

文章编号: 1004-7220(2021)01-0030-06

# 非自相似分层次结构对骨组织断裂力学性能分析

李兴国<sup>1\*</sup>, 安兵兵<sup>2,3</sup>, 张东升<sup>2,3\*</sup>, 樊艳红<sup>1</sup>, 常超<sup>1</sup>

(1. 太原科技大学 应用科学学院, 太原 030024; 2. 上海大学 力学与工程科学学院, 上海 200444;

3. 上海市应用数学和力学研究所, 上海 200444)

**摘要:**目的 研究非自相似分层次结构对生物复合材料的断裂力学性质及裂纹在其中扩展的影响。方法 利用 ABAQUS 软件进行建模, 采用扩展有限元法分别模拟矿物晶体长轴方向与矿化胶原纤维长轴方向夹角  $\theta = 0^\circ, 20^\circ, 40^\circ, 60^\circ, 80^\circ$  时矿化胶原纤维束的刚度以及裂纹在其中产生和扩展情况。结果 当  $\theta \leq 40^\circ$  时,  $\theta$  对材料刚度的影响很小; 当  $\theta > 40^\circ$  时, 材料刚度随着  $\theta$  增大而减小, 其极限拉伸应变随着  $\theta$  增大而增大。当  $\theta > 0^\circ$  时, 裂纹在增强项两侧蛋白质扩展过程中有不对称现象, 矿物晶体长轴偏转的一侧裂纹相对更容易扩展。结论 生物硬组织材料中的非自相似分层次结构使得材料中的裂纹分布变得不均匀, 故硬组织材料中的非一致排列现象可使得材料在外载荷作用下发生局部破坏而非灾难性脆断。研究结果可为材料设计提供理论支持。

**关键词:** 骨; 扩展有限元; 裂纹扩展

中图分类号: R 318.01 文献标志码: A

DOI: 10.16156/j.1004-7220.2021.01.005

## Effects of Non-Self-Similar Hierarchy on Fracture Mechanical Properties of Bone

LI Xingguo<sup>1\*</sup>, AN Bingbing<sup>2,3</sup>, ZHANG Dongsheng<sup>2,3\*</sup>, FAN Yanhong<sup>1</sup>, CHANG Chao<sup>1</sup>

(1. School of Applied Sciences, Taiyuan University of Science and Technology, Taiyuan 030024, China;

2. School of Mechanics and Engineering Science, Shanghai University, Shanghai 200444, China; 3. Shanghai

Institute of Applied Mathematics and Mechanics, Shanghai 200444, China)

**Abstract:** **Objective** To study the effect of non-self-similar hierarchy on fracture mechanical properties and crack propagation of the biocomposite. **Methods** The numerical models were established by using ABAQUS, and the stiffness and crack initiation and propagation in the biocomposite with the inclination angles between the axis of the prism and mineralized collagen fibrils  $\theta = 0^\circ, 20^\circ, 40^\circ, 60^\circ, 80^\circ$  were simulated by extended finite element method. **Results** The inclination angle  $\theta$  had limited influences on biocomposite stiffness at  $\theta \leq 40^\circ$ , while biocomposite stiffness decreased with  $\theta$  at  $\theta > 40^\circ$ . The ultimate tensile strain also increased at  $\theta > 40^\circ$ . Asymmetry in the crack was also found during propagation of matrix surrounded-enhanced phases at  $\theta > 0^\circ$ . The crack propagation on one side of the long axis of the mineral crystal was relatively easier than that on the other side at  $\theta > 0^\circ$ . **Conclusions** The non-uniform distributions of cracks were found in biological hard tissues arisen from the non-self-similar hierarchy. The non-uniform crystal arrangement in the biocomposite would result in local damage rather than catastrophic fracture. The findings of this study can provide theoretical support for material design.

**Key words:** bone; extended finite element; crack propagation

收稿日期: 2020-05-26; 修回日期: 2020-07-15

基金项目: 国家自然科学基金项目(11802194, 11772184), 山西省青年科技研究基金项目(201801D221018)

通信作者: 张东升, 教授, E-mail: donzhang@staff.shu.edu.cn; 李兴国, 讲师, E-mail: xingguoli@tyust.edu.cn

\* 为共同通信作者

生物硬组织材料具有复杂的分层次结构。例如,骨有7级分层次结构,在原子尺度上,骨组织是由胶原蛋白和羟基磷灰石晶体组成<sup>[1]</sup>。在第2个分层次即纳米尺度上,交错排列的羟基磷灰石晶体镶嵌在蛋白质中,组成了骨组织的最基本组成单元——矿化胶原纤维<sup>[2]</sup>。这些矿化胶原纤维通过非胶原蛋白黏结在一起,形成矿化胶原纤维束。矿化胶原纤维束通过一些特定的排列方式,如平行、倾斜等形态,形成各种片状的矿化胶原纤维层(即骨板)。这些骨板按圆环状排列,圆环的中心是哈佛管。骨板组成的圆环状结构又称为骨单元,而骨单元又组成了皮质骨。骨组织这种复杂结构所引起的复杂力学性能引起了广泛的关注<sup>[3-7]</sup>。基于生物硬组织材料的这种分层次结构,Gao等<sup>[7]</sup>提出自相似分层次模型:在第1级分层次上,矿物晶体相互平行并交错排列镶嵌在蛋白质中;第 $N+1$ 级分层次与第 $N$ 级分层次具有相似的结构;第 $N+1$ 级( $N>0$ )分层次上,增强相由第 $N$ 级分层次组成的复合材料构成。自相似分层次模型假设各个尺度上的增强相轴线方向一致。

然而在自然界中,人们发现具有分层次结构的生物组织材料在大尺度上的增强项轴线方向与在小尺度并不总是一致,即存在着非自相似分层次结构<sup>[8-10]</sup>。例如,牙釉质的釉柱中矿物质晶体存在着非一致排列现象<sup>[11]</sup>。骨组织中骨板的矿物晶体排列方向也随着与哈佛管的距离发生周期性变化<sup>[12]</sup>。An等<sup>[13]</sup>建立非自相似分层次模型,发现牙釉质这种结构可增强材料的能量耗散能力以及材料产生负泊松比现象。而有关这种结构对生物复合材料断裂力学性能的影响,目前还鲜有报道。

采用实验方法观察材料在微纳米尺度上的裂纹扩展极其困难,而基于数值模拟方法可以有效地对骨组织在微纳米尺度的裂纹萌生及扩展展开研究,有利于深入了解骨组织等硬组织材料在纳米尺度上的增韧和破坏机制,为临床治疗骨折等提供指导建议,也可对制造具有高韧性的新材料提供理论依据。本文采用扩展有限元法研究裂纹在骨组织中的萌生及扩展,并分析非自相似分层次结构对其裂纹扩展的影响。

## 1 模型与方法

### 1.1 有限元计算几何模型

在亚微米尺度上,矿化胶原纤维由水和非胶原蛋白黏结在一起,形成矿化胶原纤维束。研究表明,在这个尺度上的骨组织破坏是由矿化胶原纤维之间的非胶原蛋白破坏和损伤引起<sup>[14]</sup>。建立矿化胶原纤维束有限元模型(见图1),并采用扩展有限元法研究裂纹在其中的传播。在亚微米尺度上,胶原纤维束由交错排列的矿化胶原纤维与非胶原蛋白及水组成。图1中,灰色矩形区域代表增强相,即矿化胶原纤维;白色区域代表非胶原蛋白及水;矿化胶原纤维短轴和长轴方向分别是坐标系1和2的方向,矿物晶体短轴和长轴方向分别是坐标系1'和2'的方向。在纳米尺度上,交错排列的矿物晶体镶嵌在胶原蛋白中组成矿化胶原纤维。矿物晶体长轴方向与矿化胶原纤维长轴方向夹角为 $\theta$ 。 $L$ 为矿化胶原纤维的长度, $L=1\ 340\text{ nm}$ ;  $t$ 为矿化胶原纤维的厚度, $t=100\text{ nm}$ ;  $a$ 为长轴方向矿化胶原纤维间的距离, $a=340\text{ nm}$ ;  $b$ 为短轴方向矿化胶原纤维间的距离, $b=30\text{ nm}$ 。胶原纤维几何模型参数源自Hamed等<sup>[14]</sup>的研究。

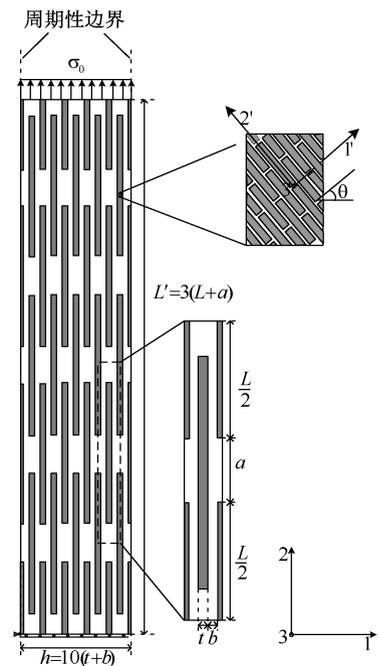


图1 矿化胶原纤维束几何模型

Fig.1 Geometric model of the mineralized collagen fiber bundles

为研究非自相似分层次结构对胶原纤维束断裂力学性能的影响,本文模拟矿物晶体长轴方向与矿化胶原纤维长轴方向夹角 $\theta$ 分别在 $\theta=0^\circ$ 、 $20^\circ$ 、 $40^\circ$ 、 $60^\circ$ 、 $80^\circ$ 时矿化胶原纤维束在单轴拉伸作用下的裂纹扩展情况。

为简化计算,本模型在沿增强相短轴方向采用5个周期,长轴方向采用3个周期,则模型的长轴方向和短轴方向长度分别为 $h=10(t+b)$ 和 $L'=3(L+a)$ ,对模型施加周期性边界条件,对材料施加沿长轴方向的拉伸载荷。

## 1.2 扩展有限元计算材料模型

为简便起见,矿化胶原纤维采用线弹性本构,其力学参数弹性模量 $E_{11}$ 、 $E_{22}$ 、 $E_{33}$ 分别为19.5、33.8、10.1 MPa,剪切模量 $G_{12}$ 、 $G_{23}$ 、 $G_{31}$ 分别为13.8、7.8、9.13 GPa,泊松比 $\nu_{12}$ 、 $\nu_{13}$ 、 $\nu_{23}$ 分别为0.26、0.35、0.29<sup>[15]</sup>。胶原蛋白在载荷作用下发生非线性变形,其在单轴拉伸作用下应力-应变关系为指数函数<sup>[16]</sup>:

$$\sigma = E_c \varepsilon^n \quad (1)$$

式中: $E_c$ 为蛋白质弹性模量; $\sigma$ 和 $\varepsilon$ 分别为蛋白质的名义应力和名义应变; $n$ 为蛋白质的非线性指数。 $E_c=2.5$  GPa,  $\nu_c=0.35$ <sup>[15]</sup>。本文采用Ogden应变能势函数模拟蛋白质的超弹性力学行为,通过单轴拉伸测试曲线数据得到蛋白质的应变能势函数参数。本模型拉伸载荷沿矿化胶原纤维长轴方向,采用位移加载模式,并对材料施加周期性边界条件。模型使用4节点四边形平面应变单元(CPE4R)进行离散。

为研究矿化胶原纤维束的破坏性质,采用扩展有限元法的内聚力片段法模拟材料的裂纹扩展行为。根据Siegmund等<sup>[17]</sup>的研究,胶原蛋白间为弱相互作用时,其破坏强度 $\sigma_{\max}^m \approx 30$  MPa。本文选取蛋白质的破坏强度和能量释放率分别为 $\sigma_{\max}^m = 80$  MPa和 $G_c^m = 82$  J/m<sup>2</sup><sup>[14]</sup>。矿化胶原纤维为各向异性材料,本文选取其在长轴、短轴方向的强度分别为2.3 GPa<sup>[14]</sup>、500 MPa<sup>[18]</sup>,能量释放率 $G_c^m = 0.2$  J/m<sup>2</sup>。

生物复合材料受到轴向拉伸载荷作用时,增强相即矿化胶原纤维主要承受沿其长轴方向的拉伸载荷,而纤维间的非胶原蛋白通过剪切作用传递载荷。为方便描述,本文将矿化胶原纤维束中增强相

重叠的区域称为重叠区域,增强相不重叠的区域称为非重叠区域。蛋白质在重叠区域主要受到剪切作用,因而蛋白质易发生剪切破坏;而在非重叠区域,蛋白质受到的剪切作用力较小。根据生物复合材料中的这种变形机制,假设裂纹在增强相重叠区域的蛋白质中沿增强相轴线方向传播,在非重叠区域沿与增强相短轴平行方向扩展(见图2)。

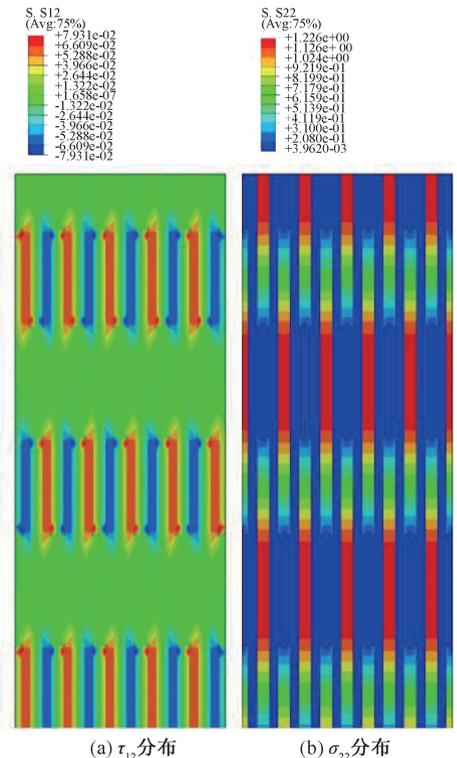


图2 矿化胶原纤维束在单轴拉伸载荷作用下应力分布  
Fig.2 Stress distributions for the mineralized collagen fiber bundles in direct tension (a) Distribution of  $\tau_{12}$ , (b) Distribution of  $\sigma_{22}$

## 2 数值模拟结果

### 2.1 裂纹在矿化胶原纤维束中的产生及扩展模拟结果

为方便描述,定义矿化胶原纤维束的等效应变为:

$$\varepsilon = u/L' \quad (2)$$

由矿化胶原纤维束( $\theta=0^\circ$ )在单轴拉伸作用下的应力-应变曲线可知,在初始阶段,增强相和蛋白质仅发生弹性变形;当应变达到0.0114时,靠近增强相短轴附近的蛋白质中产生裂纹(见图3)。此

后,裂纹在蛋白质中沿着增强相的长轴方向继续扩展。定义单轴拉伸下的最大应力为材料的强度,则矿化胶原纤维束的强度为 0.176 GPa。由矿化胶原纤维束( $\theta=0^\circ$ )失效时的裂纹分布可知,当施加足够大载荷时,材料中的增强相将会出现被“拔出”现象(见图 4)。

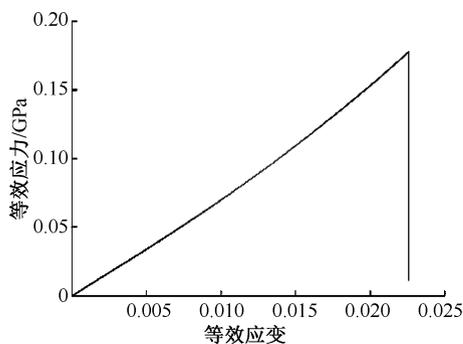


图 3 矿化胶原纤维束在单轴拉伸作用下应力-应变曲线

Fig. 3 Typical stress-strain responses for the mineralized collagen fiber bundles under uniaxial stretch

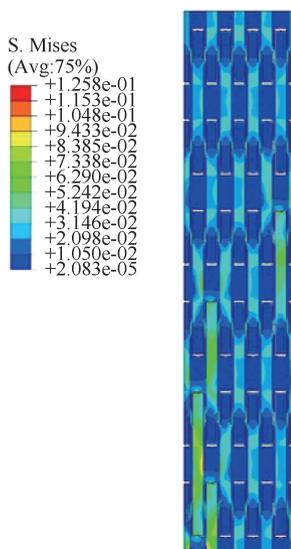


图 4 矿化胶原纤维束在单轴拉伸后裂纹扩展

Fig. 4 Crack propagation of the mineralized collagen fiber bundles under uniaxial stretch

## 2.2 非自相似分层次结构矿化胶原纤维束中裂纹扩展的模拟结果

图 5 为夹角对矿化胶原纤维束受单轴拉伸作用下应力-应变的影响。为方便描述,定义应力-应变曲线初始阶段(即弹性阶段)的斜率为复合材料的刚度。当  $\theta \leq 40^\circ$  时,胶原纤维束具有类似的应

力-应变关系, $\theta$  对材料的刚度影响很小;当  $\theta > 40^\circ$  时,材料刚度随着  $\theta$  增大而减小,其极限拉伸应变随着  $\theta$  增大而增大。

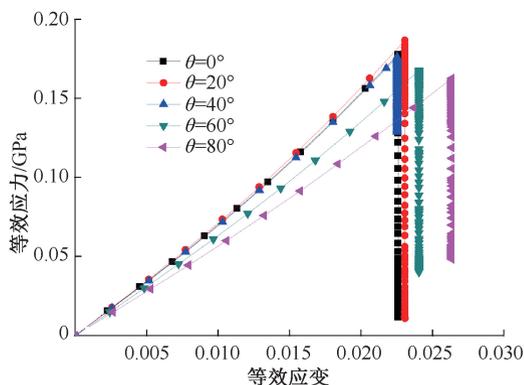


图 5 不同夹角下矿化胶原纤维束在单轴拉伸时应力-应变曲线

Fig. 5 Stress-strain curves for the mineralized collagen fiber bundles under uniaxial stretch at different angles

对于任意  $\theta$ , 裂纹总是首先在增强项短轴附近的蛋白质中产生,然后裂纹沿着增强相和蛋白质界面在蛋白质中扩展,且增强相都不会发生破坏。然而这种非自相似分层次结构对裂纹扩展的过程具有明显的影响。当矿物晶体长轴方向与增强相长轴方向一致,即  $\theta=0^\circ$  时,裂纹在增强项短轴附近的蛋白质中产生后,沿着增强相和蛋白质界面在蛋白质中扩展。扩展过程中,裂纹总是关于增强相对称分布。而当  $\theta > 0^\circ$  时,裂纹在增强项两侧蛋白质扩展过程中有不对称现象,矿物晶体长轴偏转的一侧裂纹相对更容易扩展。当  $0^\circ < \theta < 45^\circ$  时,且随着  $\theta$  增大,这种趋势更明显;当  $45^\circ < \theta < 90^\circ$  时,这种趋势又随着  $\theta$  增大而减弱(见图 6)。

## 3 讨论与结论

本文建立了骨组织在亚微米尺度裂纹扩展的扩展有限元模型,分析非自相似分层次结构对骨组织刚度、强度以及裂纹在其间扩展的影响。

增强相沿长轴方向的刚度大于短轴方向。当矿物晶体长轴方向与矿化胶原纤维长轴方向夹角  $\theta \leq 40^\circ$  时,即矿物晶体长轴方向与矿化胶原纤维长轴方向几乎一致时, $\theta$  对骨组织的刚度和强度影响很小;当  $\theta > 40^\circ$  时,骨组织的刚度和强度随着  $\theta$  的增大而减小,极限拉伸应变随着  $\theta$  的增大而增大。An

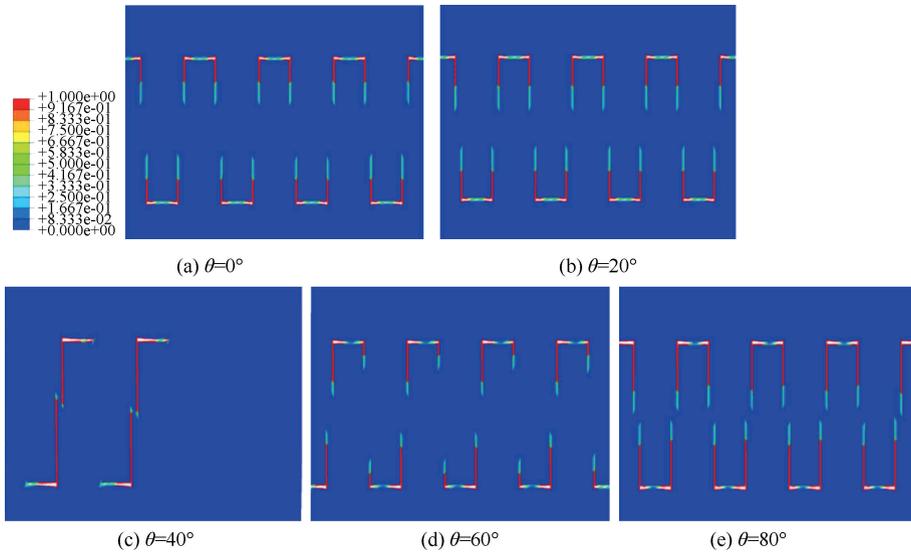


图6 不同夹角下矿化胶原纤维在单轴拉伸时裂纹扩展情况

Fig.6 Crack propagation of the mineralized collagen fiber bundles under uniaxial stretch at different angles (a)  $\theta=0^\circ$ , (b)  $\theta=20^\circ$ , (c)  $\theta=40^\circ$ , (d)  $\theta=60^\circ$ , (e)  $\theta=80^\circ$

等<sup>[11]</sup>研究也表明,当釉柱中的矿物晶体长轴方向排列与釉柱一致时,其刚度最大。骨组织的这种力学性质与增强相的力学性质相关。由于增强相沿长轴方向的刚度大于短轴方向,因而当 $\theta>40^\circ$ 时,骨组织刚度随着 $\theta$ 增大而减小,极限拉伸应变随着 $\theta$ 增大而增大。

非自相似分层次结构对硬组织材料的断裂力学性能也有着显著的影响<sup>[11,13]</sup>。An等<sup>[11]</sup>研究发现,釉柱中的矿物晶体轴线排列方向与釉柱轴线不一致,牙釉质的这种微结构可在不损失牙釉质刚度的前提下提高牙釉质的能量耗散能力,从而增强牙釉质的断裂韧性。牙釉质釉柱的单轴压缩实验表明,釉柱在受到单轴压缩时会产生应变局部化的现象,从而导致矿物晶体分层以及不同排列角度的矿物晶体发生摩擦和互锁现象<sup>[19]</sup>。此外,与传统材料相比,包含非自相似分层次结构的生物硬组织材料会产生负泊松比现象,这种材料可储存更多的应变能;且由于增强相在拔出过程中需要耗散更多的能量,从具有更强的断裂韧性。

本文从断裂力学角度模拟骨组织中的裂纹产生和扩展过程,揭示非自相似分层次结构对裂纹扩展的影响。由图6可知,包含这种非自相似分层次结构的硬组织材料产生裂纹的机制与自相似分层次结构相同,即都是在蛋白质中产生和传播,但是

对裂纹的扩展产生影响,裂纹在矿物晶体长轴方向偏转的一侧优先扩展。

骨组织和牙釉质中广泛存在这晶体非一致排列现象。矿物晶体与增强相夹角 $\theta$ 接近 $0^\circ$ 时,可为硬组织材料提供刚度。本文的数值模拟表明,在受到外载荷作用时,硬组织材料中的裂纹随着 $\theta$ 增大变得不均匀,从而导致其仅发生局部破坏而非灾难性的脆断,这与实验观察得到的结论一致<sup>[19]</sup>。

此外,An等<sup>[20]</sup>研究发现,皮质骨的裂纹扩展时,裂纹尾部有未断裂的骨组织形成裂纹桥联,并且发生很大偏斜,且有裂纹分叉出现。本文数值模拟同样发现,骨组织中的晶体非一致排列导致局部地区更容易微小裂纹,因而在裂纹扩展过程中易发生裂纹偏斜现象。这也验证了本数值模拟的有效性。

综上所述,由于骨组织具有非自相似分层次结构,裂纹在骨组织中扩展时会出现裂纹分布不均匀,从而使得材料在外载荷作用下发生局部破坏而非灾难性脆断。本文研究结果可为材料设计提供理论支持。

#### 参考文献:

- [1] RHO JY, KUHN-SPEARING L, ZIOUPOS P. Mechanical properties and the hierarchical structure of bone [J]. Med Eng Phys, 1998, 20(2): 92-102.

- [ 2 ] FRATZL P, WEINKAMER R. Nature's hierarchical materials [J]. *Prog Mater Sci*, 2007, 52(8): 1263-1334.
- [ 3 ] 任鹏玲, 牛海军, 宫赫, 等. 老龄关节软骨和软骨下骨的变化及相互作用机制研究进展[J]. *医用生物力学*, 2020, 35(2): 253-258.  
REN PL, NIU HJ, GONG H, *et al.* Research progress on changes and interaction mechanisms of aging articular cartilage and subchondral bone [J]. *J Med Biomech*, 2020, 35(2): 253-258.
- [ 4 ] 于露, 李昊, 高丽兰, 等. 骨组织的多层次生物力学特性及本构关系[J]. *医用生物力学*, 2019, 34(4): 434-439.  
YU L, LI H, GAO LL, *et al.* Hierarchical biomechanical properties and constitutive relationships of bone tissues [J]. *J Med Biomech*, 2019, 34(4): 434-439.
- [ 5 ] 韩标, 张新昌, 李昊, 等. 不同强度周期性动态力学载荷对微重力下骨质疏松的影响[J]. *医用生物力学*, 2017, 32(1): 83-87.  
HAN B, ZHANG XC, LI H, *et al.* The effect of periodic dynamic mechanical load with different intensity on microgravity-induced osteoporosis [J]. *J Med Biomech*, 2017, 32(1): 83-87.
- [ 6 ] 罗林聪, 马立敏, 林泽, 等. 基于 AnyBody 骨骼肌肉多体动力学分析的有限元仿真[J]. *医用生物力学*, 2019, 34(3): 237-242.  
LUO LC, MA LM, LIN Z, *et al.* Finite element simulation of AnyBody-based musculoskeletal multi-body dynamics [J]. *J Med Biomech*, 2019, 34(3): 237-242.
- [ 7 ] GAO H. Application of fracture mechanics concepts to hierarchical biomechanics of bone and bone-like materials [J]. *Int J Fract*, 2006, 138: 101-137.
- [ 8 ] LI X, HUANG Z. Unveiling the formation mechanism of pseudo-single-crystal aragonite platelets in nacre [J]. *Phys Rev Lett*, 2009, 102: 75502.
- [ 9 ] YANG W, GLUDOVATZ B, ZIMMERMANN EA, *et al.* Structure and fracture resistance of alligator gar (*tractosteus spatula*) armored fish scales [J]. *Acta Biomater*, 2013, 9(4): 5876-5889.
- [ 10 ] ACHRAI B, WAGNER HD. Micro-structure and mechanical properties of the turtle carapace as a biological composite shield [J]. *Acta Biomater*, 2013, 9(4): 5890-5902.
- [ 11 ] AN B, WANG R, ZHANG D. Role of crystal arrangement on the mechanical performance of enamel [J]. *Acta Biomater*, 2012, 8(10): 3874-3793.
- [ 12 ] FRATZL P, WEINKAMER R. Nature's hierarchical materials [J]. *Prog Mater Sci*, 2007, 52(8): 1263-1334.
- [ 13 ] AN B, ZHAO X, ZHAND D. On the mechanical behavior of bio-inspired materials with non-self-similar hierarchy [J]. *J Mech Behav Biomed Mater*, 2014, 34: 8-17.
- [ 14 ] HAMED E, JASIUK I. Multiscale damage and strength of lamellar bone modeled by cohesive finite elements [J]. *J Mech Behav Biomed Mater*, 2013, 28: 94-110.
- [ 15 ] HAMED E, JASIUK I, YOO A, *et al.* Multi-scale modelling of elastic moduli of trabecular bone [J]. *J R Soc Interface*, 2012, 9(72): 1654-1673.
- [ 16 ] WANG X, QIAN C. Prediction of microdamage formation using a mineral-collagen composite model of bone [J]. *J Biomech*, 2006, 39(4): 595-602.
- [ 17 ] SIEGMUND T, ALLEN MR, BURR DB. Failure of mineralized collagen fibrils: Modeling the role of collagen cross-linking [J]. *J Biomech*, 2008, 41(7): 1427-1435.
- [ 18 ] DUBEY DK, TOMAR V. Role of hydroxyapatite crystal shape in nanoscale mechanical behavior of model tropocollagen-hydroxyapatite hard materials [J]. *Mater Sci Eng C*, 2009, 29(7): 2133-2140.
- [ 19 ] AN B, WANG R, AROLA D, *et al.* Damage mechanisms in uniaxial compression of single enamel rods [J]. *J Mech Behav Biomed Mater*, 2015, 42: 1-9.
- [ 20 ] AN B, LIU Y, AROLA D, *et al.* Fracture toughening mechanism of cortical bone: An experimental and numerical approach [J]. *J Mech Behav Biomed Mater*, 2011, 4: 983-992.