіна-Цая, яка враховує об'ємну частку мінералу, а також морфологію наповнювача. Зниження жорсткості композиту за рахунок його відкритої макропористості враховано за допомогою рівняння Гібсона-Ешбі. Встановлено, що розрахункові значення модуля пружності пористого біокомпозиту нелінійно зростають від значень менше 1 ГПа до майже 10 ГПа при максимальному наповненні, що повністю відповідає механічним характеристикам губчастої та кортикальної кісткової тканини. Доведено, що запропонована архітектура матеріалу забезпечує достатню жорсткість для навантажених імплантатів та мінімізує ризик виникнення ефекту екранування напружень.

*Ключові слова:* біокомпозит, штучний кістковий замітник, гідроксиапатит, колаген, модуль Юнга, мікромеханічне моделювання, пористість, модель Халпіна-Цая.

## PREDICTION OF ELASTIC PROPERTIES OF AN ARTIFICIAL BONE SUBSTITUTE BASED ON COLLAGEN AND HYDROXYAPATITE IN MATHCAD

Mariya Romanets<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Student of group 132-23-3, Dnipro University of Technology, Dnipro, Ukraine, e-mail: [romanets.M.R@nmu.one](mailto:romanets.M.R@nmu.one)

**Abstract.** This work presents a theoretical prediction of the elastic properties of an artificial bone substitute based on a collagen-hydroxyapatite (HA) biocomposite. The modeling was performed in the Mathcad software environment. A comprehensive micromechanical approach was used to calculate the effective elastic modulus. The upper and lower theoretical stiffness bounds were evaluated using the classical Voigt and Reuss models. The primary calculation was carried out using the semi-empirical Halpin-Tsai model, which accounts for the mineral volume fraction and the filler morphology. The stiffness reduction of the composite due to its open macroporosity was incorporated using the Gibson-Ashby equation. It was established that the calculated elastic modulus of the porous biocomposite increases non-linearly from less than 1 GPa to nearly 10 GPa at maximum filler content, which is fully consistent

with the mechanical characteristics of trabecular and cortical bone tissues. The findings demonstrate that the proposed material architecture provides adequate stiffness for load-bearing implants and minimizes the risk of stress shielding.

*Keywords: biocomposite, artificial bone substitute, hydroxyapatite, collagen, Young's modulus, micromechanical modeling, porosity, Halpin-Tsai model.*

**Вступ.** Природна кісткова тканина є складним нанокомпозитом, що складається переважно з еластичної полімерної матриці (колагену I типу) та жорсткого мінерального наповнювача (кристалів гідроксиапатиту) [1, 2]. Сучасні дослідження доводять, що штучні замітники на основі системи «колаген-гідроксиапатит» забезпечують високий рівень біосумісності та остеоінтеграції. Проте їхні механічні характеристики критично залежать від мікроструктури наповнювача, зокрема аспектного відношення частинок та їх орієнтації [3], а також від загальної макропористості виробу [4]. Оскільки експериментальний синтез та механічні випробування є тривалими та вартісними процесами, на етапі проектування матеріалу доцільно застосовувати методи мікромеханічного моделювання композитів [5, 6].

**Мета роботи** полягає у теоретичному прогнозуванні та аналізі пружних властивостей (модуля Юнга) штучного пористого кісткового замітника на основі колагену та гідроксиапатиту залежно від об'ємної частки мінеральної фази з використанням програмного пакета Mathcad.

**Матеріал і результат досліджень.** Для теоретичного прогнозування пружних властивостей модельованого біокомпозиту на основі колагену та гідроксиапатиту (ГАП) було застосовано комплексний мікромеханічний підхід. Значення модулів Юнга колагену ( $E_c$ ) та ГАП ( $E_h$ ) відповідно дорівнюють 1,5 ГПа [7] та 114 ГПа [2]. Вибір ключових параметрів моделювання зумовлений анатомічною та мікроструктурною будовою природної кістки. Зокрема, досліджуваний діапазон об'ємної частки ГАП ( $V = 0...0,6$ ) повністю охоплює фізіологічні показники мінералізації натуральної кісткової тканини (яка містить 35–50% неорганічної фази за об'ємом), тоді як значення 60% є технологічною межею дисперсного наповнення, після якої композит втрачає в'язкість руйнування та критично окрихчується [2].

Морфологія наповнювача у вигляді нано-стрижнів (довжина  $L = 100$  нм, діаметр  $d = 20$  нм), які орієнтовані паралельно до осі навантаження, імітує природну просторову архітектуру кристалітів ГАП, що вибудовуються вздовж колагенових фібрил. Це забезпечує високу механічну анізотропію та максимальну ефективність передачі напружень [1, 3].

Загальну відкриту макропористість матеріалу прийнято на рівні 30% ( $P = 0,3$ ), оскільки вона відповідає характеристикам перехідної зони кортика-

льної кістки та створює оптимальний компроміс: зберігає високу конструкційну жорсткість імплантату, залишаючи при цьому простір для проростання кровоносних судин та міграції остеобластів [4].

Оскільки модельований матеріал є дисперсно-зміцненим пористим композитом зі складною будовою, використання лише однієї математичної моделі є недостатнім для адекватного опису його механічної поведінки. Тому використано комплексний підхід, що передбачає визначення теоретичних меж жорсткості, обчислення модуля пружності композиту з урахуванням мікроструктури наповнювача та пористості композиту.

#### *Визначення теоретичних меж жорсткості (моделі Фойгта і Ройсса)*

Для верифікації розрахункових даних та встановлення абсолютного діапазону значень модуля Юнга було використано класичне правило сумішей. Модель Фойгта (ізодеформаційна модель) застосовується для визначення теоретичної верхньої межі пружності. Вона описує ідеалізований стан, за якого деформація колагенової матриці та частинок ГАП є однаковою, що фізично відповідає паралельній роботі фаз уздовж осі навантаження.

Натомість модель Ройсса (ізонпружена модель) формує нижню межу жорсткості. Вона базується на припущенні про рівність напружень у компонентах композиту, що характерно для послідовного навантаження фаз, де м'якша матриця деформується першою. Комбінація цих моделей створює математичний «коридор», в межах якого мають знаходитися реальні показники модуля пружності модельованого матеріалу [2, 5].

#### *Основна прогностична модель (рівняння Халпіна-Цая)*

Класичні моделі Фойгта і Ройсса дають значну похибку для композитів із дискретним наповнювачем. Тому як основну розрахункову модель для визначення модуля Юнга суцільного біокомпозиту  $E_s$  обрано напівемпіричну модель Халпіна-Цая.

Головна перевага цієї моделі полягає у можливості врахування геометричних параметрів наповнювача через фактор форми  $\xi$ . Для обраних нанострижнів ГАП коефіцієнт форми наночастинок  $\xi = 10$ , що дозволяє коректно імітувати армуючий ефект у композиті. Крім того, математичний апарат Халпіна-Цая враховує орієнтацію нанострижнів паралельно до осі навантаження, що імітує природну анізотропію кортикальної кісткової тканини. Модель забезпечує високу точність наближення до реальних експериментальних даних механічних випробувань (in vitro) для композитів з об'ємною часткою наповнювача до 60-70% [2, 6].

#### *Врахування пористості (модель Гібсона–Ешбі)*

Оскільки функціональний кістковий замітник має забезпечувати остеокондуктивність та васкуляризацію, його макроструктура містить систему пор (загальна пористість  $P = 0.3$ ). Для перерахунку модуля пружності суцільного

композиту  $E_s$  на ефективний модуль пористого скафолда  $E$  використано модель Гібсона–Ешбі [4]:

$$E = E_s \times C(1 - P)^n \quad (1)$$

Для моделювання відкрито–пористої архітектури, де домінуючим механізмом мікродеформації є згин стінок комірок, топологічний показник структури прийнято рівним  $n = 2$ . Геометрична константа пропорційності  $C = 1$  обрана з метою побудови ідеалізованої прогностичної моделі без урахування макроскопічних технологічних дефектів, що можуть виникнути на етапі синтезу [4]. Виведений з моделі коефіцієнт редукції  $K_{por} = (1 - P)^n$  можна підставити у рівняння ідеальних моделей для спрощення і корекції розрахунків. Таким чином, комбінація моделей Халпіна-Цая та Гібсона-Ешбі дозволяє отримати комплексну оцінку механічної сумісності штучного замінника з природною кістковою тканиною.

Вхідні параметри для моделювання у середовищі Mathcad наведено на рис.1, розрахунок коефіцієнтів та побудова моделей із врахуванням пористості – на рис.2.

Вхідні дані:

$E_c := 1.5\text{-GPa}$	$L := 100\text{-nm}$	$P := 0.3$
$E_h := 114\text{-GPa}$	$d := 20\text{-nm}$	$n := 2$
$V := 0,0.01..0.6$		

Рис. 1. – Вхідні параметри для моделювання

**Аналіз результатів.** За результатами математичного моделювання в середовищі Mathcad 14 побудовано графічні залежності ефективного модуля пружності пористого біокомпозиту від об'ємної частки гідроксиапатиту у діапазоні від 0 до 0,6 (рис. 3). Розрахунки враховують базову пористість матеріалу на рівні 30%, що відповідає макроструктурі перехідної зони між кортикальною та губчастою кістковою тканиною [4].

Коефіцієнт форми наночасток:  $\xi := 2 \cdot \frac{L}{d} = 10$

Параметр ефективності армування:  $\eta := \frac{\left(\frac{E_h}{E_c}\right) - 1}{\left(\frac{E_h}{E_c}\right) + \xi} = 0.872$

Коефіцієнт послаблення:  $K_{por} := (1 - P)^n = 0.49$

Модель Фойгта:  $E_{voigt}(V) := [E_h \cdot V + E_c \cdot (1 - V)] \cdot K_{por}$

Модель Ройсса:  $E_{reuss}(V) := \left[ \frac{1}{\left(\frac{V}{E_h}\right) + \left(\frac{1 - V}{E_c}\right)} \right] \cdot K_{por}$

Модель Халпіна-Цая:  $E_{ht}(V) := \left[ E_c \cdot \left( \frac{1 + \xi \cdot \eta \cdot V}{1 - \eta \cdot V} \right) \right] \cdot K_{por}$

Рис. 2. – Розрахунок коефіцієнтів та побудова моделей із врахуванням пористості

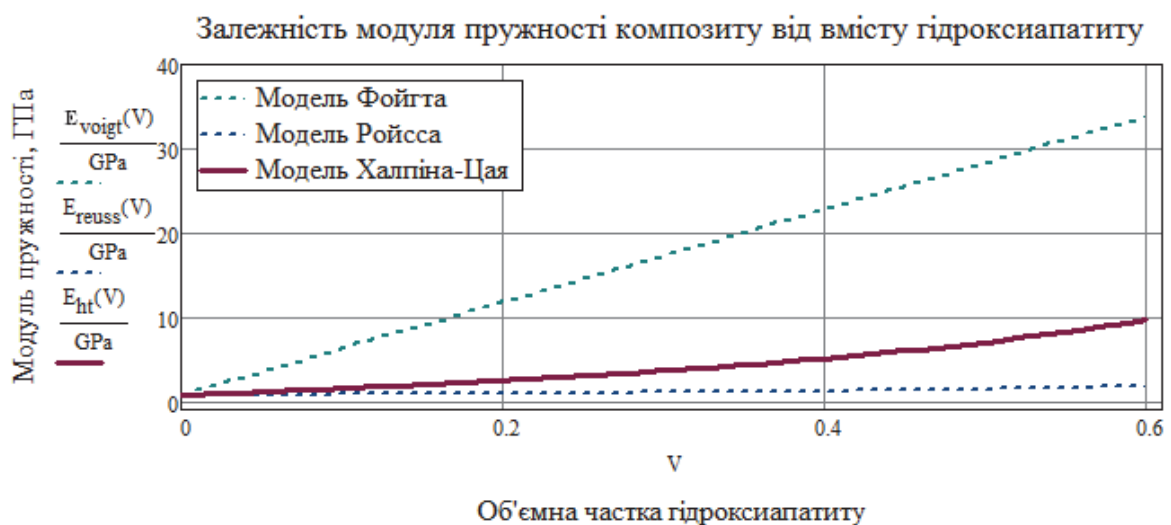


Рис. 3. – Графік залежності модуля пружності композиту від вмісту гідроксиапатиту

### Аналіз теоретичних меж жорсткості

Як видно з отриманих кривих, моделі Фойгта ( $E_{voigt}$ ) та Ройсса ( $E_{reuss}$ ) формують широкий розрахунковий коридор, що підтверджує класичне правило сумішей для матеріалів із контрастними фазами [5]. Ізодеформаційна модель Фойгта (верхня межа) демонструє стрімке зростання модуля пруж-

ності, досягаючи понад 30 ГПа при 60% наповнювача. Натомість ізонапружена модель Ройсса (нижня межа) показує, що при послідовному навантаженні фаз навіть високі концентрації мінералу не здатні суттєво підвищити загальну жорсткість (значення залишаються в межах 1 – 2,5 ГПа), оскільки основна деформація поглинається м'якою полімерною матрицею.

*Вплив вмісту гідроксиапатиту на пружність композиту*

Крива, побудована за основною прогностичною моделлю Халпіна-Цая ( $E_{ht}$ ), демонструє нелінійну залежність модуля пружності від вмісту дисперсної фази, що узгоджується з даними прогнозування для композитних матеріалів [6]. За відсутності наповнювача ( $V = 0$ ) модуль пружності відповідає властивостям пористого колагенового каркаса (менше 1 ГПа). Із введенням нано-стрижнів гідроксиапатиту спостерігається виражений армувальний ефект. Завдяки високому коефіцієнту форми частинок ( $\xi = 10$ ) та їх орієнтації вздовж осі навантаження, ефективність передачі напружень від матриці до наповнювача значно зростає [3]. За максимальної досліджуваної концентрації ( $V = 0,6$ ) модуль пружності біокомпозиту сягає 10 ГПа.

*Порівняння з властивостями природної кісткової тканини*

Модуль пружності натуральної трабекулярної (губчастої) кістки зазвичай варіюється в межах 0,1–5 ГПа, тоді як кортикальна (щільна) кістка має показники 15–20 ГПа.

За об'ємної частки гідроксиапатиту 20–30% ( $V = 0,2...0,3$ ) розрахунковий модуль композиту становить 3–5 ГПа, що відповідає механічним характеристикам щільної губчастої кістки.

При збільшенні частки наповнювача до 50–60% ( $V = 0,5...0,6$ ) модуль пружності зростає до 7–10 ГПа, наближаючись до показників кортикальної кістки [4].

Такий рівень жорсткості (до 10 ГПа) є оптимальним для навантажених імплантатів, оскільки він забезпечує міцну опору для скелета і водночас запобігає патологічному екрануванню напружень, створюючи сприятливі механічні умови для ремоделювання власної кісткової тканини пацієнта.

**Висновки.** Мікромеханічне моделювання доводить, що комбіноване використання моделей Фойгта, Ройсса, Халпіна-Цая та Гібсона-Ешбі дозволяє з високою точністю оцінити вплив мікроструктури наповнювача та макроскопічної пористості на кінцеві механічні властивості біокомпозиту.

Побудовані ізодеформаційна (за Фойгтом) та ізонапружена (за Ройссом) криві сформуvalи коректний теоретичний коридор значень жорсткості. Розрахункова крива за основною моделлю Халпіна-Цая знаходиться в межах цього коридору, що підтверджує фізичну та математичну достовірність отриманих результатів.

Математично підтверджено, що використання гідроксиапатиту у вигляді нано-стрижнів з високим аспектним відношенням, орієнтованих уздовж осі навантаження, забезпечує ефективну передачу напружень у композиті. Збільшення об'ємної частки мінеральної фази від 0 до 60% призводить до нелінійного зростання ефективного модуля пружності пористого матеріалу від значень менше 1 ГПа до майже 10 ГПа.

Розрахункові значення модуля пружності доводять, що розроблений біокомпозит із загальною пористістю 30% демонструє високу механічну подібність до природної кісткової тканини. При об'ємному вмісті гідроксиапатиту 20–30% матеріал імітує властивості трабекулярної кістки (3–5 ГПа), а при 50–60% – наближається до характеристик кортикальної кістки (до 10 ГПа). Такий діапазон жорсткості є оптимальним для навантажених імплантатів, оскільки мінімізує ризик розвитку ефекту екранування напружень та сприяє повноцінній інтеграції замітника.

## ЛІТЕРАТУРА

1. Beisekenov N., Sadenova M., Azamatov B., Syrnev B. Analysis of Biomechanical Characteristics of Bone Tissues Using a Bayesian Neural Network: A Narrative Review. *Journal of Functional Biomaterials*. 2025. Vol. 16, no. 5. p. 168. Режим доступу: [https://pmc.ncbi.nlm.nih.gov/articles/PMC12112294/#\\_ad93](https://pmc.ncbi.nlm.nih.gov/articles/PMC12112294/#_ad93) (дата звернення: 22.03.2026).
2. Oyen M. L. Chapter 5: Modeling Bone as a Two-Phase Composite. Oyen Lab Research Archive. 2010. Режим доступу: <https://oyenlab.org/wp-content/uploads/2010/05/05-composite-modeling.pdf> (дата звернення: 22.03.2026)
3. Peng F., Shaw M. T., Olson J. R., Wei M. Hydroxyapatite Needle-Shaped Particles/Poly(l-lactic acid) Electrospun Scaffolds with Perfect Particle-along-Nanofiber Orientation and Significantly Enhanced Mechanical Properties. *The Journal of Physical Chemistry C*. 2011. Vol. 115, no. 32. P. 15743–15751. DOI: 10.1021/jp201384q.
4. Titanium Lattice Structures Produced via Additive Manufacturing for a Bone Scaffold: A Review Режим доступу: <https://www.mdpi.com/2079-4983/14/3/125> (дата звернення: 22.03.2026).
5. Šarlošič J., Bocko J. Effective Material Moduli for Composites. *American Journal of Mechanical Engineering*. 2016. Vol. 4, no. 7. P. 271–275.
6. A modified Halpin–Tsai model for predicting the elastic modulus of composite materials / D. Zhou, X. Tong, H. Liu та ін. *AIP Advances*. 2024. Vol. 14, no. 1. P. 015157. DOI: 10.1063/5.0188611.
7. Kontomaris S. V., Stylianou A., Malamou A. Atomic Force Microscopy Nanoindentation Method on Collagen Fibrils. *Materials*. 2022. Vol. 15, no. 7. P. 2477. DOI: 10.3390/ma15072477.