

基于 COMSOL 医用多孔 TiNbZrTaSi 合金弹性模量仿真分析

李玉华* 王豪杰 周子旋 李优亦 魏琪 唐新远

西安科技大学机械工程学院 陕西 西安 710054

摘要: 医用多孔钛合金孔隙结构的引入可有效降低弹性模量, 消除应力屏蔽。多孔材料的弹性模量不是一个材料常数, 它主要取决于多孔材料的孔隙结构。多孔钛合金最基本的孔隙结构特征主要包括孔隙率、孔隙大小、孔隙形状三个方面。其中, 孔隙率能显著影响多孔材料的力学性能。多孔钛合金孔隙结构通常是不规则的, 然而弹性模量一般表述为相对密度的函数, 而忽略了其他结构参数的影响。孔隙形状对多孔材料的弹性模量会产生怎样的影响呢? 基于此, 本文通过 COMSOL 有限元模拟研究一定孔隙率下不同孔隙形状对多孔 Ti60Nb20Zr10Ta5Si5 (简称 TiNbZrTaSi) 合金弹性模量的影响, 为实验条件下多孔合金的制备提供设计依据。

关键词: 多孔 TiNbZrTaSi 合金; 模拟; 孔隙形状; 弹性模量

引言

随着人口老龄化加快, 损伤、感染及肿瘤等导致的骨缺损愈发常见^[1], 医用植入材料需求愈加强烈。钛合金由于良好的生物相容性、高比强度、低弹性模量等优点, 被认为是目前最具发展前景的医用骨替代材料之一^[2,3], 其目标零件主要为股骨干、股骨头、股骨柄、胫骨或齿根等人工关节、牙种植体、脊柱内固定系统的关键植入件^[3]。但与人体自然骨 (0.02~30GPa)^[4]相比, 新开发的 β 型钛合金弹性模量 (48~55GPa)^[5] 仍然偏高, 易产生应力屏蔽问题。多孔材料孔隙率与弹性模量、强度间关系可通过 Gibson-Ashby 模型^[6] 表达为 $E^*/E_s=C_1(\rho^*/\rho_s)^{n_1}$ 和 $\sigma^*/\sigma_s=C_1(\rho^*/\rho_s)^{n_2}$ (其中, E 、 σ 、 ρ 分别表示弹性模量、强度和密度; *表示多孔材料; s 表示致密材料; C_1 和 C_2 是常数, 与材料和实验参数有关; n_1 和 n_2 表示多孔结构指数), 理论分析表明, 多孔材料弹性模量和强度可通过调整孔隙率大范围调节, 这为多孔材料在生物医用材料领域应用提供了巨大潜力。研究表明^[7,8], 多孔钛合金可有效降低弹性模量, 并为新骨长入提供物理空间增强骨固定, 从而更具医用价值, 已受到学术界和临床医学高度重视。

多孔钛合金最基本的孔隙结构特征主要包括孔隙率、孔隙大小、孔隙形状三个方面。其中, 孔隙率能显著影响多孔材料力学性能。多孔材料的弹性模量不是一个材料常数, 它主要取决于多孔材料的孔结构。多孔材料孔结构随着孔棱和孔壁的弯曲、屈曲、拉伸、断裂而改变, 因此弹性模量将随着应

变的变化而变化。对于实际多孔钛及其合金, 多孔结构是不规则的, 然而弹性模量一般都表述为相对密度的函数, 而忽略了其他结构参数的影响。随着计算机技术的不断发展, 有限元模拟研究已成为材料研究的一个重要手段。因此, 本文通过 COMSOL 有限元模拟研究不同孔隙形状对多孔 TiNbZrTaSi 合金弹性模量的影响规律, 基于模拟结果, 为实验条件下多孔合金的制备提供设计依据。

一、模拟试验方法

为了更快更清晰的了解有限元模拟和不同几何结构对性能的影响规律, 在 COMSOL 软件中建立了不同的二维几何模型。本文所使用的二维模型为连续性结构模型和理想结构模型。在使用 COMSOL 软件建立模型中, 首先定义适合构建模型的坐标系, 本文中使用的是在构建二维固体材料模型中常用的边界坐标系。然后在几何模块中建立初步的几何模型 (图 1), 在 COMSOL 软件中已经支持如 Solidwoks, AutoCAD 等多种绘图软件, 可以直接导入几何模块中实现模型建立。在构建完几何模块后进行材料力学性能的定义, 并添加材料属性。在几何模型中, COMSOL 软件会自动进行域的划分, 通过对不同域的不同属性的定义实现模拟实验。本次试验中的 TiNbZrTaSi 合金部分如图 2 中蓝色部分所示。从某种意义上讲, 多孔材料可以看成是金属材料 and 气孔组成的复合物。这种结构的非均匀性导致了性能的非均匀性。由同种材料制备的多孔金属的性能主要取决于材料的孔隙率和孔结构, 因此可以通过改变材料的孔隙率和孔结构来设计所需的综合

性能。

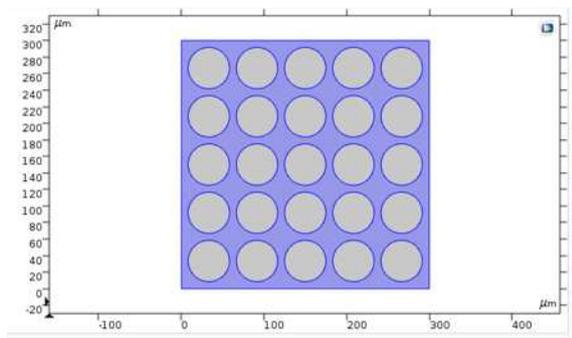
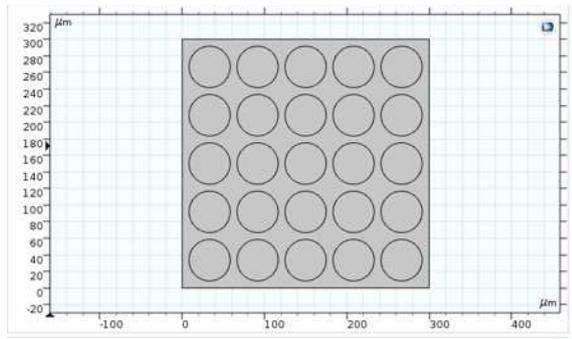


图1 几何模型图2 蓝色所示 TiNbZrTaSi 合金部分为研究多孔合金的弹性模量随孔隙结构的变化情况，需要构建适合的物理场进行耦合计算，本次实验考虑到多孔合金为具有压缩性的固体材料，故采用固体力学中的多孔弹性物理场进行研究，通过对其中孔隙边界的定义（图3）。边界载荷的方向与压力大小的定义如图4所示，模拟选择模型上表面作为压力载荷表面，选用模型下表面为固定支承方向。

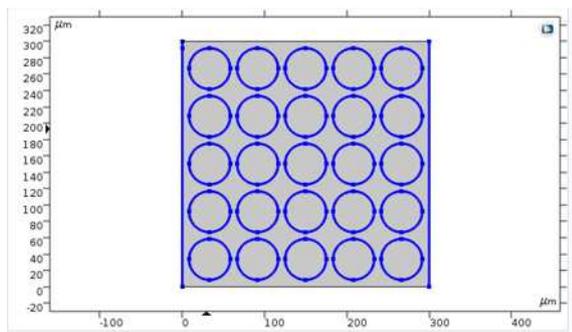


图3 多孔 TiNbZrTaSi 合金孔隙边界

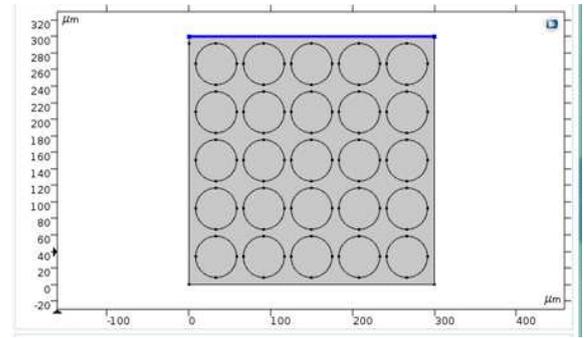


图4 边界载荷

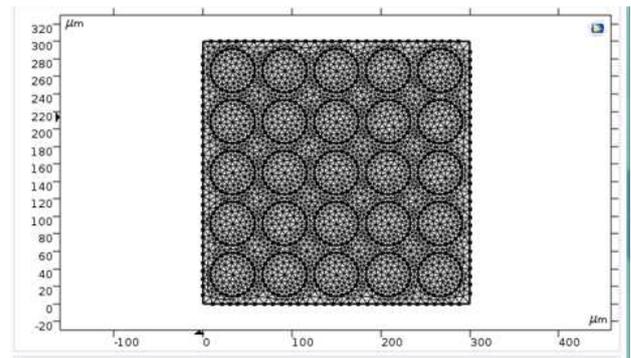


图5 划分网格

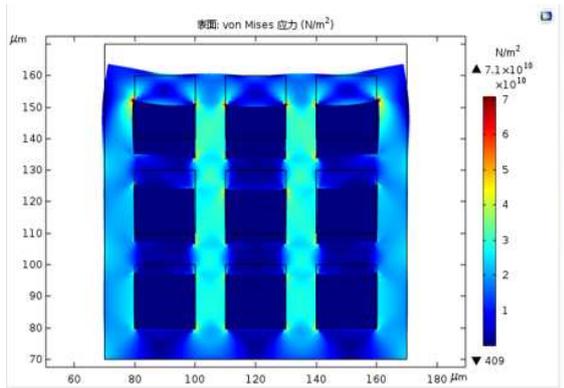
在完成各项物理量和域的定义后通过图5的构建网格方法完成模型的建立。通过此模型的建立可研究孔隙率、孔径大小和孔隙形状对多孔 TiNbZrTaSi 合金弹性模量影响。

二、结果与分析

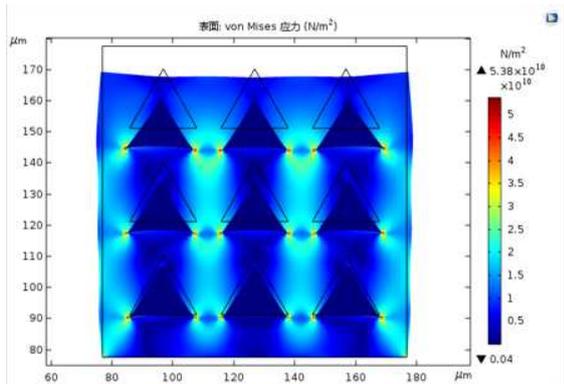
造孔剂形貌的选择对制备材料孔隙特征具有重要的影响，造孔剂的形貌几乎决定了材料孔洞的形貌。本文选取正六边形、正方形、圆形、三角形四种不同孔隙形状，孔隙率均为 50%。图6为多孔 TiNbZrTaSi 合金不同孔隙形状应力分布及压缩变形图，图中黑色轮廓表示材料压缩前的几何形状，彩色部分为材料压缩后 Von Mises 应力分布和材料变形后的形貌。从图中可以看出，最大应力分布在最近临孔洞之间。应力越集中越大的地方，材料变形也越明显。

图6(a)是正方形孔多孔合金压缩变形图。在正方形孔形貌的应力分布图中可以看出应力集中现象主要在顶点处，应力在各角顶点处较大，弹性模量也较大。图6(b)给出了正三角形孔合金压缩变形图。在三角形孔形貌的应力分布图中可以发现其应力集中现象最为明显，正三角形顶点处的应力值极大。图6(c)是正六边形孔多孔合金压缩变形图。在正六边形的应力分布中可以发现其在六边形顶点

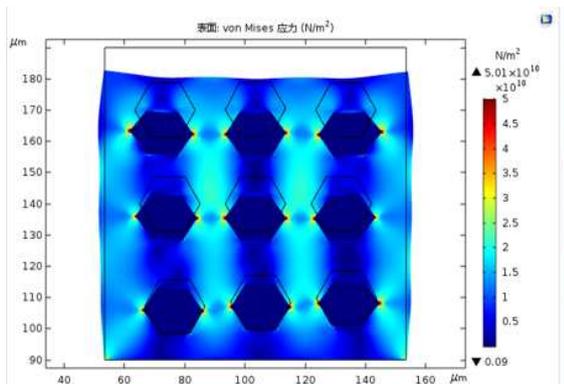
出的应力最大，而在直线部分则进行了较为均匀的分布，这种情况下如果作为医用植入材料植入人体则较易产生应力集中。图6(d)给出了圆形孔多孔合金压缩变形图。在圆形孔形貌分布中可以观察到此种孔形貌较正方形和正六边形的应力分布最为均匀，且其弹性模量也最小。



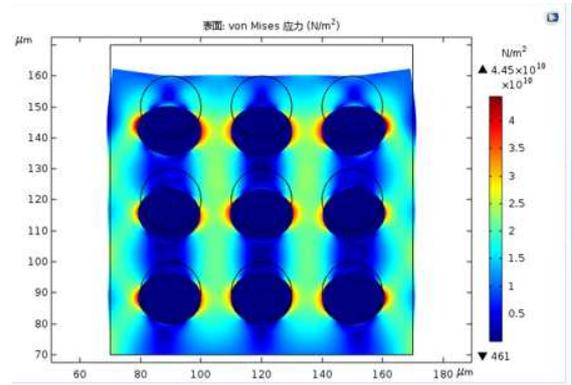
(a) 正方形孔



(b) 正三角形孔



(c) 正六边形孔



(d) 圆形孔

图6 不同孔隙形状多孔TiNbZrTaSi合金应力分布及压缩变形图

将模拟得到对应瞬时应力值和位移的数据导出，经公式($E = F / \delta h$ ，其中E为弹性模量，F为模型瞬时应力值， δ 为上下版瞬时位移值，l为模型长度，h为模型高度)计算得到不同孔径条件下的弹性模量值，如表1所示。将不同孔径大小的多孔TiNbZrTaSi合金弹性模量值带入到Origin软件中进行拟合计算，得到如图7所示的弹性模量变化曲线。

表1 不同孔隙形状多孔TiNbZrTaSi合金弹性模量

孔隙形状	正方形	正三角形	正六边形	圆形
弹性模量 (GPa)	35.1	30.4	24.1	15.6

从图6可以看出，应力分布较大的地方多为棱角部分，而在圆形孔中应力分布较为均匀，而模拟得出的弹性模量(图7)也证实这一点。孔形状对多孔合金的弹性模量有一定影响，当孔隙率一定时，在孔形状越接近圆形时，其弹性模量越小。模拟结果表明，在孔隙率一定时，孔形状的变化会影响多孔合金力学性能，这对造孔剂的选择具有一定意义，当造孔剂的形状越接近圆形时，越容易得到圆形孔，其制备出的多孔合金应力集中可大大改善，弹性模量较低，力学性能较优，更适用于生物医用材料。

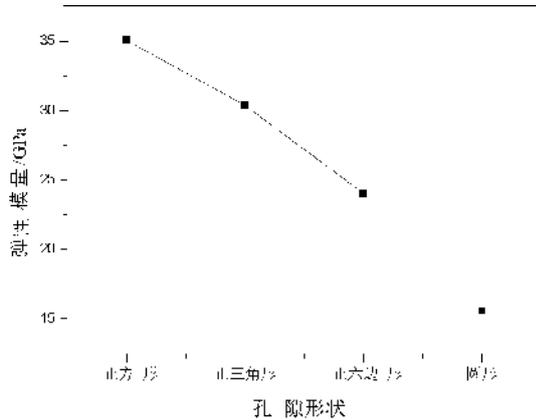


图 7 多孔 TiNbZrTaSi 合金弹性模量随孔隙形状变化曲线

三、结论

本文通过 COMSOL 软件模拟分析了不同孔隙形状对多孔 TiNbZrTaSi 合金弹性模量的影响。当孔隙率一定情况下，对正方形、正三角形、正六边形、圆形不同孔隙形状多孔合金模型进行了模拟分析，结果表明：当孔隙率不变时，圆形孔多孔合金的弹性模量值最小；孔形状越接近圆形时，弹性模量越小。这对多孔合金的制备具有一定的指导意义。

参考文献：

[1]Sebbag E, Felten R, Sagez F, et al. The world-wide burden of musculoskeletal diseases:a systematic analysis of the World Health Organization Burden of Diseases Database [J]. *Annals of the Rheumatic Diseases*, 2019, 78 (6) :844-848.

[2]许莹,王欢欢,王变. 医用多孔 β 钛合金的制备方法研究进展 [J]. *钛工业进展*, 2018, 35 (3) :1-5.

[3]于振涛,余森,程军,等. 新型医用钛合金材料的研发和应用现状 [J]. *金属学报*, 2017,53 (10) : 1238-1264.

[4]Chang B, Song W, Han T X, et al. Influence of pore size of porous titanium fabricated by vacuum diffusion bonding of titanium meshes on cell penetration and bone ingrowth. *ActaBiomaterialia*, 2016, 33: 311-321.

[5]周晓璐,李伟,张帅等. 生物医用多孔钛及钛合金制备技术的研究现状 [J]. *材料研究与应用*, 2015, 9 (1) :6-10.

[6]Gibson L J, Ashby M F. *Cellular Solids: Structure and Properties* [M]. UK: Cambridge University Press, 1997.

[7]孙允龙,康红磊,林珂升等. 基于选区激光熔融技术制备的多孔钛合金支架的力学性能及成骨能力评价 [J]. *生物骨科材料与临床研究*, 2019, 16(2) :1-5.

[8]汤慧萍,杨广宇,刘海彦等. 电子束选区熔化制备医用多孔钛合金研究 [J]. *稀有金属材料与工程*, 2014, 43 (S1) ,127-131.

作者简介：

姓名：李玉华 (1987-) 性别：女，博士，讲师，研究方向为多孔金属材料制备研究。

基金项目：陕西省教育厅科研计划项目 (18JK0525) ；中国博士后科学基金项目 (2018M643690) ；西安科技大学博士科研启动基金项目 (2016QDJ051) ；西安科技大学科研培育基金项目 (201740)