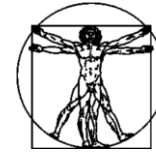


DOI: 10.15593/RZhBiomech/2018.4.09
УДК 611/531



**Российский
Журнал
Биомеханики**
www.biomech.ru

КОЭФФИЦИЕНТ ПУАССОНА ДЕНТИНА КАК АНИЗОТРОПНОЙ СРЕДЫ С ГЕКСАГОНАЛЬНОЙ СИММЕТРИЕЙ

**С.А. Муслов¹, Д.С. Лисовенко³, А.С. Арутюнов⁴, А.А. Пивоваров², А.И. Манин²,
Л.Г. Киракосян², Я.Н. Харах², С.Д. Арутюнов²**

¹ Кафедра нормальной физиологии и медицинской физики, Московский государственный медико-стоматологический университет им. А.И. Евдокимова Минздрава РФ, Россия, 127473, Москва, ул. Делегатская, 20/1, e-mail: muslov@mail.ru

² Кафедра пропедевтики стоматологических заболеваний, Московский государственный медико-стоматологический университет им. А.И. Евдокимова Минздрава РФ, Россия, 127473, Москва, ул. Делегатская, 20/1, e-mail: y.kharakh@gmail.com

³ Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского Российской академии наук, Россия, 119526, Москва, просп. Вернадского, 101-1

⁴ Центральный научно-исследовательский институт стоматологии и челюстно-лицевой хирургии Министерства здравоохранения РФ, Россия, 119991, Москва, ул. Тимура Фрунзе, 16, e-mail: as.arutyunov@rambler.ru

Аннотация. Коэффициент Пуассона (коэффициент поперечной деформации) играет важную роль в деформационном поведении материалов. Наравне с модулем Юнга он составляет две независимые и наиболее информативные материальные константы твердых тел. Для твердых тканей зуба (эмали и дентина) коэффициент Пуассона должен соответствовать коэффициенту Пуассона реставрационных материалов во избежание перенапряжений на границе разделов реставрационный материал – эмаль и реставрационный материал – дентин. Кроме того, величина коэффициента Пуассона влияет на деформационную прочность эмали и дентина, а именно трещиностойкость при возникновении в них напряженно-деформированного состояния. В данной работе впервые получена ориентационная зависимость коэффициента Пуассона дентина зубов на основе матриц упругих постоянных и коэффициентов податливости гексагональных кристаллов, какими являются кристаллы гидроксиапатита дентина. Результаты вычисления коэффициентов Пуассона дентина как кристаллической системы с гексагональной структурой представлены в виде таблиц и на диаграммах в полярной и декартовой системах координат. Также рассчитаны экстремальные (минимальный и максимальный) коэффициенты для соответствующих направлений продольной и поперечной деформаций в кристаллографической системе координат. Показано, что максимальное значение коэффициента Пуассона дентина (0,53) больше верхнего предела для коэффициента Пуассона изотропных материалов, в том числе известных реставрационных материалов, что в ряде случаев может снижать качество реставраций в микрообъемах. Отмечается, что аналогичный анализ может быть выполнен и для эмали зубов.

Ключевые слова: дентин, коэффициент Пуассона, кристаллы гидроксиапатита.

© Муслов С.А., Лисовенко Д.С., Арутюнов А.С., Пивоваров А.А., Манин А.И., Киракосян Л.Г., Харах Я.Н., Арутюнов С.Д., 2018

Муслов Сергей Александрович, д.б.н., профессор, Москва

Лисовенко Дмитрий Сергеевич, к.ф.-м.н., зав. лабораторией, Москва

Арутюнов Анатолий Сергеевич, д.м.н., доцент, Москва

Пивоваров Антон Александрович, к.м.н., доцент, Москва

Манин Александр Игоревич, к.м.н., доцент, Москва

Киракосян Левон Гамлетович, ассистент, Москва

Харах Ясер Насерович, ассистент, Москва

Арутюнов Сергей Дарчоевич, д.м.н., профессор, Москва

ВВЕДЕНИЕ

Упругие свойства твердых тканей зуба и гидроксиапатита как минеральной их составляющей достаточно часто вызывают интерес у исследователей [4–7, 12–17]. Однако остаются актуальными и до конца не изученными некоторые аспекты этой тематики, в частности величина коэффициента Пуассона поперечной деформации эмали и дентина как анизотропных сред с гексагональной симметрией. Этот вопрос особенно интересен с позиций прочностных свойств тканей зуба, представляющих в контексте теории разрушения микронеоднородную среду со сложным характером напряженно-деформированного состояния в микрообъемах. Анизотропия и неоднородность твердых тканей зуба сред повышают степень концентрации микронапряжений, ответственных за возникновение микротрещин Гриффитса и пластических деформаций, в зависимости от степени анизотропии и неоднородности. В данном сообщении авторы представляют достаточно подробное исследование величины коэффициента Пуассона дентина как анизотропной среды гексагональной сингонии – три элементарных ячейки образуют правильную призму на шестигранном основании. В связи с тем что в литературе до сих пор не сложились единые обозначения и расчетные формулы для определения упругих характеристик анизотропных сред, данное исследование проведено на основании двух различных методик расчета [2, 16].

РАСЧЕТЫ И РЕЗУЛЬТАТЫ

1. Коэффициент Пуассона (коэффициент поперечной деформации) μ является весьма информативной характеристикой при анализе деформационного поведения твердых тел. Для реально упругих тел, увеличивающих свой объем при растяжении и уменьшающих при сжатии, величина μ может лежать только в пределах от 0 до 0,5 [1]. Практически для большинства материалов коэффициент Пуассона находится еще в более узком интервале: от 0,2 до 0,4 [3]. Однако, по современным представлениям, диапазон возможных значений коэффициента Пуассона существенно расширен за оба предела: может быть отрицательным $\mu < 0$ (ауксетики) и больше 0,5. Известно, что коэффициент Пуассона характеризует отношение поперечной деформации к продольной и является одной из упругих констант материала. Для дентина коэффициент, по литературным данным, лежит в интервале 0,29–0,33 [9]. По результатам ультразвуковых измерений [15] он равен 0,32.

2. Считается, что дентин представляет собой биоккомпозит и состоит приблизительно на 45–70% из неорганического материала в форме кристаллов гидроксиапатита [10, 14]. Кристаллы гидроксиапатита расположены между коллагеновыми волокнами и по классу симметрии относятся к гексагональной сингонии. Поэтому есть все основания рассматривать дентин как анизотропную среду, а это значит, что его упругие свойства описываются матрицей упругих постоянных c_{ij} или коэффициентов податливости s_{ij} . Коэффициенты Пуассона такой среды в

генерализованной общей форме могут быть определены как $\mu_{kl} = -\frac{\varepsilon_{ll}}{\varepsilon_{kk}}$, где

ε_{kl} – компоненты тензора деформации. В результате гексагональные системы и дентин тоже описываются не одним, а двумя коэффициентами Пуассона μ'_{31} и μ'_{32} [16]. Штрихи показывают, что данные компоненты μ отнесены не к кристаллографической, а к специальной (лабораторной) системе координат, связанной с зубом с помощью углов Эйлера и отличной, вообще говоря, от кристаллографической. По литературным

данным, значения упругих постоянных дентина достаточно хорошо известны [12, 13], поэтому, зная их, можно вычислить коэффициенты податливости и Пуассона дентина по формулам [8, 16] для гексагональных кристаллов:

$$c_{11} + c_{12} = s_{33} / s, \quad c_{11} - c_{12} = 1 / (s_{11} - s_{12}), \quad c_{13} = -s_{13} / s,$$

$$c_{33} = (s_{11} + s_{12}) / s, \quad c_{44} = 1 / s_{44}, \quad c_{66} = 1 / s_{66}, \quad s = s_{33}(s_{11} + s_{12}) - 2s_{13}^2,$$

$$\mu'_{31} = -[\sin^2 \psi \sin^2 \theta \cos^2 \theta (s_{11} + s_{33} - s_{44}) +$$

$$+(\cos^2 \theta - \sin^2 \theta \cos 2\theta \sin^2 \psi) s_{13} + \sin^2 \theta \cos^2 \psi s_{12}] / s'_{33}$$

и

$$\mu'_{32} = -[\cos^2 \psi \sin^2 \theta \cos^2 \theta (s_{11} + s_{33} - s_{44}) +$$

$$+(\cos^2 \theta - \sin^2 \theta \cos 2\theta \cos^2 \psi) s_{13} + \sin^2 \theta \sin^2 \psi s_{12}] / s'_{33},$$

где $s'_{33} = \cos^4 \theta s_{33} + \sin^2 \theta \cos^2 \theta (2s_{13} + s_{44}) + \sin^4 \theta s_{11}$, θ и ψ – углы Эйлера (описывающие поворот абсолютно твердого тела в трехмерном евклидовом пространстве).

Значения упругих постоянных c_{ij} , ГПа: $c_{11} = 37$; $c_{12} = 16,6$; $c_{13} = 8,7$; $c_{33} = 39$; $c_{44} = 5,7$.

Значения коэффициентов податливостей дентина s_{ij} , ГПа⁻¹: $s_{11} = 0,0346$; $s_{12} = -0,0145$; $s_{13} = -0,0045$; $s_{33} = 0,0276$; $s_{44} = 0,1754$.

Результаты вычисления коэффициентов Пуассона дентина как кристаллической системы с гексагональной структурой представлены на рис. 2 (в полярных координатах (а) и в декартовых координатах (б)). Вследствие симметрии и для простоты изложения графики приведены только для μ'_{31} .

Из рис. 2 отчетливо следует выраженное анизотропное поведение коэффициента Пуассона кристаллов дентина. Его значения в зависимости от направления в пространстве изменяются в весьма широких пределах (в 4 с лишним раза).

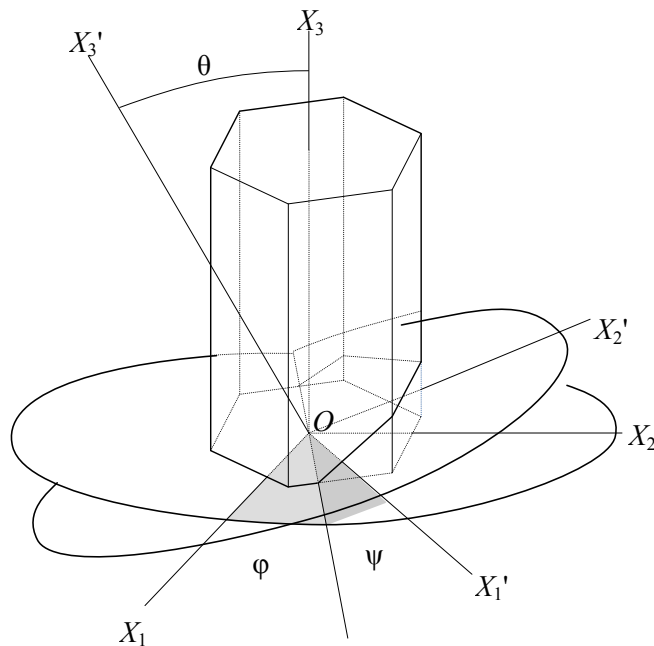
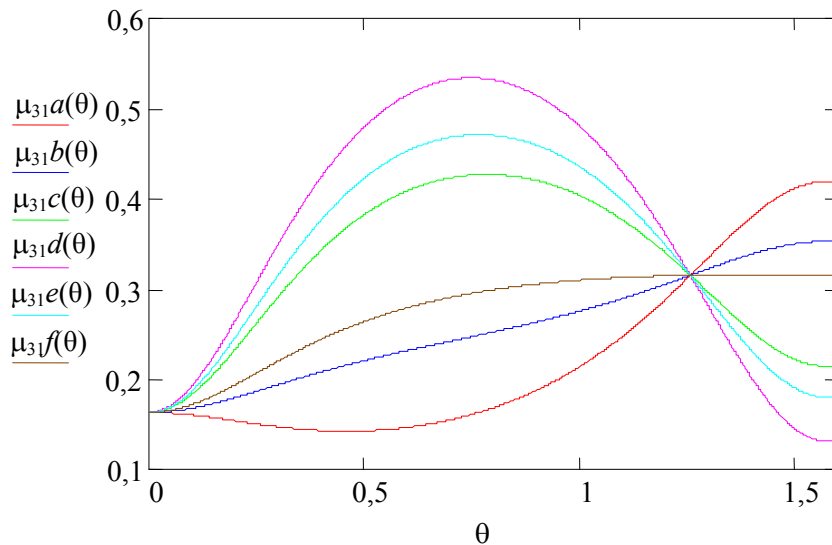
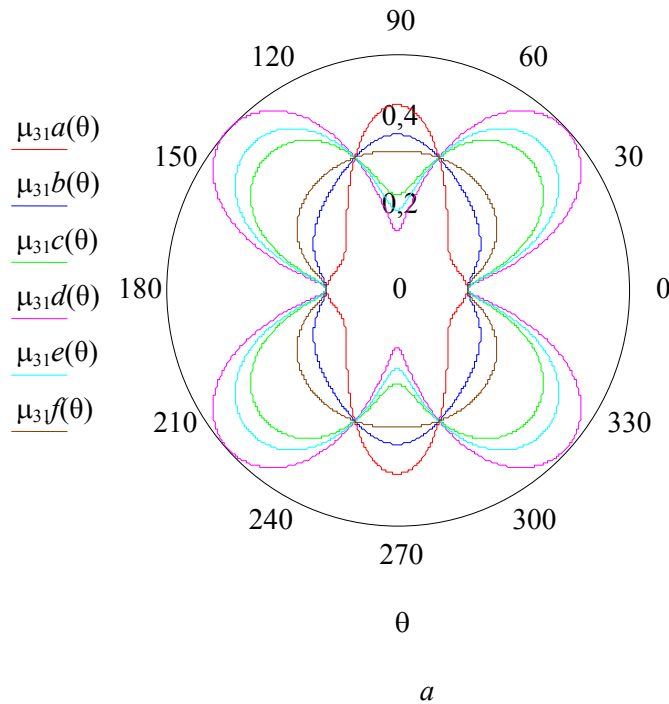


Рис. 1. Гексагональная ячейка и ортогональная система координат X_i , где OX_3 совпадает с направлением оси кристалла. Вращение ортогональной системы X'_i относительно системы X_i описывается в терминах трех углов Эйлера θ , ϕ и ψ



Min $\mu_{31}(\theta) = 0,132$
 Max $\mu_{31}(\theta) = 0,534$

б

Рис. 2. Полярные координаты (а) и декартовы координаты (б). Коэффициент Пуассона дентина μ'_{31} для различных направлений θ и ψ . $\theta = 0 - 2\pi$, а- f : $\psi = 0; 0,5; 1; 1,5; 2; 2,5$ радиан соответственно

Отметим аномально высокую величину максимального значения коэффициента Пуассона (0,534) вдоль ряда направлений, что крайне необычно для материалов. Это означает, что при сжатии локальных областей дентина вдоль этих направлений их

объем будет увеличиваться, а при растяжении – наоборот, уменьшаться. Упругое поведение под нагрузкой реставрационного материала принципиально другое (μ пломбировочного материала существенно меньше 0,5), поэтому при сжатии его объем уменьшается, а при растяжении – увеличивается. Это несоответствие в деформационном поведении на границе разнородных сред пломбировочного материала и дентина может привести к образованию доменов перенапряжений на данной границе, ослаблению сцепления реставрационного материала с дентином и, как негативный итог, деградации фиксации и часто встречаемой ситуации разрушения прямой, а порой и непрямой реставрации, особенно композиционными материалами.

Кроме того, известно, что величина коэффициента Пуассона тесно связана и прямо влияет на деформационную прочность кристаллов, а именно на трещиностойкость. Как известно, очагами разрушения материалов служат небольшие зародышевые микротрещины различного происхождения. Считается, что микротрещины в момент зарождения имеют длину $\sim 10^{-6}-10^{-4}$ мм. Распространение трещин может привести к разрушению зуба, т.е. разделению его на части. Разрушение носит хрупкий характер и происходит, как правило, при малых деформациях, без заметных пластических. В теории Гриффитса для объемного напряженного состояния показано, что величина критического напряжения σ , начиная с которого хрупкая трещина стартует и неограниченно растет, зависит от значения μ [9]. Это следует из нижеприведенной формулы и графика на рис. 3:

$$\sigma = \sqrt{\frac{8\gamma_s E^*}{\pi l}} = \sqrt{\frac{8\gamma_s E}{\pi l(1-\mu^2)}}$$

где γ_s – удельная поверхностная энергия дентина; l – длина микротрещины; E – модуль Юнга; E^* – приведенный модуль Юнга, $E^* = E/(1-\mu^2)$. Из рис. 3 видно, что чем выше коэффициент Пуассона, тем сильнее критическое напряжение зависит от него. С учетом того, что максимальные напряжения действуют в периферийной части ткани зуба, вероятность старта трещины там также максимальна. В средней части зуба, где располагается пульпа, внутренние силы минимальны, соответственно, вероятность старта будет меньше. Мы можем сделать некоторые оценки. Если положить $\gamma_s = 2,7 \cdot 10^2$ Дж/м², $E = 1,9 \cdot 10^{10}$ Па и $l = 1$ мкм, то получим при $\mu = 0,13$ $\sigma = 2,64$ ГПа, а при $\mu = 0,52$ $\sigma = 3,12$ ГПа. Далее, если гипотетически предположить, что данные напряжения приложены к площади 1 мм², то сила, вызвавшая это напряжение, будет равна в первом случае 2,64 кН, во втором – 3,12 кН. По порядку величины это почти силы, действующие в зубочелюстной системе человека. Напомним, что жевательная мышца, по данным [17], развивает усилия до 1 кН (например, при раскалывании ореха, косточек слив или абрикосов).

3. Заслуживает внимания подход, основанный на расчете экстремальных значений коэффициента Пуассона кристаллических сред и построении изоповерхностей коэффициента в пространстве. Результаты вычисления коэффициентов Пуассона дентина как кристаллической гексагональной структуры: $\mu_{\max} = 0,54$, $\mu_{\min} = 0,13$, $\mu_{[2\bar{1}\bar{1}0],[0001]} = 0,16$, $\mu_{[01\bar{1}0],[2\bar{1}\bar{1}0]} = 0,13$, $\mu_{[0001],[2\bar{1}\bar{1}0]} = 0,42$ (рис. 5).

Последние четыре цифры в квадратных скобках указывают направление растяжения, а первые четыре – направление поперечной деформации. Четырехиндексная система Миллера–Браве используется для определения направлений в гексагональной решетке (рис. 4).

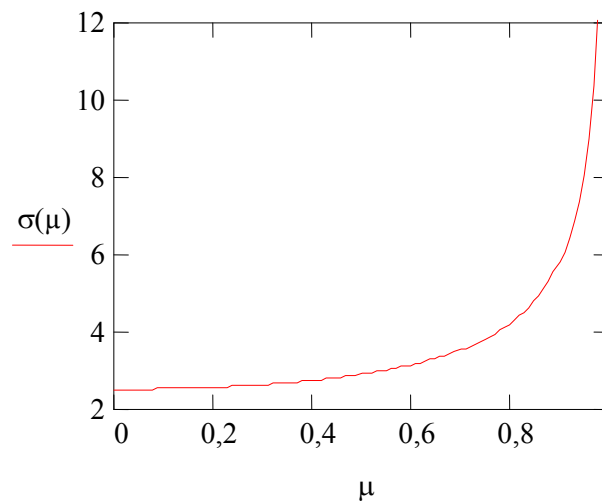


Рис. 3. Зависимость напряжения старта трещины, ГПа, от коэффициента Пуассона для объемного напряженного состояния дентина, $\gamma_s = 2,7 \cdot 10^2$ Дж/м², $E = 1,9 \cdot 10^{10}$ Па [5] и $l = 10^{-6}$ м = 1 мкм

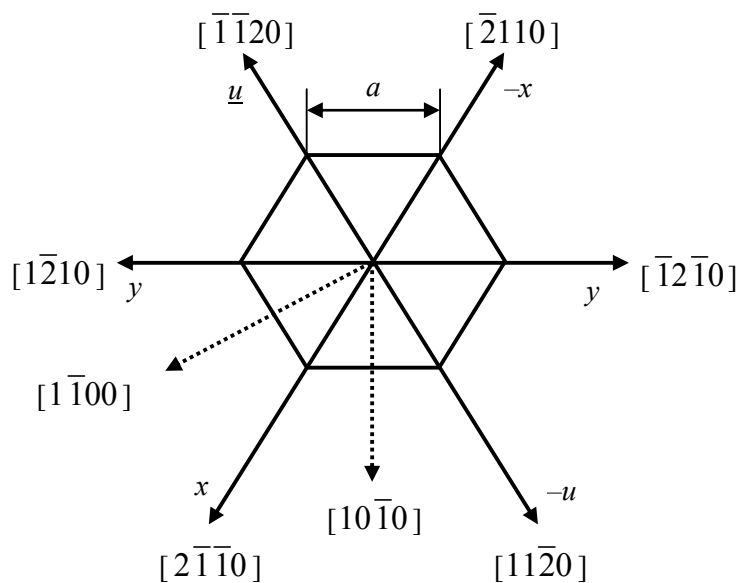


Рис. 4. Примеры кристаллографических направлений в гексагональной решетке (базисная плоскость, ось z перпендикулярна плоскости чертежа)

В гексагональной решетке начало координат помещают в центр основания элементарной ячейки. Кристаллографические оси x и y проходят из этого центра через вершины шестиугольного основания элементарной ячейки, располагаясь под углом 120° одна к другой, а ось z является вертикальной осью гексагональной призмы. За единицу измерения вдоль осей x и y принимают период решетки, a , а вдоль оси z – период, c .

В плоскости базиса проводят дополнительную ось u , расположенную под углом 120° к осям x и y . Направление $-u$ находится между направлениями $+x$ и $+y$. Дополнительный индекс i определяют точно так же, как и индексы Миллера, и ставят на третьем месте $[hki]$.

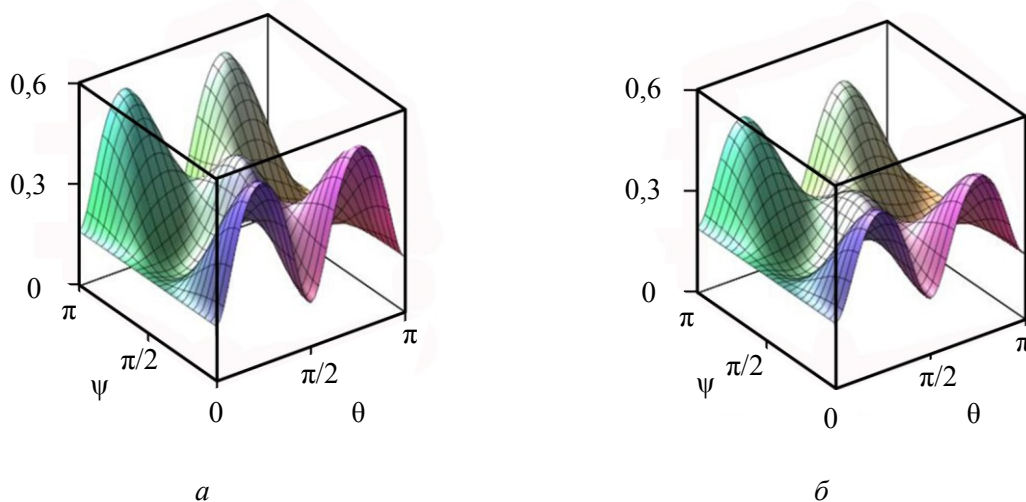


Рис. 5. Изменчивость коэффициента Пуассона μ дентина в пространстве

На рис. 5. представлена поверхность коэффициента Пуассона для дентина. Он подтверждает выраженный анизотропный характер коэффициента Пуассона. Его значения в зависимости от направления (углов Эйлера θ и ψ) изменяются в широких пределах (до четырех с лишним раз).

Отметим также аномально высокую величину максимального значения коэффициента Пуассона (0,54) вдоль ряда направлений, что оказывается выше значения верхнего предела для коэффициента Пуассона изотропных материалов. Кроме того, максимальное и минимальное значения коэффициента Пуассона хорошо согласуются с данными, полученными с помощью первого подхода для расчета коэффициента Пуассона как анизотропной среды (см. рис. 1, 2, а).

В заключение отметим, что аналогичный анализ может быть выполнен и для эмали зубов (см. рис. 5, б), состоящей из неорганических минералов, в основном кристаллов апатитов с гексагональной структурой, на 90–97% [10, 14]. В частности, минеральная основа эмали представлена гексагональными кристаллами гидроксикарбонат-, хлор-, фторапатитов, а эмалевые призмы являются основным структурным образованием.

- Значения упругих постоянных для эмали, ГПа: $c_{11} = 115$; $c_{12} = 42,4$; $c_{13} = 30$; $c_{33} = 125$; $c_{44} = 22,8$.

- Значения коэффициентов податливостей для эмали, ГПа⁻¹: $s_{11} = 0,0104$; $s_{12} = -0,0034$; $s_{13} = -0,0017$; $s_{33} = 0,0088$; $s_{44} = 0,0439$,

- Экстремальные значения коэффициента Пуассона для эмали, а также значения коэффициентов Пуассона в частных ориентациях: $\mu_{\max} = 0,47$; $\mu_{\min} = 0,16$; $\mu_{[2\bar{1}\bar{1}0]_I[0001]} = 0,19$; $\mu_{[01\bar{1}0]_I[2\bar{1}\bar{1}0]} = 0,16$; $\mu_{[0001]_I[2\bar{1}\bar{1}0]} = 0,33$.

Выводы

1. Дентин зубов не является изотропной средой вследствие симметрии его минеральной составляющей – кристаллов гидроксипатита.

2. Установлена выраженная анизотропия коэффициента Пуассона дентина на основе расчетов по формулам упругих постоянных и коэффициентов податливости для гексагональной сингонии. Максимальное значение коэффициента Пуассона (0,53–0,54) более чем в 4 раза (4,15) превышает минимальное (0,13).

3. Максимальное значение коэффициента Пуассона оказывается выше значения верхнего предела для коэффициента Пуассона изотропных, в том числе реставрационных, материалов, используемых в стоматологии, что может локально сказываться на качестве реставраций. В данном контексте высказано предположение, что установленная упругая анизотропия модели дентина с кристаллической гексагональной симметрией является клинически нежелательным фактором.

4. Более тщательный анализ упругой анизотропии дентина как минерально-органического комплекса и микронеоднородной гетерофазной системы возможен с привлечением достижений теории анизотропных сред с кристаллографической текстурой (несмотря на то что все призмы минеральных веществ в дентине обладают одинаковым или схожим кристаллическим строением, они отличаются взаимной ориентацией кристаллографических осей). Дальнейший анализ должен быть основан на знании характера пространственного распределения кристаллографических осей отдельных минеральных призм дентина.

5. Изучение показателей анизотропии дентина как анизотропной неоднородной среды приобретает практическое значение при исследовании проблем прочности тканей зуба и качества реставраций.

Значения коэффициента Пуассона эмали принципиально не отличаются от таковых у дентина. Они по-прежнему весьма велики и свидетельствуют об анизотропии упругих свойств эмали зуба (хотя и в меньшей степени: $\mu_{\max} / \mu_{\min} = 2,94$).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Беломестных В.Н., Теслева Е.П. Коэффициент Пуассона и параметр Грюнайтена твердых тел // Известия Томского политехнического университета. – 2003. – Т. 306, № 5. – С. 8–12.
2. Гольдштейн Р.В., Городцов В.А., Лисовенко Д.С. Изменчивость упругих свойств гексагональных ауксетиков // Доклады Академии наук. – 2011. – Т. 441, № 4. – С. 468–471.
3. Иванов Г.П., Лебедев Т.А. О физическом смысле коэффициента Пуассона // Труды Ленингр. политехн. ин-та им. М.И. Калинина. – 1964. – № 236. – С. 38–46.
4. Лебедеко И.Ю., Арутюнов С.Д., Муслов С.А., Усеинов А.С. Нанотвердость и модуль Юнга зубной эмали // Вестник Российского университета дружбы народов. Серия: Медицина. – 2009. – № 4. – С. 637–638.
5. Лебедеко И.Ю., Арутюнов С.Д., Муслов С.А., Усеинов А.С. Исследование наномеханических свойств зубной эмали // Кафедра. – № 32. – С. 24–28.
6. Лебедеко И.Ю., Арутюнов С.Д., Муслов С.А., Болатаев З.Б. Упругая анизотропия твердых тканей зуба // Медицинская физика – 2010: сб. материалов III Евразийского конгресса по медицинской физике и инженерии. – 2010. – М.: Изд-во МГУ, 2010. – Т. 1. Медицинская биофизика. – С. 279–280.
7. Лебедеко И.Ю., Арутюнов С.Д., Усеинов А.С., Муслов С.А., Брандт Н.Н., Аפרсян С.В. Исследование воздействия сверхнизких (4,2 К) температур на наномеханические свойства зубной эмали // Медицинская физика – 2010: сб. материалов III Евразийского конгресса по медицинской физике и инженерии. – 2010. – М.: Изд-во МГУ, 2010. – Т. 4. Инновационные технологии в медицине и здравоохранении. – Ч. I. – С. 323–324.
8. Най Д. Физические свойства кристаллов. – М.: ИЛ, 1960. – 385 с.
9. Перцов С.С., Стюрева Г.М., Муслов С.А., Синицын А.А., Корнеев А.А., Зайцева Н.В. Основы биомеханики для стоматологов. – М.: МГМСУ, 2017. – 115 с.
10. Хышиктуев Б.С., Хышиктуева Н.А. Биохимия полости рта: учеб. пособие. – Чита: ИИЦ ЧГМА, 2004. – 84 с.
11. Goldstein R.V., Gorodtsov V.A., Komarova M.A., Lisovenko D.S. Extreme values of the shear modulus for hexagonal crystals // Scripta Mater. – 2017. – Vol. 140. – P. 55–58. DOI: 10.1016/j.scriptamat.2017.07.002
12. Katz J.L., Ukraincik K. On the anisotropic elastic properties of hydroxyapatite // J. Biomech. – 1971. – Vol. 4, iss. 3. – P. 221–227. DOI: 10.1016/0021-9290(71)90007-8
13. Katz J.L. Hard tissue as a composite material – I. Bounds on the elastic behavior // J. Biomech. – 1971. – Vol. 4, iss. 5. – P. 455–473. DOI: 10.1016/0021-9290(71)90064-9
14. Lees S., Davidson C.L. The role of collagen in the elastic properties of calcified tissues // J. Biomech. – 1977. – Vol. 10, № 8. – P. 473–486.

15. Lees S., Rollins F.R. Jr. Anisotropy in hard dental tissues // J. Biomech. – 1972. – Vol. 5, № 6. – P. 557–664.
16. Povolo F. Poisson's ratio in zirconium single crystals // J. of Nuclear Materials. – 1983. – Vol. 118, iss. 1. – P. 78–82.
17. Prium G.J., De Jongh H.J., Ten Bosch J.J. Forces acting on the mandible during bilateral static bite at different bite force levels // J. Biomech. – 1980. – Vol. 13. – P. 735–763.

THE POISSON'S RATIO OF DENTIN AS ANISOTROPIC MEDIUM WITH HEXAGONAL SYMMETRY

S.A. Muslov, D.S. Lisovenko, A.S. Arutyunov, A.A. Pivovarov, A.I. Manin, L.G. Kirakosyan, Y.N. Kharah, S.D. Arutyunov (Moscow, Russia)

The Poisson's ratio (coefficient of transverse deformation) plays an important role in the deformation behavior of materials. Along with the Young's module, it constitutes a pair of independent and most informative material constants of solids. For hard tissues of the tooth (enamel and dentin), the Poisson's ratio should correspond to the Poisson's ratio of restorative materials in order to avoid overstresses at the boundary of the sections restorative material–enamel and restoration material–dentin. In addition, the value of the Poisson's ratio affects the deformation strength of enamel and dentin, namely, crack resistance, when they occur in a stress–strain state. In this paper, the orientational dependence of the Poisson's ratio of teeth dentin on the basis of matrices of elastic constants and the compliance coefficients of hexagonal crystals, such as crystals of dentine hydroxyapatite, was obtained for the first time. The results of calculating the Poisson's ratios of dentin as a crystalline system with a hexagonal structure are presented in the form of tables and diagrams in the polar and Cartesian coordinate systems. The minimum and maximum coefficients for the corresponding directions of the longitudinal and transverse deformations in the crystallographic coordinate system are also calculated. It is shown that the maximum value of the Poisson's ratio of dentin (0.53) is greater than the upper limit for the Poisson's ratio of isotropic materials, including known restoration materials, which in some cases may reduce the quality of restorations. It is noted that a similar analysis can be performed for tooth enamel.

Key words: dentin, Poisson's ratio, crystals of hydroxyapatite.

Получено 9 ноября 2017