

UN MODELO MICROMECAÁNICO PARA LA PREDICCIÓN DEL MÓDULO DE ELASTICIDAD DE TITANIO POROSO PARA IMPLANTES BIOMÉDICOS

A MICROMECHANICS-BASED MODEL TO PREDICT THE ELASTIC MODULUS OF POROUS TITANIUM FOR BIOMEDICAL IMPLANTS

Néstor D. Barulich^{a,b}, Adrian D. Boccardo^{a,b}, Santiago Cantero^c, César A. Roure^c,
Roberto O. Lucci^c

^aGrupo de Investigación y Desarrollo en Mecánica Aplicada, GIDMA, Facultad Regional Córdoba, Universidad Tecnológica Nacional. Maestro M. Lopez esq. Cruz Roja Argentina, Córdoba, Argentina. nbarulich@frc.utn.edu.ar, aboccardo@frc.utn.edu.ar, <http://www.frc.utn.edu.ar>

^bInstituto de Estudios Avanzados en Ingeniería y Tecnología, IDIT, CONICET-Universidad Nacional de Córdoba, Av. Vélez Sársfield 1611, Córdoba, Argentina <http://www.inv.idit.efn.uncor.edu>

^cDepartamento de Ingeniería Metalúrgica, Facultad Regional Córdoba, Universidad Tecnológica Nacional. Maestro M. Lopez esq. Cruz Roja Argentina, Córdoba, Argentina. santiagomcantero@hotmail.com, cesararoure@hotmail.com.ar, robertolucci1984@gmail.com, <http://www.frc.utn.edu.ar>

Palabras clave: Implante Biomédico, Micromecánica Computacional, Titanio Poroso, Módulo de Young.

Resumen. Las prótesis empleadas para reemplazar tejidos duros deben tener propiedades elásticas similares a la de los huesos para prevenir la reabsorción del hueso y eventual desprendimiento del implante. Por tal razón, en el diseño de implantes es ventajoso usar modelos que permitan predecir las propiedades elásticas del material utilizado. En este trabajo se presenta un modelo numérico basado en la micromecánica computacional para predecir el módulo de Young de titanio poroso que constituye uno de los materiales más apropiados para el reemplazo de huesos. La microestructura del material se modela con celdas unitarias y celdas multipartículas, y los resultados obtenidos son comparados entre sí. El modelo analítico Gibson-Ashby es ajustado con los resultados obtenidos de dos representaciones de poros, las cuales predicen correctamente las mediciones experimentales. El modelo analítico permite predecir el módulo de Young para distintas características de la porosidad.

Keywords: Biomedical Implant, Computational Micromechanics, Porous Titanium, Young Modulus.

Abstract. Prosthesis employs for hard tissue replacements need elastic properties similar to bones, avoiding in this way bone resorption and eventual implant loosening. For this reason, in the implant design it is an advantage the employment of models that allow predicting the elastic properties of the used material. This work presents a numerical model based on computational micromechanics to predict the Young modulus of porous titanium that is one of the most appropriate materials for bones replacements. The microstructure is modeled by both unit and multiparticle cells, and the obtained results are compared each other. The Gibson-Ashby analytical model is fitted with the results obtained with two pore representations, which predict properly the experimental measurements. The analytical model allows to predict the Young modulus for different porosity features.

1 INTRODUCCIÓN

Tradicionalmente, el acero inoxidable y las aleaciones base cobalto se utilizan en el campo biomédico para sustituciones de tejidos duros que han sufrido daño. Sin embargo el módulo de Young (o módulo de elasticidad longitudinal) de estos materiales (200 GPa a 240 GPa) es mucho mayor que el del hueso (10 GPa a 30 GPa), ocasionando que las tensiones que se generan en el hueso, en las inmediaciones con la prótesis, sean menores a las que originalmente se generaban en él (Huiskes et al., 1992), siendo conocido este fenómeno como stress-shielding. Bajo estas condiciones se produce la disminución de la densidad de hueso y el aflojamiento del implante, obligando al retiro y reemplazo de la prótesis con los riesgos que eso implica. El titanio y sus aleaciones presentan excelente resistencia a la corrosión y biocompatibilidad. Además, ellos tienen un módulo de elasticidad más bajo que los materiales mencionados anteriormente (110 GPa) que permite reducir la diferencia entre los módulos de elasticidad del hueso y del implante, ayudando así a mitigar el stress-shielding (Yan et al., 2011). Para disminuir aún más la rigidez del implante, se utiliza titanio poroso que puede tener un valor de módulo de Young similar a los del hueso. Además, la estructura porosa de este material imita la arquitectura porosa de hueso, lo que contribuye a la oseointegración (crecimiento de células óseas y vascularización dentro de los espacios porosos). Estas estructuras porosas generalmente se obtienen mediante procesos pulvimetalúrgicos (Jakubowicz et al., 2013; Dizlek et al., 2009).

Las propiedades mecánicas del titanio poroso dependen de las características de su microestructura, tales como la fracción volumétrica de matriz metálica (o de la fracción volumétrica de poros), la distribución de poros, la presencia de microporosidades en la matriz debido a una sinterización incompleta (Chen et al., 2017; Wang et al., 2015). El módulo de elasticidad longitudinal de estos materiales depende en gran medida de la fracción volumétrica de poros, disminuyendo su valor al aumentar dicha fracción. Para obtener materiales porosos con valores de módulo de Young similares al del hueso, es necesario determinar las características que debe tener la microestructura. Para ello, es vital conocer la relación que existe entre dicho módulo y dichas características.

El módulo de elasticidad longitudinal de titanio poroso puede determinarse a través de ensayos experimentales o de modelos analíticos o numéricos.

Li et al. (2004) determinaron el módulo de elasticidad longitudinal de titanio poroso sin crecimiento interno de hueso y con crecimiento interno total y parcial, empleando un modelo micromecánico resuelto numéricamente por el método de los elementos finitos. La microestructura es modelada en dos dimensiones y se consideran poros de distintas formas (circulares y elípticos) y tamaños, los cuales se distribuyen dentro de la microestructura de forma regular o aleatoria. El crecimiento parcial de hueso dentro del material poroso se modela reemplazando los poros ubicados en los bordes de la microestructura por inclusiones de hueso. Se considera que no puede ocurrir despegue entre la matriz y el hueso. Las condiciones de bordes aplicadas en la microescala son desplazamientos especificados. El estudio se realizó para una fracción volumétrica de poro de 0,56. Los resultados indican que la presencia de hueso dentro de los poros rigidizan el material, aumentando el módulo de Young con el incremento de la fracción volumétrica de poros que contienen hueso en su interior. Por otro lado, la rigidez del material disminuye cuando la forma y el tamaño de los poros y su disposición dentro de la matriz son definidas aleatoriamente.

Soro et al. (2018) predijeron el módulo de Young de titanio poroso mediante un modelo micromecánico que también es resuelto por el método de los elementos finitos. La microestructura es modelada en tres dimensiones y está formada por una matriz metálica y

poros representados por esferas o esferoides. Se estudiaron dos tipos de microestructuras, una con distribución aleatoria de esferas y otra con distribución aleatoria de esferoides. Se aplicaron condiciones de borde periódicas en la microescala. Se analizó la influencia de la fracción volumétrica de poros (se varió desde 0,19 hasta 0,43) y de la geometría de los poros. El material más rígido se obtuvo con la microestructura que contiene poros esféricos.

Muñoz et al. (2018) determinaron el módulo de elasticidad longitudinal de titanio poroso empleado un modelo micromecánico resuelto por el método de los elementos finitos. La microestructura del material es modelada en dos dimensiones y está formada por una matriz metálica y poros de distintos tamaños y geometrías. Se analizaron tres tipos de microestructuras: distribución regular de poros esféricos, distribución regular de poros con distintas formas y tamaños y distribución aleatoria de poros con distintas formas y tamaños. Se utilizaron desplazamientos especificados como condiciones de borde. El módulo de elasticidad longitudinal se determinó para valores de fracción volumétrica de poros que varían entre 0,28 y 0,66. Con la microestructura que contiene una distribución regular de poros esféricos se obtuvo el material más rígido y con la que contiene una distribución aleatoria de poros con distintas formas y tamaños se obtuvo el material menos rígido.

En este trabajo se calcula el módulo de Young de titanio poroso por medio de la micromecánica computacional. Distintos modelos numéricos representan a la microestructura del material en dos y tres dimensiones, teniendo en cuenta además distintas distribuciones de poros. Luego, se ajustan los parámetros del modelo analítico Gibson-Ashby para predecir el módulo de elasticidad longitudinal utilizando los resultados de los modelos computacionales que representan los resultados experimentales con mayor precisión. Este modelo simplificado permite determinar el valor del módulo de Young sin la necesidad de utilizar modelos micromecánicos más detallados como los computacionales.

2 MODELO MICROMECAÍNICO

Se utilizaron modelos micromecánicos computacionales bidimensionales y tridimensionales para representar los poros como huecos cilíndricos y esféricos, respectivamente. Estos modelos constan de una escala microscópica y otra macroscópica, y se diferencian entre sí por el dominio de la escala microscópica, tal como se verá más adelante. Las escalas se vincularon mediante condiciones de borde periódicas (Nguyen et al., 2012) y el principio de Hill-Mandel (de Souza Neto y Feijóo, 2008).

2.1 Escala microscópica

En la escala microscópica se representan la matriz y los poros. Los dominios utilizados en este trabajo se muestran en las Figuras 1 a 3. Estos dominios permiten evaluar la influencia de la posición relativa de poros, la fracción volumétrica de los mismos y la influencia de considerar a los poros como huecos cilíndricos o esféricos. La presencia de microporosidades en la matriz de titanio, que es formada por poros de pequeñas dimensiones (con diámetro circunscripto menor a 10 μm), es modelada modificando sus propiedades mecánicas.

La celda unitaria bidimensional de la Figura 1 puede representar una distribución regular cuadrada de poros con $\theta = 90^\circ$ (2DCUC) y una distribución regular hexagonal con $\theta = 60^\circ$ (2DCUH). El dominio en dos dimensiones con distribución aleatoria de poros dentro de la matriz (2DMPA), Figura 3, considera que todos los poros son de igual tamaño y que estos no pueden estar solapados entre sí. La microestructura es periódica, por lo tanto los poros que son cortados por los bordes de la celda (poros rojos) tienen sus poros correspondientes según los vectores de periodicidad (poros verdes).

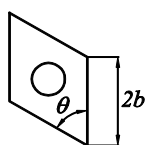


Figura 1: Celdas unitaria bidimensional.

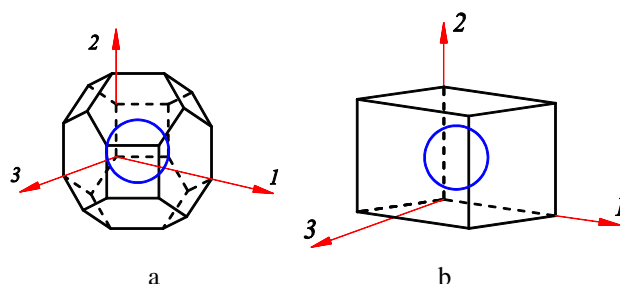


Figura 2: Celdas unitarias tridimensionales para ordenamiento de poro cúbico centrado en el cuerpo: a) octaedro truncado (3DCUOT) y b) cubo (3DCUC).

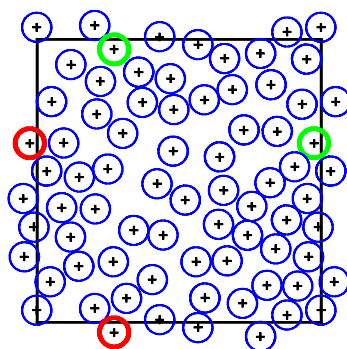


Figura 3: Celda multipartícula bidimensional para ordenamiento aleatorio de poros.

Se emplearon condiciones de borde periódicas implementadas en un modelo de elementos finitos basado en desplazamientos a través de las siguientes relaciones:

$$u_i^+ - u_i^- - \frac{1}{\alpha_u} w_i^1 P_{vx} - \frac{1}{\alpha_u} w_i^2 P_{vy} - \frac{1}{\alpha_u} w_i^3 P_{vz} = 0 \quad (1)$$

donde u_i^+ y u_i^- son los desplazamientos en la dirección i de los puntos correspondientes del borde del dominio, w_i^j son los desplazamientos en la dirección i de los nodos de control j , el factor α_u tiene unidades de longitud y se incluye para homogeneizar unidades, mientras que los vectores de periodicidad \mathbf{P}_v están definidos por la diferencia de coordenadas de los puntos correspondientes que están siendo restringidos:

$$\mathbf{P}_v = \mathbf{X}^+ - \mathbf{X}^- \quad (2)$$

Las ecuaciones de restricción son implementadas mediante condensación estática. Los desplazamientos de los nodos de control son especificados de la siguiente forma:

$$w_i^j = \alpha_u \varepsilon_{ij} \quad (3)$$

donde ε_{ij} son las componentes del tensor de deformación infinitesimal macroscópico. Las

reacciones en los nodos de control se utilizan para calcular las tensiones macroscópicas como se describe a continuación.

2.2 Escala macroscópica

El modelo de la escala macroscópica contiene la ecuación constitutiva cuyo tensor constitutivo se desea conocer. En este trabajo, la ecuación constitutiva es la de un material elástico isótropo y la característica de interés es el módulo de Young.

Las tensiones normales de Cauchy σ_{ii} se calculan con la siguiente ecuación obtenida a partir del principio de Hill-Mandel (Li y Wongsto, 2004; Barulich et al., 2016):

$$\sigma_{ii} = \frac{\alpha_u R_{ii}}{V} \quad (4)$$

donde R_{ii} son las fuerzas en la dirección i en el nodo de control i y V es el volumen del dominio. Dicha fuerza puede ser obtenida mediante el modelo de elementos finitos o puede ser especificada.

El valor del módulo de elasticidad longitudinal se obtiene relacionando la tensión obtenida mediante la ecuación (4) y la deformación macroscópica aplicada mediante las condiciones de contorno periódicas.

3 RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Los modelos micromecánicos descriptos anteriormente se utilizaron para analizar la variación del valor del módulo de elasticidad longitudinal de titanio poroso con la fracción volumétrica de poros (fp) y la distribución de poros. A dichos modelos se les aplicó un estado de deformación correspondiente a un estado uniaxial de tensión permitiendo obtener el módulo de Young efectivo (E) a partir de un único caso de deformación.

Para el modelo de celda multipartícula con distribución aleatoria de poros, el módulo de Young representativo del material se calculó mediante el promedio de los resultados obtenidos con un grupo de realizaciones. En la Figura 4 se presenta E/Em en función del número de poros dentro del dominio microscópico para una fracción volumétrica de poros fp = 0,5, siendo el módulo de elasticidad y el coeficiente de Poisson de la matriz Em = 104 GPa y vm = 0,34, respectivamente (Park y Bronzino, 2002). Puede considerarse como valor representativo del módulo E al calculado a partir de 15 realizaciones de una microestructura con 30 poros ya que no presenta una diferencia significativa con el calculado con 20 poros.

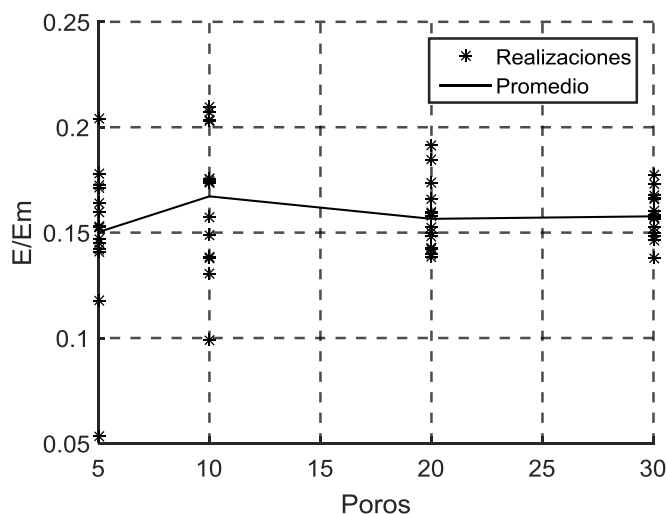


Figura 4: E/Em calculado con el modelo 2DMPA para $f_p=0,5$ y distintos números de poros distribuidos aleatoriamente dentro de la microestructura.

En la [Figura 5](#) se presenta E/Em calculado con los modelos micromecánicos para valores de fracción volumétrica de poros que varían entre 0,05 y 0,5, considerando una matriz formada por titanio puro sin microporosidades ($E_m = 104$ GPa y $\nu_m = 0,34$ ([Park y Bronzino, 2002](#))). Para aquellos modelos en los que los valores del módulo de elasticidad longitudinal varían en las diferentes direcciones, se obtuvo una diferencia máxima entre ellos menor a 1,5 %. Por tal motivo, se optó por utilizar el valor promedio. Se observa que, para todos los casos estudiados, a medida que la fracción volumétrica de poros aumenta el material se vuelve menos rígido. Para pequeños valores de fracción volumétrica de poros los resultados obtenidos con los distintos modelos no presentan grandes diferencias, pero sí lo hacen para valores mayores de fracción. Los modelos en dos dimensiones predicen un comportamiento menos rígido del material en comparación con los modelos en tres dimensiones. Por otro lado, se observa que los modelos bidimensionales son sensibles a las distribuciones de poros, siendo de las tres distribuciones analizadas la aleatoria con la que se obtiene el material menos rígido y la cuadrada el más rígido, siendo este comportamiento similar al reportado por [Li et al. \(2004\)](#) y [Muñoz et al. \(2018\)](#).

Para analizar el rol que desempeña la microporosidad formada dentro de la matriz, se le asigna al titanio las propiedades mecánicas utilizadas por [Soro et al. \(2018\)](#), siendo $E_m = 91$ GPa y $\nu_m = 0,33$. En la [Figura 5](#) se observa que el valor de E/Em no varía significativamente cuando existe microporosidades. A pesar de ello, el valor del módulo de Young depende de la microporosidad.

Los resultados obtenidos con los modelos 2DMPA y 2DCUH permiten predecir con buena aproximación los módulos de elasticidad longitudinal medidos experimentalmente, como se verá más adelante. A los fines de obtener ecuaciones sencillas que permitan calcular el módulo de Young de titanio poroso para distintos valores de fracción volumétrica de poros, el modelo de Gibson y Ashby ([Gibson y Ashby, 1997](#)) es ajustado con los resultados obtenidos con estos dos modelos computacionales:

$$\frac{E}{E_m} = c (1 - f_p)^n \quad (5)$$

donde c y n son coeficientes a determinar.

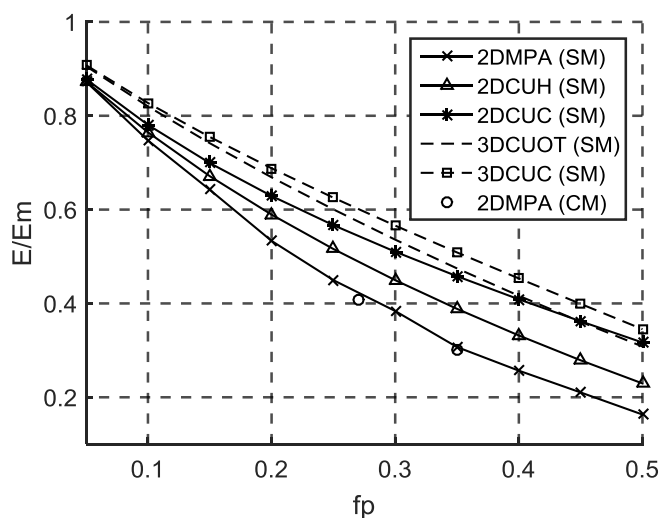


Figura 5: E/E_m calculado con los modelos micromecánicos para una matriz con (CM) y sin microporosidades (SM).

Utilizando el método de mínimos cuadrados, los valores de los coeficientes para 2DMPA son $c = 0,9967$ GPa y $n = 2,722$ y para 2DCUH son $c = 0,9552$ GPa y $n = 2,092$. En la [Figura 6](#) se observa que los valores de E/E_m obtenidos con los modelos numéricos son correctamente ajustados con el modelo Gibson-Ashby.

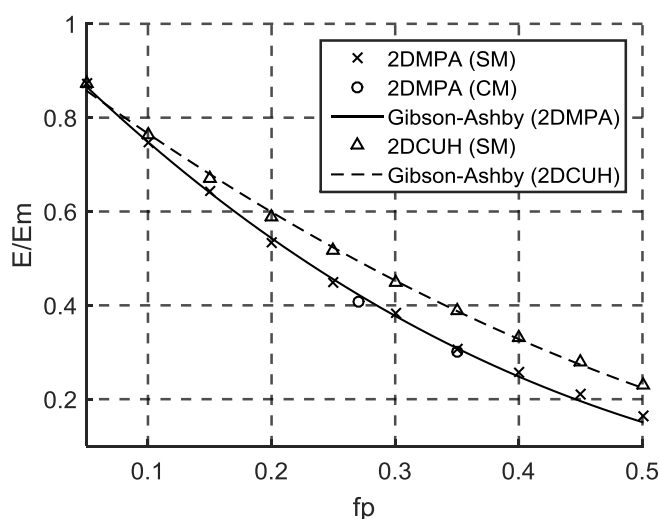


Figura 6: E/E_m calculado con los modelos 2DMPA, 2DCUH y Gibson-Ashby considerando una matriz metálica con (CM) y sin microporosidades (SM).

Finalmente, el valor del módulo de Young calculado con el modelo Gibson-Ashby es comparado con las mediciones experimentales presentadas por [Wang et al. \(2015\)](#), [Chen et al. \(2017\)](#), [Muñoz et al. \(2018\)](#) y [Soro et al. \(2018\)](#). En la [Figura 7](#) se observa que las predicciones obtenidas con el modelo, considerando una matriz de titanio con microporosidades ($E_m = 91$ GPa), están en correspondencia con los resultados experimentales.

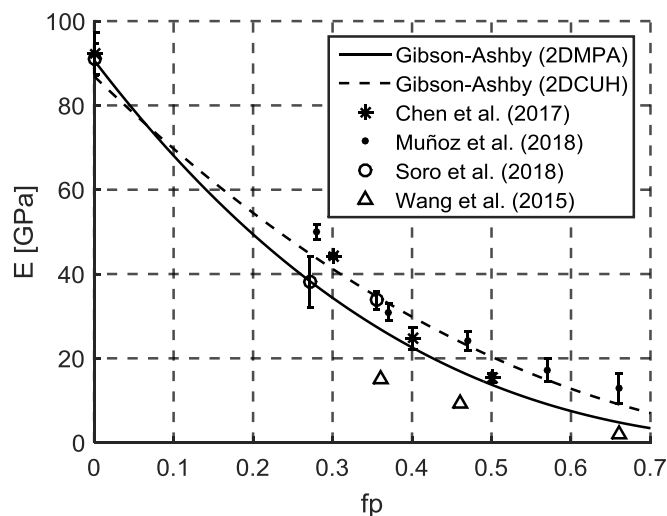


Figura 7: Comparación entre el módulo de elasticidad predicho con el modelo Gibson-Ashby y el medido experimentalmente.

4 CONCLUSIONES

En este trabajo se determinó el módulo de Young de titanio poroso empleando modelos computacionales. En el estudio realizado se tuvo en cuenta la fracción volumétrica de poros y la distribución de los mismos dentro la microestructura. Luego, el modelo de Gibson-Ashby se ajustó con los resultados obtenidos con los modelos numéricos de celda multipartícula bidimensional con distribución de poros aleatoria y de celda unitaria bidimensional con distribución hexagonal.

Las principales conclusiones a las que se arribaron son:

- Los resultados numéricos del módulo de Young de titanio poroso varían principalmente con la fracción volumétrica de poros, disminuyendo la rigidez del material a medida que aumenta dicha fracción, como se esperaba. Esta observación está en concordancia con los resultados publicados por otros autores.
- Los modelos numéricos en tres dimensiones predicen un material más rígido que los modelos en dos dimensiones, acentuándose la diferencia para elevados valores de fracción volumétrica de poros.
- Los modelos numéricos en dos dimensiones son sensibles a la distribución de poros dentro de la microestructura, especialmente para valores elevados de fracción volumétrica de poros. El material menos rígido se obtuvo considerando una distribución aleatoria de poros y el más rígido una distribución cuadrada.
- La presencia de microporosidades dentro de la matriz metálica no varió el comportamiento del módulo de Young normalizado respecto al módulo de la matriz, pero sí redujo el valor del módulo de elasticidad longitudinal del material poroso.
- El modelo Gibson-Ashby predice correctamente los resultados numéricos para distintos valores de fracción volumétrica de poros. Además, este modelo predice correctamente los valores del módulo de Young medidos experimentalmente, pudiendo ser utilizado por investigadores que no están familiarizados con modelos micromecánicos más detallados como los modelos computacionales.

REFERENCIAS

- Barulich, N. D., Godoy, L. A., y Dardati, P. M., Evaluation of stresses at the macro level based on computational micromechanics under finite strains. *Mechanics of Materials*, 101:93-101, 2016.
- Chen, Y., Frith, J.E., Dehghan-Manshadi, A., Attar, H., Kent, D., Soro, N.D.M., Bermingham M.J., and Dargusch, M.S, Mechanical properties and biocompatibility of porous titanium scaffolds for bone tissue engineering. *Journal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials*, 75:169-174, 2017.
- de Souza Neto, E. A., y Feijóo, R. A., On the equivalence between spatial and material volume averaging of stress in large strain multi-scale solid constitutive models. *Mechanics of Materials*, 40:803-811, 2008.
- Dizlek, M., Guden, M., Turkan, U., and Tasdemirci, A, Processing and compression testing of Ti6Al4V foams for biomedical applications. *Journal of Materials Science*, 44: 1512-1519, 2009.
- Gibson, L.G., and Ashby, M.F., *Cellular Solids: Structure and properties*. Cambridge University Press, 1997.
- Huiskes, R., Weinans, H., and van Rietbergen, B., The relationship between stress shielding and bone resorption around total hip stems and the effects of the flexible materials. *Clinical Orthopaedics and Related Research*, 274:124-134, 1992.
- Jakubowicz, J., Adamek, G., and Dewidar, M., Titanium foam made with saccharose as a space holder. *Journal of Porous Materials*, 20:1137-1141, 2013.
- Li, H., Oppenheimer, S.M., Stupp, S.I., Dunand, D.C., and Brinson, L.C., Effects of pore morphology and bone ingrowth on mechanical properties of microporous titanium as an orthopaedic implant material. *Materials Transactions*, 45:1124-1131, 2004.
- Li, S., y Wongsto, A., Unit cells for micromechanical analyses of particle-reinforced composites. *Mechanics of Materials*, 36:543-572, 2004.
- Muñoz, S., Castillo, S.M., and Torres, Y., Different models for simulation of mechanical behaviour of porous materials. *Journal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials*, 80:88-96, 2018.
- Nguyen, V. D., Béchet, E., Geuzaine, C., y Noels, L., Imposing periodic boundary condition on arbitrary meshes by polynomial interpolation. *Computational Materials Science*, 55:390-406, 2012.
- Park, J.B., Bronzino, J.D., *Biomaterials: Principles and applications*, CRC Press, 2002.
- Soro, N., Brassart, L., Chen, Y., Veidt, M., Attar, H., and Dargusch, M.S., Finite element analysis of porous commercially pure titanium for biomedical implant application. *Materials Science and Engineering A*, 725:43-50, 2018.
- Wang, X.-H., Li, J.-S., Hu, R., and Kou, H.-C. Mechanical properties and pore structure deformation behaviour of biomedical porous titanium. *Transactions of Nonferrous Metals Society of China*, 25:1543-1550, 2015.
- Yan, W., Berthe, J., and Wen, C., Numerical investigation of the effect of porous titanium femoral prosthesis on bone remodeling. *Materials and Design*, 32:1776-1782, 2011.