

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
Федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение высшего образования
**«САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИМЕНИ Н.Г. ЧЕРНЫШЕВСКОГО»**

Кафедра математической теории
упругости и биомеханики

**Механические свойства графена для его применения в травматологии и
ортопедии**

АВТОРЕФЕРАТ БАКАЛАВРСКОЙ РАБОТЫ

студента 4 курса 431 группы

направления 01.03.03 – Механика и математическое моделирование

механико-математического факультета

Усова Никиты Александровича

Научный руководитель
к.ф.-м.н., доцент

подпись, дата

А.С. Колесникова

Зав. кафедрой
д.ф.-м.н., профессор

подпись, дата

Л.Ю. Коссович

Саратов 2023

Введение. В случае травмы костной структуры осуществляется процесс регенерации. Проблема регенерации кости является междисциплинарной медицинской, научной и инженерной задачей. Недостаточная регенерация кости - сложная проблема, затрагивающая миллионы.

Графен, оксид графена и функциональные графеновые материалы обладают множеством интересных свойств, которые делают их многообещающими основами для создания сложных, биомиметических, остеоиндуктивных, синтетических каркасов для регенерации кости. Графен, оксид графена и функциональные графеновые материалы обладают химически перестраиваемой поверхностью, механической стабильностью, а также функциональные графеновые материалы периодические в протяженном масштабе и обладают способностью к саморазложению, что делает этот класс материалов перспективным кандидатом для регенерации твердых тканей.

К производным графена относится материал скаффолд, который представляет собой пористую углеродную структуру. В настоящее время скаффолды уже активно используются для процесса регенерации твердых тканей. Изучаются их механические свойства, а также изменение механических свойств скаффолд при повышении температуры.

В связи с этим **целью** данной работы является анализ механических свойств графена для его применения в травматологии и ортопедии, в частности, для регенерации костной структуры.

Объектами исследования являются графена и его производные скаффолды, а также композиты образованные графеном и хитозаном и углеродным скаффолдом и хитозаном.

Структура и объем работы. Выпускная квалификационная работа состоит из введения, 3 глав, заключения, списка использованных источников, включающего 32 наименований. Работа изложена на 40 листах машинописного текста, содержит 5 рисунков.

Основное содержание. Во введении обосновывается актуальность, приводится обоснование использования углеродных наноструктур.

В первой главе приводятся этапы регенерации кости.

Во второй главе приводятся теоретические и экспериментальные методы исследования механических свойств наноструктур.

Третья глава посвящена описанию объектов исследования, а также анализу механических свойств графена и скаффолд для регенерации костной структуры. В рамках данной работы в качестве механических свойств анализируется только модуль Юнга. Это объясняется тем, что именно модуль Юнга, наиболее важен при регенерации костных структур кости.

В данной бакалаврской работе наиболее подробно описан один теоретический алгоритм определения величины модуля Юнга, представленный в работе, а также экспериментальный подход в определении модуля Юнга наноструктур.

В первом разделе третьей главы осуществляется описание нанобъектов, применяемых для регенерации костной структуры (их геометрическое строение). К данным нанобъектам относятся графен и углеродные скаффолды, а также биокompозиты образованные графеном и хитозаном и скаффолдом и хитозаном. Выбор хитозана в качестве биосовместимого материала объясняется тем, что хитин – вещество, названное полимером XXI века, одно из средств принимающее в процессе регенерации.

Графен — это двумерный материал, аллотропная модификация углерода. В случае графена атомы углерода выстроены в шестигранную структуру и формируют слой толщиной в один атом (рисунок 1).

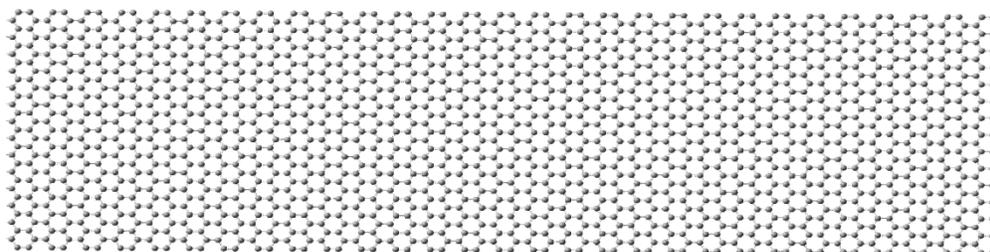


Рисунок 1 - Кристаллическая решетка графена

Легкость графена и его тонкость позволяют имплантату имитировать вес кости, так как он практически не добавляет веса имплантату. Также оксид графена способен поддерживать остеогенез. Это доказывает биосовместимость графена и способность к остеостимуляции. Со временем чтобы улучшить процесс заживления был найден новый состав графена, который биоразлагаемый, имитирует кость, привлекает стволовые клетки и, в конечном итоге, улучшает процесс восстановления скелета. Когда графен размещается на поврежденной костной ткани, вокруг нее, он служит структурой для связывания и роста костных клеток. Графеновый каркас разрушается по мере роста костей, исчезая после излечения места перелома. Идеальная заплатка, которая делает свое дело и ничего не оставляет после себя.

Для регенерации костной ткани лучше использовать скаффолд, так как их можно создать из различных компонентов. Скаффолд - это клеточная матрица для регенерации костной ткани, куда помещается то, что хотим внести вовнутрь организма (рисунок 2). Биоразлагаемые скаффолды разрушаются со временем использования на безопасные вещества. Такие скаффолды разрабатываются на основе полилактида, хитозана, производных целлюлозы, альгината, коллагена, фиброина и т.д.

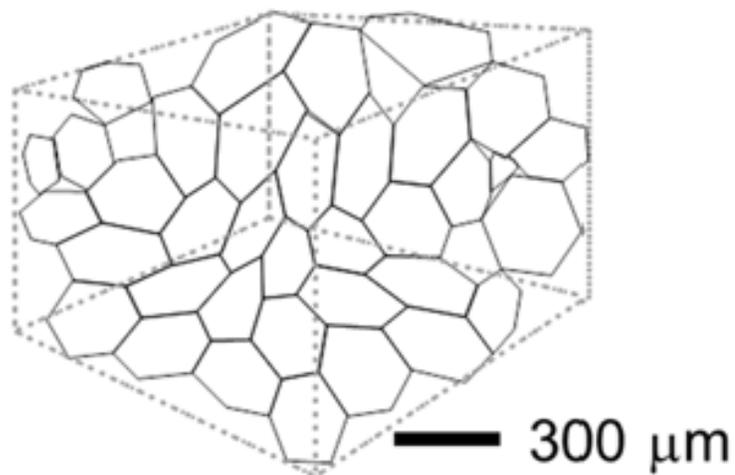


Рисунок 2 – Структура скаффолд

Скаффолды являются пористыми структурами и могут основываться на стеклоподобном углероде, привлекли внимание многих исследователей из-за их уникальных физических свойств. Геометрические параметры (размер нанопор) полых углеродных наноструктур можно легко адаптировать с помощью методов синтеза. Пористые углеродные структуры используются в качестве сорбентов, что является важным элементом современной медицины.

Во втором разделе третьей главы представлено использование графена для регенерации костной структуры. Графен, оксид графена (GO) и функциональные графеновые материалы обладают множеством интересных свойств, которые делают их многообещающими основами для создания сложных, биомиметических, остеоиндуктивных, синтетических каркасов для регенерации кости. Графен, оксид графена и функциональные графеновые материалы обладают химически перестраиваемой поверхностью, механической стабильностью, а также функциональные графеновые материалы периодические в протяженном масштабе и обладают способностью к саморазложению, что делает этот класс материалов перспективным кандидатом для регенерации твердых тканей.

GO сохраняет гидрофобный, сильно сопряженный ароматический каркас, подобный графену, но также имеющий гидрофильные кислородсодержащие функциональные группы. Амфифильность и легкая диспергируемость GO в водных средах способствуют повышению технологичности GO.

В третьем разделе третьей главы представлено использование скаффолд для регенерации костной структуры.

Изготовление костных каркасов с взаимосвязанной пористой структурой, адекватными механическими свойствами и отличной биосовместимостью представляет собой серьезную проблему.

Плюсы:

- уменьшение инвазивности операции;
- безопасность использования;
- отсутствие резорбции костной ткани в месте крепления.

Минусы:

- недостаточная прочность;
- среда способствует росту бактерий.

В четвертом разделе третьей главы представлен анализ механических свойств графена или скаффолд, а также перспективности их использования для регенерации костной структуры.

Механические свойства графена, и плюсы использования графена в регенерации костной структуры

При увеличении длин сторон для квадратных графеновых листов модуль Юнга стремиться к значению $1,0 \pm 0,1$ ТПа, а также при соотношении сторон 1:1 приравниваются и их модули Юнга в разных направлениях деформации.

При деформации путем эмпирического потенциала, наращивания зигзагообразного края графеновой наночастицы приводит к увеличению псевдомодуля Юнга (рисунок 3), а также стремиться к определенному значению.

В работе показано, что значения механических свойств графена не превышают 1 ТПа.

Плюсы использования графена в регенерации костной структуры:

-придает имплантатам высокий уровень биосовместимости по многим причинам;

-может существовать в биологической среде, не вызывая на границе ткань-имплантат эффекта металлоза;

-плотная кольцевая структура графена предотвращает соприкосновение любых внешних молекул с имплантатом;

-слой молекул углерода толщиной в один атом действует как твердая мембрана в жидкой среде человеческого тела, что повышает механическую функциональность имплантата и снижает риск инфицирования;

- легкость графена и его тонкость позволяют имплантату имитировать вес кости, так как он практически не добавляет веса имплантату.

Механические свойства скаффолд, и плюсы использования скаффолд в регенерации костной структуры

Средние значения модуля Юнга для беспримесных ПУС со средним размером пор 4.1 Å составляет 4.88 ТПа, 6.75 Å – 1.86 ТПа, 11.7 Å – 1.17 ТПа.

Плюсы:

-уменьшение инвазивности операции;

-безопасность использования;

-отсутствие резорбции костной ткани в месте крепления.

Минусы:

-недостаточная прочность;

-среда способствует росту бактерий.

способствует росту бактерий.

-среда способствует росту бактерий.

Сравнительные характеристики исследованных листов графена

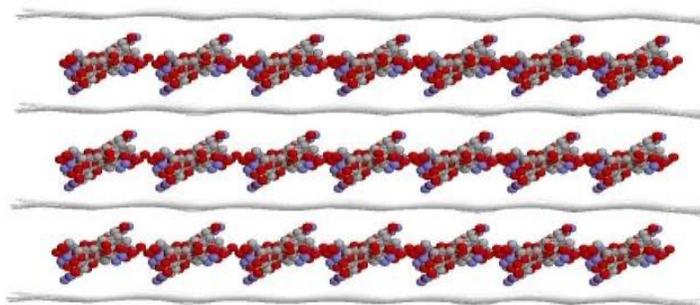
Длина, Å	Ширина, Å	Модуль Юнга, ТПа, направление зигзаг	Модуль Юнга, ТПа, направление кресло
11.462	7.206	0.736	0.890
11.405	17.086	0.778	0.709
11.411	14.599	0.804	0.747
11.426	12.135	0.780	0.758
11.444	9.672	0.783	0.784
15.696	17.075	0.855	0.894
15.713	14.604	0.849	0.828
15.731	12.141	0.823	0.892
15.762	9.673	0.847	0.815
15.805	7.201	0.812	0.792
20.008	14.60	0.895	0.794
20.035	17.04	0,921	0,841
20.036	12.14	0.892	0.773
20.088	9.668	0.809	0.737
20.130	7.203	0.831	0.721
24.317	17.067	0.848	0,830

Длина, Å	Ширина, Å	Модуль Юнга, ТПа, направление зигзаг	Модуль Юнга, ТПа, направление кресло
24.329	14.611	0.845	0.808
24.364	12.134	0.820	0.802
24.390	9.673	0.884	0.813
24.492	7.203	0.921	0.785
28.608	17.068	0.924	0.822
28.642	14.593	0.913	0.801
28.690	9.673	0.988	0.811
28.708	12.116	0.937	0,861
28.804	7.204	0.967	0.825
54.030	49.861	0.931	0.923
71.229	71.268	0.993	0.986

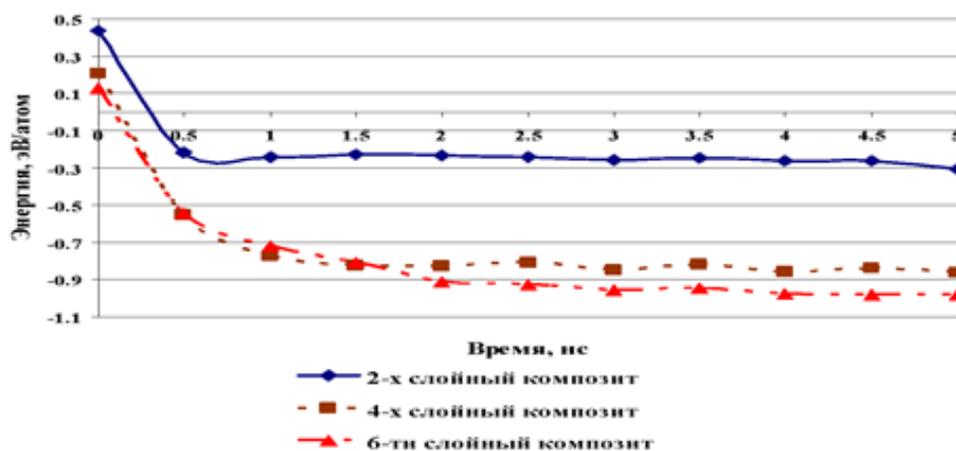
Рисунок 3 – Сравнительные характеристики исследованных листов графена

Из данных рисунка 3, видно, что по механическим свойствам графен уступает скаффолдам, но графен является более биосовместимым с таким объектом как хитозан в силу тонкости слоя и площади поверхности. Данные по взаимодействию графена с хитозаном представлены в работе. При этом следует отметить, что работ по взаимодействию скаффолдов с хитозаном найдено не было.

В работе установлено, что в процессе формирования композита наблюдается перераспределение электронной плотности между атомами графена и хитозана. Выявлены закономерности изменения стабильности композита при увеличении числа структурных звеньев хитозана и количества слоев графена (рисунок 4). Полученные результаты позволяют заключить, что созданный биокомпозит на основе хитозана и углеродных наноструктур обладает высокой стабильностью и прочностными характеристиками.



а)



б)

Рисунок 4 - Модель графена и хитозана (а); зависимость энергии от времени (б)

Заключение. Из представленного анализа можно заключить, что для регенерации костной структуры графен и его производные являются актуальным материалом. Эта актуальность связана с тем, что графен является отличным носителем клеточных структур. Легкость графена и его тонкость позволяют имплантату имитировать вес кости, так как он практически не добавляет веса имплантату, а также обладает весьма высокой электропроводностью и удивительной по масштабу площадью поверхности, которая позволяет производить эффективное биосоединение с распространенными биомолекулами. В частности, с таким биоматериалом как хитозан, который известен, как материал, восстанавливающий костную структуру. Несколько лет назад графен был одним из наиболее дорогостоящих материалов на планете, однако с ростом его промышленного производства стоимость снижается.

Анализ перспективности использования графена или скаффолд для регенерации костной структуры показал, что графен является более перспективным материалом по сравнению со скаффолдом на основе графена. Несмотря на то, что графен уступает скаффолдам по механическим свойствам, графен является более биосовместимым с таким объектом как хитозан в силу тонкости слоя и площади поверхности, что подтверждается результатами работы.