



**UNIVERSITÄT
BAYREUTH**

**OBERFRANKEN
STIFTUNG**

Forschungsbericht

zum Forschungsprojekt P- Nr. 05266 „Simulationsgestützte Entwicklung eines graduellen Sehnenersatzmaterials“, 01.02.2017 - 30.04.2021

Teilprojekt

FE-Simulation des mechanischen Verhaltens biomineralisierter Gerüste

Berichterstellung

Florian Hüter, M.Sc.
Dipl.-Ing. Johannes Wittmann

Forschungsstelle

Lehrstuhl für Konstruktionslehre und CAD, Ordinarius Prof. Dr.-Ing. Frank Rieg,
Universität Bayreuth

Fördergeber

Oberfrankenstiftung, Lisztstraße 16, 95444 Bayreuth
Geschäftsführer Stefan Seewald

Inhalt

1	Graduell verstärkte Kompositmaterialien als Sehnersatzmaterial.....	3
2	Simulation des mechanischen Verhaltens biomineralisierter Gerüste	5
2.1	Natürliche Gradientenmaterialien als Vorbild.....	5
2.2	Simulationsstrategie zur Abbildung des graduellen Steifigkeitsverlaufs.....	7
2.3	Mikromechanisches Modell zur Bestimmung der effektiven elastischen Materialeigenschaften	7
2.3.1	Mikromechanisches Simulationsmodell	8
2.3.2	Umsetzung der Simulationsmethodik.....	11
2.3.3	Untersuchungen am Mikromodell.....	15
2.4	Makroskopisches Ersatzmodell des Gradientenmaterials	16
2.4.1	Makromechanisches Simulationsmodell	17
2.4.2	Umsetzung der Simulationsmethodik.....	17
2.4.3	Untersuchungen am Makromodell	18
2.4.4	Anwendungsbeispiel: Achilles-Sehnersatz	21
2.5	Einfluss anisotroper Partikelstrukturen auf das Materialverhalten.....	23
2.5.1	Bestimmung der anisotropen Materialeigenschaften.....	24
2.5.2	Umsetzung der Simulationsmethodik.....	25
2.5.3	Untersuchung des Einflusses anisotroper Partikelstrukturen	27
3	Zusammenfassung	29
4	Literaturverzeichnis	30

1 Graduell verstärkte Kompositmaterialien als Sehnenersatzmaterial

Sehnen spielen eine fundamentale Rolle im Bewegungsablauf des menschlichen Körpers. Als physikalische Verbindung zwischen Muskel und Knochen dienen sie der Übertragung der Muskelkraft auf das Skelett [1]. Aufgrund der physiologisch bedingten hohen Beanspruchungen im Bereich der Sehne-Muskel-Partie, zählen Verletzungen in diesem Bereich des Bewegungsapparats mit etwa 30 % zu den häufigsten Sportunfällen [2]. Die natürliche Heilung einer verletzten Sehne ist aufgrund der geringen Zellzahl und avaskulären Natur der Gewebe begrenzt möglich [3]. Bei der Heilung tritt an die Stelle einer geordneten, hierarchischen Struktur ein desorganisiertes fibröses Narbengewebe mit minderwertigen mechanischen Eigenschaften [4]. Aufgrund des eingeschränkten natürlichen Heilungsprozesses stellt eine signifikante Verletzung von Sehnen medizinisch eine große Herausforderung dar [5].

In den meisten Fällen wird versucht die Funktionalität durch den Einsatz eines artifiziellen Ersatzgewebes wiederherzustellen. Neben synthetischen Polymeren wie PVA kommen auch Biomaterialien wie z. B. Kollagen oder rekombinante Spinnenseide für die Gewebekonstruktion in Betracht [6, 7]. Insgesamt gilt jedoch die artifizielle Sehnenreparatur noch als unausgereift, was auf die hohen Anforderungen an derartige Ersatzmaterialien zurückzuführen ist [8]. Entwicklungsbedarf besteht dabei insbesondere im Hinblick auf die Biokompatibilität und die mechanische Stabilität der Ersatzmaterialien. Aufgrund ihrer mechanischen Eigenschaften, ihrer biologischen Abbaubarkeit und Biominerallisierbarkeit stellt die Verwendung von Kollagen und rekombinanter Spinnenseide einen vielversprechenden Ansatz dar [9–11].

Eine weitere Herausforderung liegt in den auftretenden schädigenden Spannungskonzentrationen innerhalb des sprunghaften Übergangsbereichs zwischen Ersatzmaterial und Knochen, welche zum Versagen vieler biomedizinischer Implantate führen [12].

Im natürlichen Sehne-Knochen-Übergang, auch Enthese genannt, wird eine sprunghafte Änderung im Materialverhalten durch eine gezielte graduelle Biominalisation, d. h. durch die Anlagerung von anorganischen Hydroxylapatit-Partikeln an den Kollagenfasern im Sehnenewebe, vermieden [13]. Einen vielversprechenden Lösungsansatz zur Minimierung der Spannungskonzentration zwischen Sehnenersatzmaterial und Knochen liefert ein biomimetischer Nachbau des natürlichen Gewebes mittels Gewebekonstruktion (Tissue Engineering). Ziel des Tissue Engineering ist es dabei, die Eigenschaften des Ersatzmaterials nach natürlichem Vorbild zu entwickeln [6].

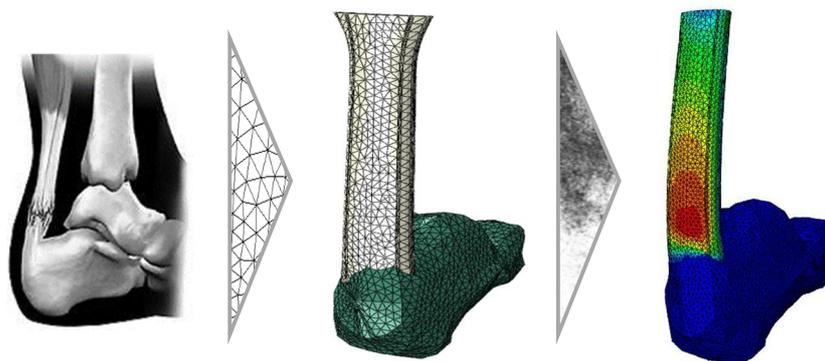


Abbildung 1: Simulationsgestützte Auslegung des Mineralisierungsgradienten im Sehnenersatzmaterial

Im Rahmen des **Forschungsvorhabens „Simulationsgestützte Entwicklung eines graduellen Sehnenersatzmaterials“** (P- Nr. 05266) wurden daher grundlegende Methodiken für die Entwicklung eines neuartigen, auf Biomaterialien basierenden Sehnenersatzgewebes erarbeitet. Die Projektbearbeitung erfolgte durch den **Lehrstuhl für Konstruktionslehre und CAD** unter der Leitung von Prof. Dr.-Ing. Frank Rieg (Sachbearbeiter: Florian Hüter, M.Sc.; Dipl.-Ing. Johannes Wittmann)

in Zusammenarbeit mit dem **Lehrstuhl für Biomaterialien** unter der Leitung von Prof. Dr. Thomas Scheibel (Sachbearbeiterinnen: Kim Koeck, M.Sc.; Vanessa Neubauer, M.Sc.) an der Fakultät für Ingenieurwissenschaften der Universität Bayreuth.

Der Forschungsfokus lag dabei auf der Anbindungsstelle zwischen Sehnenersatzmaterial und Knochen. Das erste Teilziel war, die Materialsteifigkeit des Sehnenersatzmaterials in diesem Bereich nach dem natürlichen Vorbild graduell anzupassen, um so potenziell materialschädigende Spannungskonzentrationen zu vermeiden.

Der hierfür am Lehrstuhl für Biomaterialien im ersten Teilprojekt verfolgte Ansatz ist die Biofabrikation von graduell mineralisierten Biomaterialien aus Kollagen und rekombinanter Spinnenseide. Durch die Integration von Mineralisationspeptiden wurde versucht, eine gezielte Bindung zwischen dem Biopolymer und dem Mineralisierungspartikel zu vermitteln.

Die mechanische Auslegung des graduellen Verlaufs der Materialsteifigkeit im zweiten Teilprojekt wurde durch den Einsatz numerischer Simulationsmethoden am Lehrstuhl für Konstruktionslehre und CAD unterstützt (Abbildung 1). Das zweite Teilziel war daher die Entwicklung geeigneter Ansätze für die simulative Bestimmung des versteifenden Einflusses der Mineralisierung auf das elastische Verhalten sowie die Erarbeitung einer Modellierungsstrategie zur simulativen Abbildung des graduellen Materialverhaltens mithilfe der Finite-Elemente-Analyse (FEA) [14].

Die nachfolgenden Kapitel beschreiben die Forschungsarbeiten und -ergebnisse aus dem zweiten Teilprojekt zur Entwicklung einer FE-Modellierungsstrategie zur simulationsgestützten Auslegung des graduellen Steifigkeitsverhaltens von biomineralisierten Gerüsten. Für die Darstellung der Forschungsarbeiten und -ergebnisse aus dem ersten Teilprojekt sei auf die Dissertationen von Kim Koeck [15] und Vanessa Neubauer [16] verwiesen.

2 Simulation des mechanischen Verhaltens biomineraller Gerüste

Der Einsatz numerischer Simulationen stellt einen wesentlichen Aspekt bei der Entwicklung neuartiger Sehnersatzmaterialien dar. Sie liefern einen wichtigen Beitrag beim Design und der mechanischen Auslegung derartiger Kompositmaterialien. Mithilfe der Finite-Elemente-Analyse lassen sich unter anderem grundlegende Vorhersagen über das mechanische Verhalten treffen und Einflüsse verschiedener Designparameter ermitteln. Durch die simulationsgestützte Charakterisierung unterschiedlicher Materialkombinationen und -verteilungen kann so eine Hilfestellung bei der Materialauswahl gegeben und damit der experimentelle Aufwand bei der Entwicklung des Sehnersatzmaterials reduziert werden.

2.1 Natürliche Gradientenmaterialien als Vorbild

Als Gradientenmaterialien werden Werkstoffe bezeichnet, deren Materialeigenschaften graduell in Abhängigkeit des Ortes variieren [17]. Dies lässt sich beispielsweise bei Verbundwerkstoffen durch eine stetige Änderung der Komponentenzusammensetzung realisieren [18]. Der im natürlichen Sehne-Knochen-Übergang auftretende Mineralisierungsgradient erfüllt eine wichtige Funktion im Hinblick auf das mechanische Verhalten der Sehne. Durch die graduelle Mineralisierung des Gewebes im Übergangsbereich von der unmineralisierten Sehne hin zum Knochen wird die Materialsteifigkeit stetig erhöht [6]. Innerhalb der Enthese steigt die Partikeldichte von Hydroxylapatit im Sehngewebe allmählich von 0 Vol% auf etwa 49 Vol% an [13], wodurch das Elastizitätsmodul von etwa $E = 1,2 \dots 1,5 \text{ GPa}$ sehnenseitig [19] auf $E = 17 \text{ GPa}$ knochenseitig [20] graduell zunimmt. Abbildung 2 zeigt das typische Spannungs-Dehnungs-Diagramm von Sehnen- und Knochenmaterialien, wobei die Steigung der Kurven, welche dem Elastizitätsmodul (E-Modul) entspricht, als Maß für die Materialsteifigkeit betrachtet werden kann. Physiologisch relevante Belastungen liegen typischerweise im Bereich bis etwa $\varepsilon = 4 \%$ Dehnung bzw. einer Nennspannung von etwa $\sigma = 50 \text{ MPa}$ [21].

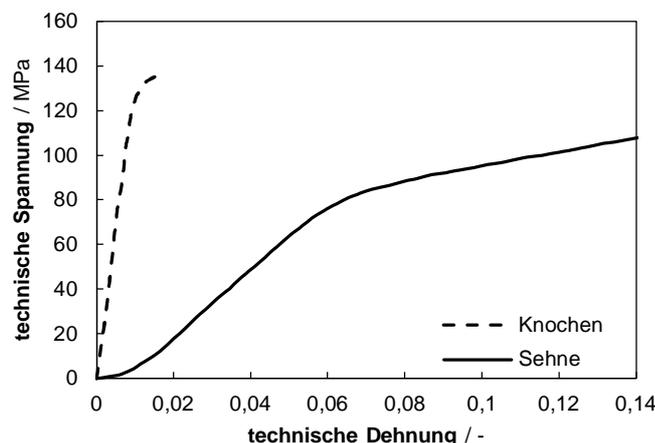


Abbildung 2: Typisches Spannungs-Dehnungs-Diagramm von Sehnen- und Knochenmaterial nach [19]

Durch die graduelle Anpassung der Materialsteifigkeit lassen sich unerwünschte, schädigende Spannungskonzentrationen innerhalb der Enthese vermeiden und dadurch die Stabilität der Sehne-Knochen-Anbindung erhöhen [6]. Wichtig für die Entwicklung des neuartigen Sehnersatzmaterials ist es, diese Zusammenhänge zwischen Materialsteifigkeit und ggf. auftretenden Spannungskonzentrationen im Detail zu verstehen.

Um die Ursache der Spannungskonzentrationen bei einer sprunghaften Änderung in der Materialsteifigkeit klären zu können, wurde ein einfaches Simulationsmodell einer Zugprobe erstellt, wie in Abbildung 3 gezeigt. Die Probe wurde in zwei Hälften aufgeteilt, wobei der einen die elastischen Eigenschaften des unmineralisierten Sehnenmaterials ($E = 1,5 \text{ GPa}$) und der anderen die von Knochengewebe ($E = 17 \text{ GPa}$) zugewiesen wurden. Die Zugprobe wurde mit einer axialen Nennspannung im Mittelteil der Probe von 50 MPa belastet.

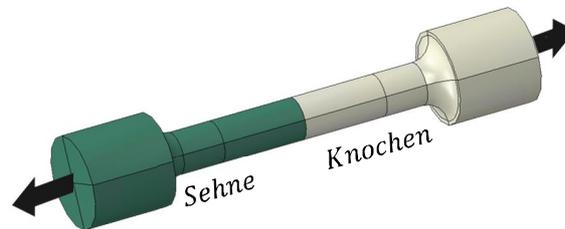


Abbildung 3: FE-Modell einer Rundzugprobe aus Sehnen- und Knochenmaterial mit sprunghaftem Materialübergang

In der Simulation ergab sich eine deutliche Überhöhung der Spannungen am Übergang zwischen den beiden Materialien. Abbildung 4 zeigt die Ergebnisse für die Normalspannung in axialer Richtung (a) sowie für die Schubspannung in radialer Richtung (b) anhand eines Längsquerschnitts des Probekörpers.

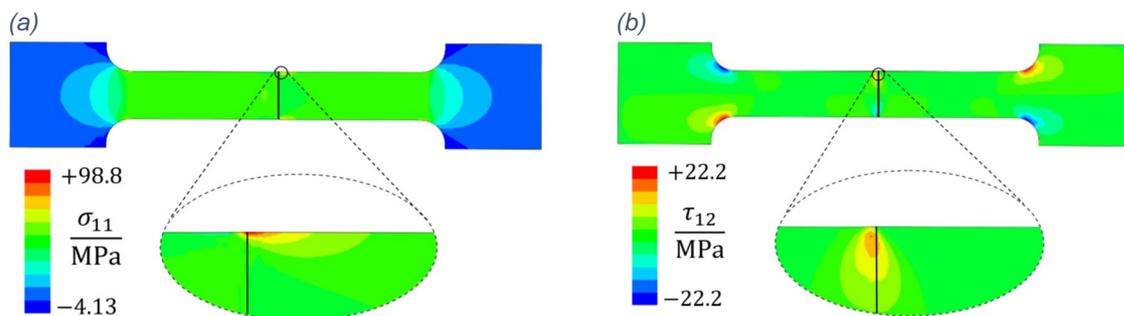


Abbildung 4: Axiale Normalspannung (a) sowie radiale Schubspannung (b) im Bereich des Materialübergangs dargestellt im Längsquerschnitt des Probekörpers

Die sich einstellende maximale axiale Normalspannung beträgt $98,8 \text{ MPa}$ und tritt am Materialübergang unmittelbar unterhalb der Oberfläche der Zugprobe auf. Der Wert ist etwa doppelt so hoch wie die vorgegebene Nennspannung, was einer Spannungsüberhöhung von 98% entspricht. Diese Konzentration der Normalspannung zieht einen materialschädigenden Delaminationseffekt am Materialübergang nach sich. In diesem Bereich befindet sich ferner eine Schubspannungskonzentration am Materialübergang, wie in Abbildung 4 (b) gezeigt. Die auftretenden Schubspannungen lassen sich ursächlich auf das unterschiedliche Querdehnungsverhalten beider Materialien zurückführen: aufgrund der unterschiedlichen elastischen Eigenschaften beider Bereiche stellen sich bei einer Nennzugspannung von 50 MPa unterschiedliche Längsdehnungen ein. Bei ähnlichen Querkontraktionszahlen resultiert daraus ein Unterschied im Querdehnungsverhalten, was im Übergangsbereich zwischen beiden Materialien zu Verspannungen in radialer Richtung führt. Dies erklärt das Auftreten der Schubspannungen entlang der Grenzfläche. Da die Oberfläche der Zugprobe zudem schubspannungsfrei sein muss, bedingt diese Verspannung die Ausbildung hoher Normalspannungen unmittelbar an der Oberfläche der Probe. Dieses Phänomen ist vergleichbar zum Free Edge Effect, welcher bei der Belastung von Mehrschichtverbundmaterialien auftritt und dabei zu einer Delamination der Schichten führt [22]. Im natürlichen Sehne-Knochen-Übergang ändern sich die Materialeigenschaften daher nicht sprunghaft, sondern graduell, um das Auftreten

dieser materialschädigenden Spannungen am Materialübergang zu vermeiden.

Eines der Ziele dieses Projekts war es, diese graduelle Anpassung der Materialsteifigkeit im Design des Sehnersatzmaterials berücksichtigen zu können. Für die Umsetzung wurde ein biomimetischer Nachbau der natürlichen Sehne-Knochen-Anbindung gewählt, bei dem das biogene Grundmaterial (z. B. Spinnenseide oder Kollagen) im Übergangsbereich mit Hydroxylapatit-Partikeln graduell verstärkt wird. Das Design des Gradienten wurde durch den Einsatz numerischer Simulationsmethoden unterstützt. Ein weiteres Ziel hierbei war die Entwicklung eines Ansatzes zur simulativen Bestimmung des versteifenden Einflusses der Mineralisierung auf das elastische Verhalten des Grundmaterials sowie die Erarbeitung einer Modellierungsstrategie zur simulativen Abbildung des graduellen Materialverhaltens mithilfe der Finite-Elemente-Analyse. Anhand der entwickelten Modellierungsstrategie wurden anschließend verschiedene Untersuchungen zur Bestimmung des erforderlichen Mineralisierungsgrads und zur Auslegung des Mineralisierungsgradienten durchgeführt.

2.2 Simulationsstrategie zur Abbildung des graduellen Steifigkeitsverlaufs

Bei der Simulation von Kompositmaterialien müssen sowohl makro- als auch mikromechanische Aspekte berücksichtigt werden. Die Mikrostruktur bestimmt dabei das effektive mechanische Verhalten des Verbundwerkstoffs, wohingegen die Betrachtung des geometrischen Körpers sowie seines Belastungszustands auf makroskopischer Ebene erfolgt [23]. Aufgrund der stark unterschiedlichen Längenskalen von Mikro- und Makroebene ist eine direkte numerische Simulation unter Berücksichtigung aller mikromechanischen Details mit einem sehr hohen Modellierungs- und Rechenaufwand verbunden und daher in der Praxis kaum zielführend einsetzbar [24]. Aus diesem Grund wird ein Homogenisierungskonzept nach Abbildung 5 verfolgt, bei dem die heterogene Mikrostruktur auf makroskopischer Ebene durch ein homogenes Ersatzmaterial abgebildet wird, welches ein aus makroskopischer Sicht äquivalentes elastisches Verhalten aufweist [24].

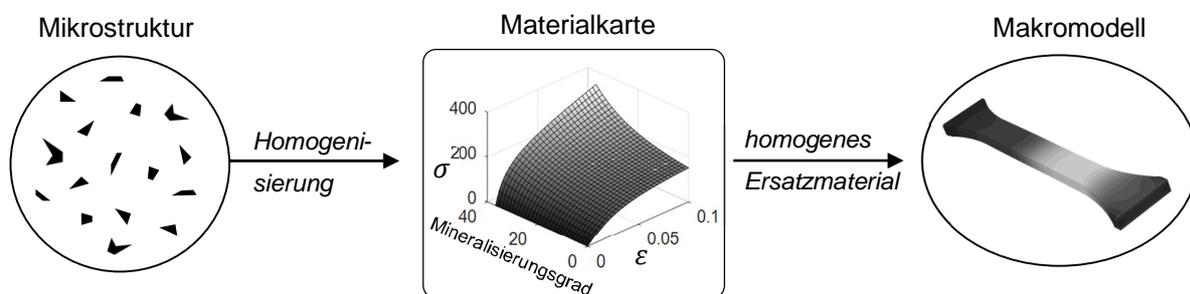


Abbildung 5: Grundlegende Vorgehensweise bei der Modellierung des Gradientenmaterials

Die zur Definition des Ersatzmaterials erforderlichen Materialparameter werden durch Homogenisierung, d. h. Mittelwertbildung, aus den Eigenschaften der heterogenen Mikrostruktur ermittelt [23]. Die effektiven elastischen Eigenschaften des makroskopischen Ersatzmaterials sind dabei von dem Mineralisierungsgrad abhängig. Dieser Zusammenhang lässt sich anschaulich in Form von Materialkarten darstellen. Sie dienen als Datenbasis für die Kalibrierung des nichtlinearen Materialmodells, welches für die simulative Abbildung des effektiven Materialverhaltens des homogenen Ersatzmaterials auf makroskopischer Ebene eingesetzt wird.

2.3 Mikromechanisches Modell zur Bestimmung der effektiven elastischen Materialeigenschaften

Das in Abschnitt 2.2 vorgestellte Homogenisierungskonzept bietet die Möglichkeit einer deutlichen Reduzierung des Modellierungs- und Berechnungsaufwands bei der FE-Simulation gradueller Kompositmaterialien. Im Zuge der Homogenisierung werden die effektiven elastischen Eigen-

schaften des Werkstoffs aus makroskopischer Sicht anhand eines Modells der Mikrostruktur ermittelt, was auch als Mikro-Makro-Übergang bezeichnet wird [23]. Zu diesem Zweck wird ein statistisch repräsentatives Probevolumen der lokalen Mikrostruktur in Form eines FE-Modells abgebildet und bestimmten Belastungszuständen unterworfen, um so das elastische Verhalten zu charakterisieren.

2.3.1 Mikromechanisches Simulationsmodell

2.3.1.1 Definition des repräsentativen Volumenelements

Ausgangspunkt der Homogenisierung bildet das FE-Modell eines statistisch repräsentativen Probevolumens der lokalen Mikrostruktur, welches auch als repräsentatives Volumenelement (RVE) oder als Einheitszelle (EZ) bezeichnet wird. Der Aufbau, d. h. die Anzahl, Verteilung und Form der Heterogenitäten innerhalb der Zelle, müssen dabei statistisch repräsentativ sein [24]. Ist das Grundmaterial, d. h. die Matrix, graduell partikelverstärkt, so verändert sich die Partikeldichte in Abhängigkeit des Orts. Die örtliche Ausdehnung des Partikeldichtegradienten liegt auf makroskopischer Ebene im Millimeterbereich, wohingegen die Betrachtung der lokalen Mikrostruktur im Bereich von wenigen Mikrometern liegt (bei einem Partikeldurchmesser in der Größenordnung von 100 nm). Aufgrund der deutlich unterschiedlichen Längenskalen von Mikro- und Makroebene ändert sich die Partikeldichte aus mikroskopischer Sicht nur relativ langsam, weshalb sie lokal als näherungsweise konstant betrachtet werden kann.

Da mikrostrukturelle Details im Zuge der Mittelwertbildung verloren gehen, können bei der Definition des RVE bestimmte Idealisierungen getroffen werden, wie z. B. die Annahme von Periodizität oder Symmetrie in der geometrischen Struktur. Eine physikalisch exakte Detailmodellierung der Mikrostruktur ist nicht erforderlich, solange das effektive elastische Verhalten hinreichend genau abgebildet wird. Vor diesem Hintergrund wird hier die häufig unterstellte Annahme getroffen, dass die Partikel im Bereich einer bestimmten Partikeldichte im statistischen Mittel näherungsweise gleichverteilt sind [23]. Wird ferner angenommen, dass die lokale Mikrostruktur statistisch gemittelt isotrop ist, so lässt sich die Mikrostruktur lokal als eine periodische Anordnung einer einzelnen Einheitszelle betrachten, wie in Abbildung 6 gezeigt.

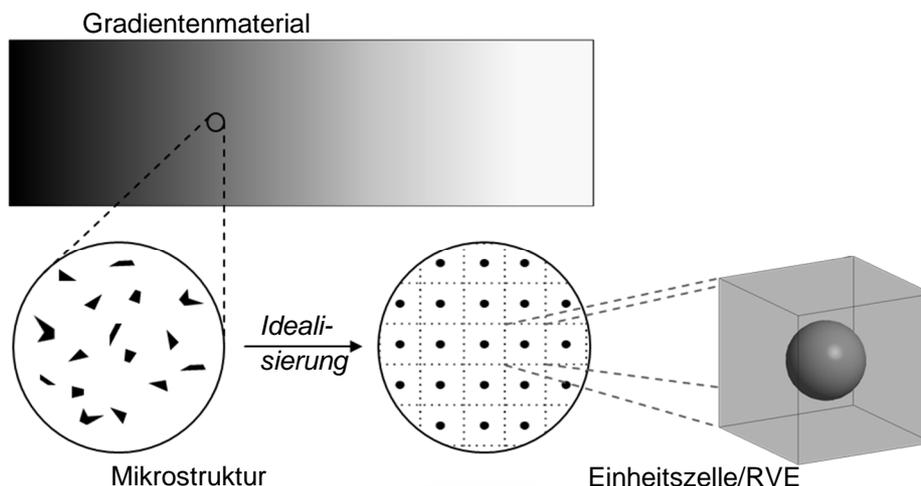


Abbildung 6: Idealisierung der lokalen Mikrostruktur und Definition des repräsentativen Volumenelements

Diese Einheitszelle ist repräsentativ für die lokale Mikrostruktur und kann daher als RVE verwendet werden. Sie besteht aus einer würfelförmigen, nichtlinear-elastischen Biopolymermatrix, in welche ein einzelnes elastisches Hydroxylapatit-Partikel eingelagert ist. Je nach Partikeldichte variiert das Größenverhältnis zwischen Partikeldurchmesser und der Würfelkantenlänge. Die maximal abbildbare Partikeldichte liegt bei 52,36 Vol%, bei der der Partikeldurchmesser der Kantenlänge entspricht. Hinsichtlich der Matrix-Partikel-Interaktion wird angenommen, dass Matrix und

Partikel näherungsweise ideal aneinanderhaften. Das Hydroxylapatit-Partikel wird als isotroper, linear-elastischer Körper betrachtet. Nach [25] liegt die Poisson-Zahl von Hydroxylapatit bei $\nu_{HAP} \approx 0,27$ und das E-Modul in einem Bereich von $E_{HAP} \approx 40 \dots 117$ MPa. Zur Abbildung des Materialverhaltens wird in der Simulation das linear-elastische Hencky-Materialmodell verwendet [26]. Die Biopolymermatrix wird als isotropes, nichtlinear-elastisches Material betrachtet und mithilfe des hyperelastischen Marlow-Materialmodells abgebildet [27]. Grundlage für die Kalibrierung dieses Materialmodells bilden die Messdaten aus typischen Materialprüfversuchen des verwendeten Biopolymers. Abbildung 7 zeigt die Spannungs-Dehnungs-Kurve eines Films aus rekombinanter Spinnenseide im uniaxialen Zugversuch [11]. Mit einer Poisson-Zahl $\nu_{RSS} \approx 0,49$ weist Spinnenseide typischerweise ein näherungsweise inkompressibles Materialverhalten auf [28].

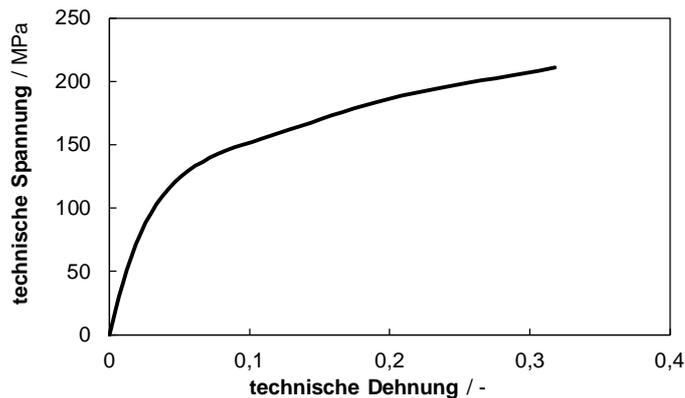


Abbildung 7: Messdaten aus dem uniaxialen Zugversuch rekombinanter Spinnenseide nach [10]

2.3.1.2 Wahl des charakteristischen Belastungszustands und der Randbedingungen

Zur Charakterisierung des effektiven elastischen Verhaltens der Mikrostruktur wird das RVE in der Simulation bestimmten Belastungszuständen unterworfen. Die so ermittelten Spannungs-Dehnungs-Kurven dienen anschließend als Grundlage für die Kalibrierung des Materialmodells des homogenen Ersatzmaterials auf makroskopischer Ebene. In der Praxis haben sich verschiedene Belastungszustände, wie der uniaxiale und äquibiaxiale Zugversuch, zur Charakterisierung nichtlinearen Materialverhaltens etabliert [29]. Im Rahmen des Projekts wurde sich auf das Marlow-Materialmodell festgelegt, um das nichtlineare Materialverhalten des homogenen Ersatzmaterials im Makromodell abzubilden (s. Abschnitt 2.3.2.3). In diesem Fall ist die Spannungs-Dehnungs-Kurve aus dem uniaxialen Zugversuch ausreichend zur Kalibrierung des Materialmodells [27].

Bei der Simulation des uniaxialen Zugversuchs am RVE muss beachtet werden, dass das RVE nicht frei verformt werden kann, sondern nur einen Ausschnitt aus einem periodisch aufgebauten Verbund identischer Einheitszellen darstellt, die sich gegenseitig in ihrer Verformung beeinflussen. Die Randbedingungen in der Simulation müssen demnach die lokale Periodizität der idealisierten Mikrostruktur abbilden, indem sie garantieren, dass sich gegenüberliegende Seitenflächen des RVEs stets nur auf die gleiche Weise verzerren können, wie in Abbildung 8 (a) veranschaulicht. Mathematisch lässt sich diese Periodizität mithilfe einer linearen kinematischen Zwangsbedingung beschreiben [23]:

$$u^+(y) - u^-(y) = \bar{u}^+ - \bar{u}^- \quad (2)$$

Diese Gleichung besagt, dass die Differenz der lokalen Verschiebungen zweier korrespondierender Punkte auf gegenüberliegenden Seitenflächen des RVEs gleich der Differenz der mittleren Verschiebungen beider Seitenflächen sein muss. Aufgrund der Symmetrie im Aufbau der Einheitszelle sowie des uniaxialen Belastungszustands vereinfacht sich diese lokale Periodizitätsbedingung zu einer Planaritäts- und Parallelitätsbedingung. Das bedeutet, dass alle Seitenflächen am

RVE während des Zugversuchs zwangsläufig eben bleiben sowie jeweils gegenüberliegende Seitenflächen parallel zu einander bleiben. Zusätzlich werden die Festhaltung und die Verschiebung in Zugrichtung als Randbedingungen aufgegeben, wie in Abbildung 8 (b) gezeigt.

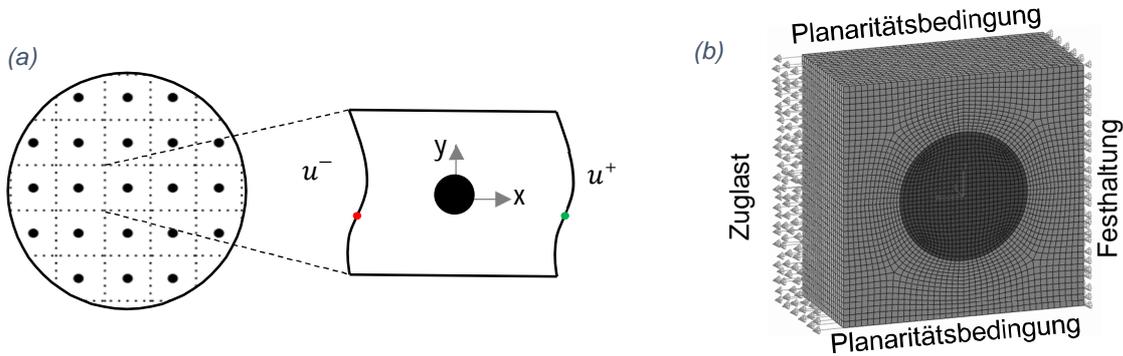


Abbildung 8: Lokale Periodizitätsbedingung (a) und Wahl der Randbedingungen am RVE (b)

2.3.1.3 Bestimmung des effektiven elastischen Verhaltens (Homogenisierung)

Um das effektive elastische Verhalten der Einheitszelle unter Zugbelastung zu bestimmen, werden die Spannungen σ und Dehnungen ε in Zugrichtung über das Volumen der Einheitszelle gemittelt [23]:

$$\bar{\sigma} = \frac{1}{V} \iiint_V \sigma \, dV \quad (3)$$

$$\bar{\varepsilon} = \frac{1}{V} \iiint_V \varepsilon \, dV \quad (4)$$

Aus den gemittelten Werten lässt sich ein Spannungs-Dehnungs-Diagramm zeichnen, welches das mittlere Zugverhalten der Mikrostruktur und damit die effektive Materialsteifigkeit charakterisiert. Aufgrund der Symmetrie im Aufbau des RVE sowie des Belastungszustands und der Tatsache, dass alle Seitenflächen des RVE unter Zuglast eben bleiben, ergibt sich ein symmetrisches Spannungs- und Verzerrungsfeld innerhalb der Einheitszelle. In diesem Fall können obige Volumenintegrale mathematisch in Flächenintegrale überführt und vereinfacht werden [23]:

$$\bar{\sigma} = \frac{1}{V} \iiint_V \sigma \, dV = \frac{1}{A} \iint_A \sigma \, dA = \frac{F}{A} \quad (5)$$

$$\bar{\varepsilon} = \frac{1}{V} \iiint_V \varepsilon \, dV = \frac{1}{V} \iint_A u \, dA = \frac{uA}{V} = \frac{u}{L} \quad (6)$$

Gemäß Gleichung (5) ergibt sich die gemittelte Zugspannung aus dem Quotienten von Zugkraft F und Querschnittsfläche A . Die mittlere Dehnung hingegen berechnet sich nach Gleichung (6) aus dem Quotienten der Längenänderung in Zugrichtung u und der Kantenlänge L im unverformten Zustand. Analog zur Längsdehnung in Zugrichtung kann auch die mittlere Querdehnung $\bar{\varepsilon}_q$ aus dem Quotienten der Längenänderung quer zur Zugrichtung u_q und der Kantenlänge L bestimmt werden. Sie beschreibt, wie stark sich das RVE unter uniaxialer Zugbelastung in lateraler Richtung zusammenzieht. Aus dem Quotienten beider Dehnungen ergibt sich die effektive Poisson-Zahl:

$$\bar{\nu} = -\frac{\bar{\varepsilon}_q}{\bar{\varepsilon}} \quad (7)$$

Durch die Variation des Größenverhältnisses von Partikel und Matrix kann der Einfluss des Mineralisierungsgrads auf das effektive Materialverhalten erfasst werden. Die resultierenden Spannungs-Dehnungs-Diagramme der einzelnen Simulationen können anschließend zusammengefasst und in Form einer Materialkarte dargestellt werden. Eine Materialkarte, wie sie exemplarisch in Abbildung 9 beschrieben ist, bildet somit die Grundlage für die Definition der Materialeigenschaften des homogenen Ersatzmaterials.

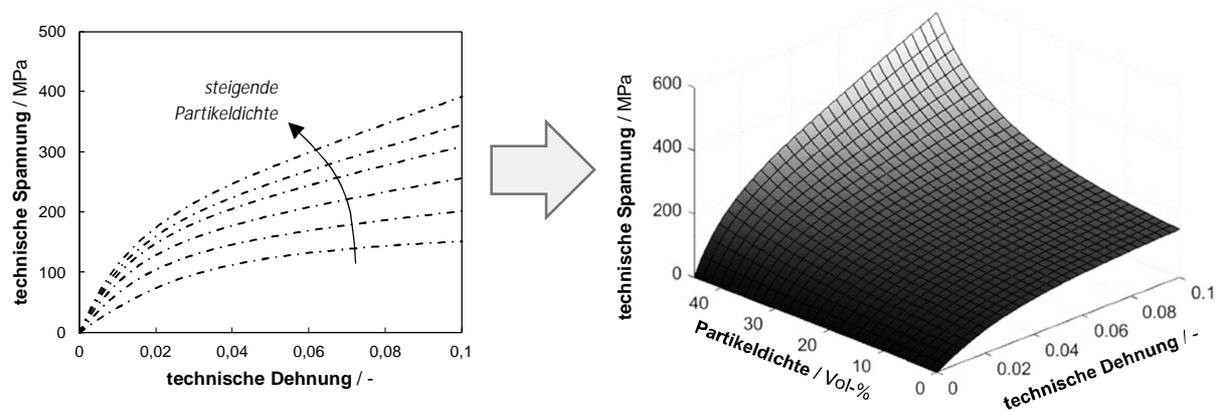


Abbildung 9: Spannungs-Dehnungs-Diagramm der Einheitszelle in Abhängigkeit der Partikeldichte

2.3.2 Umsetzung der Simulationsmethodik

Im Rahmen des Projekts wurde die in Abschnitt 2.3.1 beschriebene Simulationsmethodik zur Bestimmung der effektiven elastischen Eigenschaften softwaretechnisch umgesetzt. Grundlage der Umsetzung bildet die freie FE-Software Z88, welche am Lehrstuhl für Konstruktionslehre und CAD entwickelt wird [30]. Um in der Simulation das nichtlineare Verhalten der Materialien abbilden zu können, wurde der nichtlineare Berechnungskern verwendet und sein Funktionsumfang erweitert. Die Erweiterungen umfassen zwei nichtlineare hyperelastische Materialmodelle sowie eine Schnittstelle zur Definition linearer Zwangsbedingungen zur Abbildung der Periodizitätsbedingung. Zum Abgleich der Implementierungen wurde ein FE-Modell der Einheitszelle mit dem kommerziellen FE-Programm ABAQUS/CAE [31] aufgebaut. Dieses Referenzmodell wurde in Z88 überführt, um die Simulationsergebnisse der Modellrechnungen beider Programme vergleichbar zu machen.

2.3.2.1 Generierung der FE-Netze

Um den Einfluss des Mineralisierungsgrads auf die effektive Materialsteifigkeit zu untersuchen, wurden insgesamt 25 FE-Modelle des RVE mit unterschiedlichen Verhältnissen von Partikeldurchmesser zu Kantenlänge aufgebaut. Mithilfe dieser lassen sich Partikeldichten im Bereich von 0 bis 45 Vol% simulativ abbilden. Die einzelnen FE-Modelle wurden mit ABAQUS vernetzt. Um ein gutes Konvergenzverhalten sowie eine hohe Ergebnisgenauigkeit erzielen zu können, wurden quadratische Hexaederelemente zur Vernetzung verwendet. Da ein Free-Meshing für diesen Elementtyp nicht möglich ist, wurde ein Algorithmus zur Steuerung der Vernetzungsparameter des programminternen Mapped Meshers entwickelt, mit dessen Hilfe ein Hexaedernetz hoher Netzgüte für beliebige Partikelgrößen generiert werden kann. Die Netzgenerierung wurde mithilfe eines Python-Skripts automatisiert, d. h. abhängig von einem vorgegebenen Partikeldichteintervall werden 25 Modelle der Einheitszelle automatisiert aufgebaut und vernetzt. Aufgrund der Symmetrie im Aufbau der Einheitszelle und des uniaxialen Belastungszustands wurden zudem die einzelnen Einheitszellen jeweils zu einem Achtelmodell vereinfacht, um den Berechnungsaufwand in der Simulation reduzieren zu können. Abbildung 10 zeigt exemplarisch vier FE-Netze bei unterschiedlicher Partikeldichte.

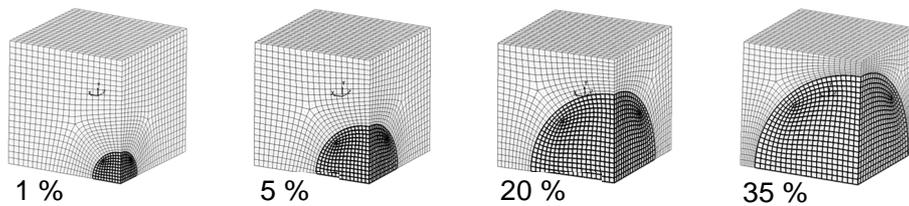


Abbildung 10: FE-Viertelmodell des RVEs bei verschiedenen Partikeldichten

2.3.2.2 Definition der Rand- und Zwangsbedingungen

Zur Abbildung des uniaxialen Belastungszustandes in der Simulation werden auf die Knoten der sechs Seitenflächen der FE-Modelle verschiedene Rand- und Zwangsbedingungen eingepreßt (s. Abschnitt 2.3.1.2). Diese sind in Abbildung 11 zusammengefasst.

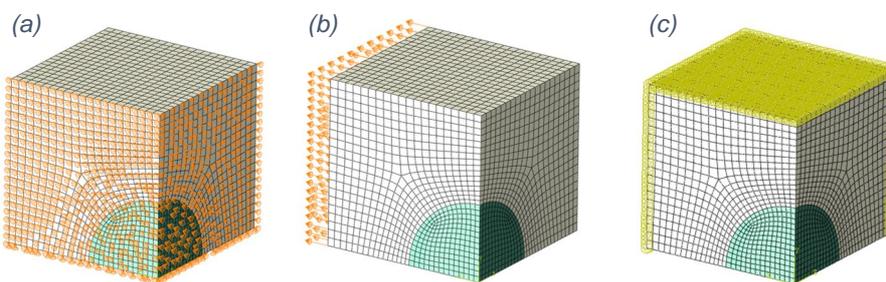


Abbildung 11: Definition der Symmetriebedingungen (a), Zugbelastung (b) und Zwangsbedingungen (c) auf die Seitenflächen des FE-Modells

Die Symmetriebedingungen werden in der Simulation durch das Sperren der Knotenfreiheitsgrade normal zu den Symmetrieebenen abgebildet. Die Zuglast wird als Verschiebungsrandbedingung den Knoten der betroffenen Fläche zugewiesen. Dabei wurde die maximale Verschiebung so gewählt, dass sich das FE-Modell um max. 10 % in Belastungsrichtung streckt. Die Berücksichtigung des elastischen Umfelds bei der Einheitszellensimulation erfolgt über die Definition periodischer Randbedingungen. Im Falle des uniaxialen Belastungszustands folgt aus dem Periodizitätsprinzip, dass jeweils zwei gegenüberliegende Seitenflächen des RVE eben und parallel zueinander bleiben müssen. Diese Parallelitäts- und Planaritätsbedingungen lassen sich mathematisch in Form linearer Zwangsbedingungen formulieren,

$$\mathbf{G}u = g_r \quad (8)$$

die beispielsweise mithilfe der Lagrange-Methode im FE-Gleichungssystem berücksichtigt werden können [32]:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K} & \mathbf{G}^T \\ \mathbf{G} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} u \\ \lambda \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R \\ g_r \end{pmatrix} \quad (9)$$

Zur Berücksichtigung dieser Zwangsbedingungen innerhalb der Simulation wurde der nichtlineare Berechnungskern entsprechend erweitert und eine Schnittstelle zur Definition der Zwangsbedingungen implementiert. Für die Zuweisung der Parallelitäts- und Planaritätsbedingungen auf Knoten der betroffenen Seitenflächen wurde ein Matlab-Skript erstellt, mit dessen Hilfe die knotenbezogenen Zwangsbedingungen für die Schnittstelle des Rechenkerns automatisch generiert werden können.

2.3.2.3 Implementierung nichtlinearer Materialmodelle

Eine Grundvoraussetzung für die erfolgreiche Simulation des mechanischen Verhaltens des mineralisierten Biomaterials ist eine hinreichende Abbildungsgenauigkeit der verwendeten Materialmodelle. Im Rahmen der Methodenentwicklung wurden hierzu verschiedene Materialmodelle, wie Yeoh, Ogden, Arruda-Boyce, Van der Waals [33] und Marlow [27, 34], zur Beschreibung des hyperelastischen Verhaltens der Matrix überprüft und mit exemplarischen Messdaten verglichen. Die beste Übereinstimmung zwischen mathematischem Modell und Messdaten wurde mit dem Materialmodell nach Marlow erzielt. Im Gegensatz zu klassischen hyperelastischen Materialmodellen [33] basiert das Marlow-Modell nicht auf einer spezifischen Ansatzfunktion für die Verzerrungsenergiedichte, sondern auf einer allgemeinen, ansatzfreien konstitutiven Gleichung in Abhängigkeit der ersten Verzerrungsinvarianten [27, 34]. Eine nichtlineare Kurvenregression zur Bestimmung der Modellparameter ist dabei nicht erforderlich. Wie der Vergleich mit den Messdaten zeigt, reproduziert das Materialmodell die zugrundeliegenden Zugversuchsdaten exakt und gibt zudem physikalisch plausible Vorhersagen des hyperelastischen Materialverhaltens in anderen Belastungszuständen [27, 34]. Abbildung 12 zeigt die Ergebnisse bei Verwendung des Marlow-Materialmodells zur Simulation von rekombinanter Spinnenseide sowie von Kollagen unter uniaxialer Zugbelastung.

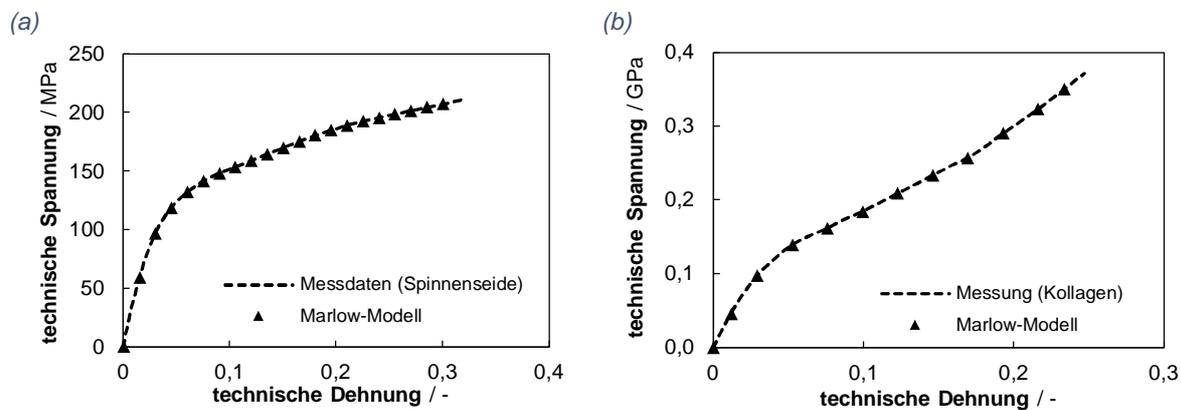


Abbildung 12: Abgleich der Marlow-Modellvorhersage mit Messdaten aus dem uniaxialen Zugversuch von rekombinanter Spinnenseide [11] (a) und Kollagen [35] (b)

Aus diesem Grund wurde das Marlow-Materialmodell für die Simulation des nichtlinearen Materialverhaltens der Biopolymermatrix ausgewählt. Im Zuge einer Literaturrecherche wurde allerdings festgestellt, dass sich die bisherigen wissenschaftlichen Publikationen zum Marlow-Materialmodell primär auf den Spezialfall ideal inkompressibler Materialien beschränken. Da viele Biomaterialien (schwach) kompressibel sind, wurde der konstitutive Ansatz des originären Marlow-Materialmodells im Rahmen dieses Forschungsvorhabens modifiziert und weiterentwickelt. Die Ergebnisse dieser Entwicklung wurden in einem wissenschaftlichen Journal veröffentlicht [27]. Im Zuge der softwaretechnischen Umsetzung der Simulationsmethodik wurde das erweiterte Marlow-Materialmodell in den nichtlinearen Berechnungskern integriert.

Zur Abbildung der elastischen Eigenschaften des Hydroxylapatit-Partikels wurde das isotrope, linear-elastische Hencky-Materialmodell verwendet. Dieses Modell benötigt als Modellparameter den E-Modul sowie die Poisson-Zahl des Partikelmaterials. Eine ausführliche Darstellung der zugrunde liegenden mathematischen Zusammenhänge wird in [26] gegeben. Im Rahmen der Weiterentwicklung des nichtlinearen Berechnungskerns wurde das Hencky-Modell ebenfalls programmtechnisch umgesetzt.

2.3.2.4 Erweiterung der Elementformulierung

Eine Besonderheit vieler für den Sehnensatz in Frage kommender Biomaterialien ist ihr schwach kompressibles bzw. nahezu inkompressibles Materialverhalten. Dabei liegt die Poisson-Zahl dieser Materialien nahe am Wert $\nu = 0,5$ und stellt somit annähernd den Grenzfall idealer Inkompressibilität dar [36]. Inkompressibilität bedeutet, dass sich der elastische Körper unter Belastung zwar verformt, sich sein Volumen jedoch nicht ändert [37]. Mathematisch lässt sich dies als kinematische Zwangsbedingung für das Verschiebungsfeld verstehen, welche besagt, dass die Volumendehnung des Körpers ε_V null ist [36]:

$$\varepsilon_V = 0 \quad (10)$$

Als Konsequenz daraus ergibt sich: Wird ein inkompressibler Körper von allen Seiten gleichmäßig mit einem homogenen Druck belastet, so komprimiert bzw. verformt sich der Körper nicht, egal wie hoch der absolute Betrag der Druckrandbedingung ist. Druck und Verformung sind demnach voneinander entkoppelt. Bei kompressiblen Körpern hingegen besteht ein konstitutiver Zusammenhang zwischen dem Druck p und der Volumendehnung des Körpers, welcher formal wie folgt formuliert werden kann [36]:

$$\varepsilon_V = \frac{p}{\kappa} \quad (11)$$

Dabei bezeichnet κ das Kompressionsmodul des Materials, welches für $\nu \rightarrow 0,5$ gegen Unendlich strebt und somit die Volumendehnung vom Druck p entkoppelt, vgl. Gl. (10). Für $\nu < 0,5$ ist das Kompressionsmodul endlich, der Druck sowie die deviatorische Spannungen lassen sich eindeutig aus den Verformungen des Körpers berechnen [36]. Die klassische Elementformulierung für kompressible Körper beruht daher auf einem Einfeldansatz, der alleine auf einer Diskretisierung des Verschiebungsfelds basiert [38].

Mit steigendem Kompressionsmodul wird der Druck zunehmend vom Verschiebungsfeld entkoppelt, was zu numerischen Schwierigkeiten bei der Verwendung der klassischen Elementformulierung führt [45]. Dies äußert sich in sogenannten Locking-Phänomenen, d. h. eine schlechte Konditionierung des FE-Gleichungssystems sowie das Auftreten von Konvergenzproblemen. Abhilfe hierfür bietet die Verwendung von nichtklassischen Elementformulierungen, welche auf einem Mehrfeldansatz beruhen [37, 39]. Im Zweifeldansatz wird neben dem Verschiebungsfeld außerdem auch das Druckfeld als unabhängige Variable eingeführt und diskretisiert [37]. Diese Elementformulierung wird auch als Hybrid-Formulierung bezeichnet [40] und enthält neben dem Interpolationsansatz für das Verschiebungsfeld auch einen Interpolationsansatz für das Druckfeld. Typischerweise wird die Interpolationsordnung für das Druckfeld mindestens um eins niedriger als für das Verschiebungsfeld gewählt, um die inf-sup-Stabilitätsbedingung erfüllen zu können [41].

Im Zuge der softwaretechnischen Umsetzung der Simulationsmethodik wurden drei Hybrid-Elementformulierungen in den nichtlinearen Berechnungskern integriert, welche in Abbildung 13 dargestellt sind. In allen drei Fällen wurde ein konstanter Ansatz für das Druckfeld gewählt, der Ansatz für das Verschiebungsfeld ist linear bzw. quadratisch.

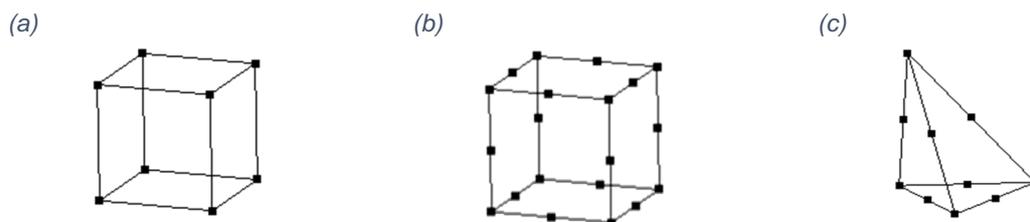


Abbildung 13: Implementierte Hybridelemente: Q_1P_0 (a), Q_2P_0 (b) und P_2P_0 (c) nach [41]

2.3.2.5 Automatisierung des Berechnungsablaufs

Zur Automatisierung der RVE-Simulation wurde ein Rahmenprogramm in Form eines Matlab-Skripts geschrieben, welches den Modellaufbau, die Ansteuerung des Berechnungskerns Z88 sowie die Aufbereitung und Visualisierung der Simulationsergebnisse übernimmt. Hierzu übergibt der Anwender die Materialdaten für Partikel und Matrix sowie Steuerparameter für den Rechenkern in Form einer Excel-Eingabedatei. Die Materialeigenschaften werden automatisch den entsprechenden Elementsets der 25 vordefinierten FE-Netze der Einheitszelle zugewiesen. Anschließend erfolgt die Definition der Rand- und Zwangsbedingungen für die Simulation des uniaxialen Belastungszustands. Die fertigen FE-Modelle werden nacheinander an den Berechnungskern übergeben und die Berechnung gestartet. Am Ende jedes Berechnungslaufs werden die Simulationsergebnisse automatisch ausgewertet und graphisch aufbereitet. Dabei werden das effektive Spannungs-Dehnungs-Diagramm sowie der Verlauf der Querdehnung gemäß des in Abschnitt 2.3.1.3 beschriebenen Vorgehens für jede einzelne Einheitszelle ausgewertet und anschließend in Abhängigkeit der Partikeldichte in Form einer Materialkarte aufgetragen.

2.3.3 Untersuchungen am Mikromodell

Die im Rahmen der RVE-Simulationen ermittelten effektiven elastischen Eigenschaften dienen als Grundlage für die Definition des Materialverhaltens auf makroskopischer Ebene. Abbildung 14 zeigt exemplarisch die Simulationsergebnisse für eine Kombination rekombinanter Spinnenseide mit Hydroxylapatit. Zur Charakterisierung der elastischen Eigenschaften der Spinnenseide wurde die Spannungs-Dehnungs-Kurve nach Abbildung 7 und eine Poissonzahl von $\nu_{RSS} = 0,49$ verwendet. Der E-Modul von Hydroxylapatit wurde auf einen Wert von $E_{HAP} = 60$ GPa gesetzt, der Wert der Poisson-Zahl auf $\nu_{HAP} = 0,27$.

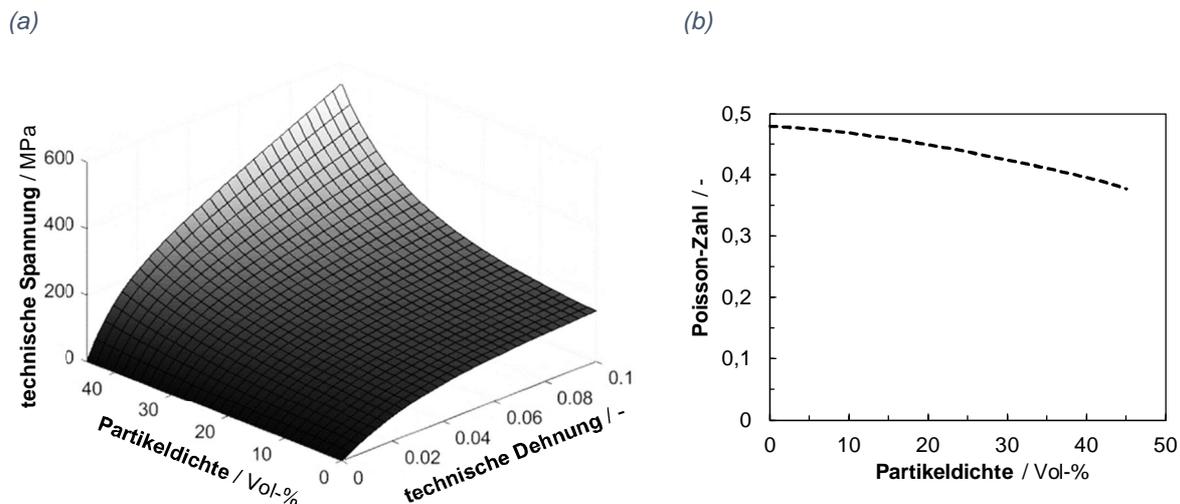


Abbildung 14: Spannungs-Dehnungs-Diagramm (a) und effektive Poisson-Zahl (b) in Abhängigkeit des Mineralisierungsgrads

In Abbildung 14 (a) wird der Einfluss der Mineralisierung deutlich. Mit zunehmendem Mineralisierungsgrad steigt die Materialsteifigkeit der Einheitszelle. Im Vergleich zur unmineralisierten Spinnenseide erhöht sich die Anfangssteigung der Zugkurve um einen Faktor von 3,7 bei einem Mineralisierungsgrad von 45 % und liegt mit 17,5 GPa im Bereich des E-Moduls von kortikalem Knochen [20]. Abbildung 14 (b) zeigt ferner den resultierenden Verlauf der effektiven Poisson-Zahl in Abhängigkeit der Partikeldichte. Bei niedrigen Partikeldichten überwiegt das nahezu inkompressible Verhalten der Spinnenseidenmatrix, wohingegen sich die kompressiblen Eigenschaften des Partikels mit zunehmender Partikeldichte durchsetzen.

Abbildung 14 (a) zeigt deutlich einen degressiven Verlauf im Spannungs-Dehnungs-Verhalten. Mit zunehmender Belastung des Materials sinkt die Steigung der Spannungs-Dehnungs-Kurve bei gegebener Partikeldichte. Die Materialsteifigkeit ist demnach nicht nur von der Partikeldichte, sondern auch von der anliegenden Belastung abhängig. Ein eindeutiges E-Modul zur Charakterisierung der Materialsteifigkeit kann daher nicht unmittelbar angegeben werden. Vielmehr kann in jedem Punkt entlang der Zugkurve, charakterisiert durch Dehnung und Spannung, ein Sekanten-E-Modul bestimmt werden:

$$E_s = \frac{\sigma}{\varepsilon} \quad (12)$$

Abbildung 15 zeigt das Sekanten-E-Modul in Abhängigkeit der Partikeldichte bei unterschiedlichen Zugspannungen. Wie in Abschnitt 2.1 beschrieben, liegt die physiologische Belastung in der Größe von etwa 50 MPa, weshalb hier das Sekanten-E-Modul bei dieser Belastung zur Charakterisierung der Materialsteifigkeit verwendet wird.

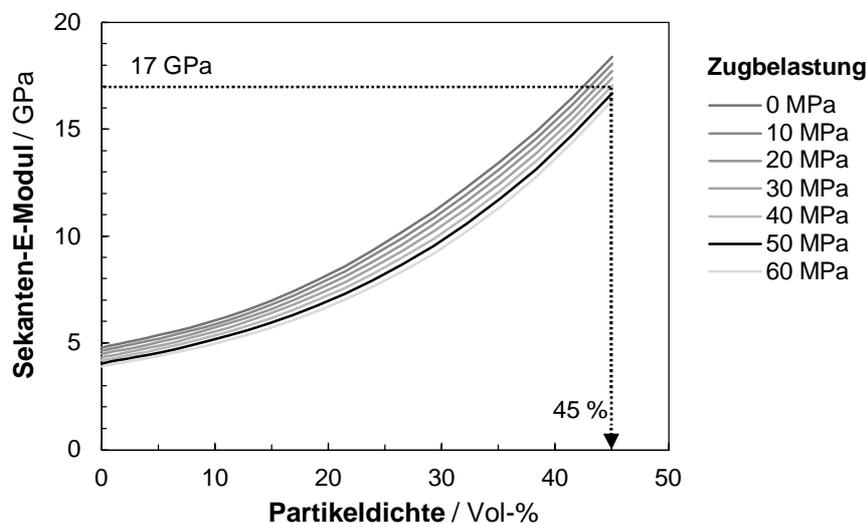


Abbildung 15: Sekanten-E-Modul in Abhängigkeit der Partikeldichte bei unterschiedlichen Belastungen

Um Spannungsüberhöhungen an der Anbindungsstelle zwischen Sehnenersatzmaterial und Knochen zu vermeiden, sollten die Materialsteifigkeiten von mineralisierter Spinnenseide und dem angrenzenden Knochengewebe möglichst ähnlich sein. Der Zielwert liegt bei etwa $E = 17$ GPa (vgl. Abschnitt 2.1). Der zum Erreichen dieser Materialsteifigkeit erforderliche Mineralisierungsgrad lässt sich anhand von Abbildung 15 bestimmen. Bei einer charakteristischen Belastung von 50 MPa liegt die erforderliche Partikeldichte bei ca. 45 %, was größenordnungsmäßig dem Mineralisierungsgrad von natürlichem Knochengewebe entspricht (vgl. Abschnitt 2.1). Nach Abbildung 14 (b) ergibt sich ferner für die dazugehörige effektive Poisson-Zahl ein Wert von $\nu \approx 0,37$, der in den typischen Bereich 0,15 ... 0,45 von natürlichem Knochengewebe fällt [42].

2.4 Makroskopisches Ersatzmodell des Gradientenmaterials

Auf makroskopischer Ebene wird die heterogene Mikrostruktur des Gradientenmaterials durch ein homogenes Ersatzmaterial abgebildet, dessen elastische Eigenschaften sich graduell in Abhängigkeit des Ortes ändern. Die Ergebnisse der RVE-Simulation nach Abbildung 14 bilden die Grundlage für die Definition der Materialeigenschaften des homogenen Ersatzmaterials. Grundsätzlich gibt es verschiedene Modellierungsansätze, um die sich örtlich kontinuierlich ändernden Materialeigenschaften innerhalb des FE-Modells abbilden zu können. Im Rahmen des Projekts wurde eine Modellierungsstrategie umgesetzt, welche in den nachfolgenden Abschnitten näher

beschrieben wird. Mithilfe der entwickelten Simulationsmethode wurden verschiedene Untersuchungen an einem einfachen FE-Modell durchgeführt und daraus Hilfestellungen beim Design des Mineralisierungsgradienten abgeleitet.

2.4.1 Makromechanisches Simulationsmodell

Die Simulationsmethodik zur Abbildung des Gradientenmaterials auf makroskopischer Ebene umfasst zwei zentrale Bestandteile:

- ein Materialmodell, bei welchem das elastische Verhalten abhängig von der Partikeldichte eingestellt werden kann,
- eine Strategie zur Vorgabe des graduellen Partikeldichteverlaufs, der über das Materialmodell die Materialeigenschaften im FE-Modell ortsabhängig steuert.

Zur Abbildung des partikeldichteabhängigen, nichtlinear-elastischen Materialverhaltens wird erneut das Marlow-Materialmodell aus Abschnitt 2.3.2.3 verwendet. Grundlage für die Kalibrierung des Materialmodells bildet die Materialkarte nach Abbildung 14. Dabei werden aus der Materialkarte die Spannungs-Dehnungs-Kurven für mehrere diskrete Partikeldichten extrahiert und in Form einer Kurvenschar im Materialmodell hinterlegt. Anschließend wird das Materialmodell dem gesamten FE-Netz zugewiesen. Abhängig davon, welcher konkrete Partikeldichtewert an einer bestimmten Position im FE-Modell vorliegt, wird die dazugehörige Spannungs-Dehnungs-Kurve modellintern aus der hinterlegten Kurvenschar durch lineare Interpolation ermittelt. Auf diese Weise werden die partikeldichteabhängigen, effektiven elastischen Eigenschaften der heterogenen Mikrostruktur auf das homogene Ersatzmaterial übertragen.

Die Vorgabe des ortsabhängigen Partikeldichteverlaufs erfolgt knotenweise. Hierzu wird in jedem Knoten des FE-Modells ein Wert für die Partikeldichte vorgegeben. Der lokale Partikeldichteverlauf innerhalb jedes Finiten Elements ergibt sich durch die Interpolation der Knotenwerte mithilfe der Formfunktionen des jeweiligen Elementtyps. Auf diese Weise kann eine sich kontinuierlich ändernde Partikeldichteverteilung im FE-Modell des Gradientenmaterials abgebildet werden. Bei der Simulation des Gradientenmaterials ist der einzuprägende Partikeldichtegradient meist unbekannt. Vielmehr wird i. d. R. ein bestimmter Verlauf für die Materialsteifigkeit angestrebt. Die dazugehörige Partikeldichteverteilung kann anhand von Abbildung 15 abgeschätzt werden. Hierzu wird der angestrebte Materialsteifigkeitsgradient in Form des Verlaufs für das Sekanten-E-Modul vorgegeben. Dieser lässt sich mittels Abbildung 15 in eine korrespondierende Partikeldichteverteilung umrechnen, welche anschließend für die FE-Simulation verwendet wird. Das Vorgehen ist in Abbildung 16 veranschaulicht.

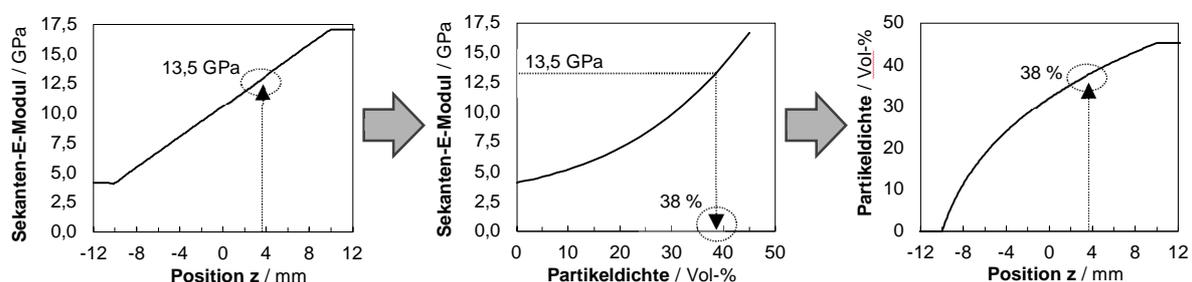


Abbildung 16: Bestimmung des Partikeldichteverlaufs bei vorgegebenem Steifigkeitsgradienten

2.4.2 Umsetzung der Simulationsmethodik

Im Rahmen des Projekts wurde die in Abschnitt 2.4.1 beschriebene Simulationsmethodik zur Abbildung des Gradientenmaterials auf makroskopischer Ebene softwaretechnisch mit Z88 umgesetzt. Hierzu wurde der nichtlineare Berechnungskern entsprechend erweitert. Zum einen wurde

eine Schnittstelle zur Vorgabe der örtlichen Partikeldichteverteilung an den Knoten des FE-Modells implementiert. Zum anderen wurde das Marlow-Materialmodell erweitert, um ein partikeldichteabhängiges Materialverhalten berücksichtigen zu können. In der Eingabedatei des Materialmodells kann das Spannungs-Dehnungs-Verhalten in Abhängigkeit der Partikeldichte in tabellarischer Form hinterlegt werden. Bei der Simulation werden die Knotenpartikeldichten mithilfe der Formfunktionen elementweise interpoliert, um den lokalen Partikeldichteverlauf zu bestimmen. Anhand des lokalen Partikeldichteverlaufs werden anschließend die elastischen Eigenschaften innerhalb jedes Finiten Elements mithilfe des partikeldichteabhängige Marlow-Materialmodells abgebildet. Um die Angabe der Partikeldichte in den Knoten zu vereinfachen, wurden zwei Matlab-Skripte erstellt. Mithilfe des ersten Skripts können aus einem vorgegebenen Funktionsverlauf für die Partikeldichte die Knotenpartikeldichten automatisch bestimmt und für die Z88-Schnittstelle lesbar ausgeschrieben werden. Alternativ dazu kann auch ein Funktionsverlauf für die Materialsteifigkeit vorgegeben werden. Mithilfe des zweiten Skripts lässt sich dieser auf Basis Daten aus Abbildung 15 in einen korrespondierenden Partikeldichteverlauf konvertieren.

2.4.3 Untersuchungen am Makromodell

Mithilfe der entwickelten Simulationsmethode wurden verschiedene Untersuchungen durchgeführt, um so Hilfestellungen beim Design des Mineralisierungsgradienten ableiten zu können. Hierzu wurden verschiedene Verläufe des Mineralisierungsgradienten analysiert und hinsichtlich ihrer Auswirkung auf die resultierenden Spannungsverläufe verglichen und bewertet. Dabei wurden der Einfluss der Kurvenform sowie der der Steilheit des Gradienten anhand einer einfachen Zugprobe untersucht. Die in Abbildung 17 abgebildete Rundprobe besitzt in der Mitte einen Durchmesser von 5 mm. Der Bereich mit sich graduell änderndem Materialverhalten erstreckt sich auf einer Länge von 20 mm. Das FE-Modell wurde mit quadratischen Hexaederelementen vernetzt und mit einer Nennspannung von 50 MPa auf Zug belastet.

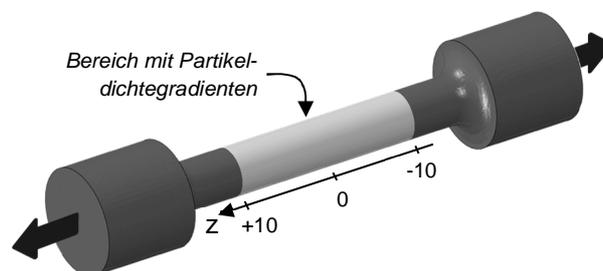


Abbildung 17: Rundzugprobe zur Untersuchung unterschiedlicher Materialsteifigkeitsverläufe

In einer ersten Untersuchung wurde die Kurvenform des Steifigkeitsgradienten variiert. Hierbei wurden Gradienten mit linearem und S-förmigen Sekanten-E-Modul-Verlauf sowie linearem und S-förmigen Partikeldichteverlauf betrachtet. Zur Kalibrierung des nichtlinear-elastischen Marlow-Materialmodells diente die Materialkarte nach Abbildung 14. Die Ergebnisse der Untersuchung sind in Abbildung 18 dargestellt. Durch die Gegenüberstellung von Sekanten-E-Modul- und dazugehörigen Partikeldichteverläufen wird deutlich, dass beide Größen nicht linear miteinander korrelieren. Ein lineare Partikeldichteverteilung resultiert in einem nahezu parabolischen Verlauf des Sekanten-E-Moduls. Umgekehrt wird ein linearer Sekanten-E-Modul-Verlauf durch einen näherungsweise wurzelförmigen Partikeldichtegradienten hervorgerufen. Die Materialsteifigkeit steigt folglich etwa quadratisch und damit überproportional mit der Partikeldichte an.

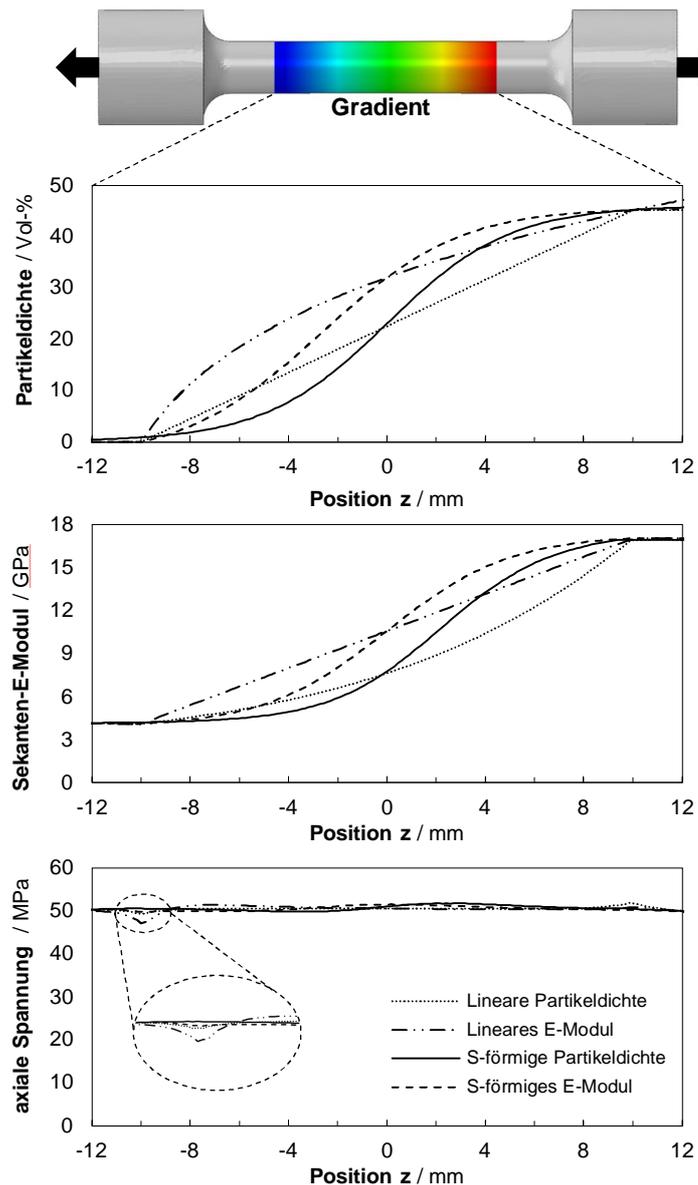


Abbildung 18: Gegenüberstellung verschiedener Gradientenverläufe und Vergleich der resultierenden Spannung in axialer Richtung

Die Auswertung der Oberflächenspannung in axialer Richtung zeigt in allen vier Fällen einen sehr gleichmäßigen Verlauf. Anders als beim sprunghaften Materialübergang aus Abschnitt 2.1 werden durch die graduelle Anpassung der Materialsteifigkeit materialschädigende Spannungsspitzen vermieden. Die maximale Spannungsüberhöhung liegt unter 5 % und tritt beim Gradienten mit linearem Sekanten-E-Modul-Verlauf im Übergang vom konstanten zum graduellen Steifigkeitsbereich auf. Beim S-förmigen Verlauf des Sekanten-E-Moduls hingegen ist keine Spannungsspitze zu finden. Dies lässt darauf schließen, dass Knicke im Steifigkeitsverlauf gewisse Spannungsüberhöhungen bedingen können, weshalb glatte Steifigkeitsverläufe empfehlenswert sind. Abgesehen davon zeigt die Untersuchung jedoch, dass die Kurvenform des Gradienten keinen nennenswerten Einfluss auf die Spannungen im graduellen Übergangsbereich hat. Daher kann der Verlauf des Partikeldichtegradienten entsprechend der Herstellungsmöglichkeiten gewählt

werden. Einen entscheidenden Einfluss auf die Spannungen hat vielmehr die Breite bzw. die Steilheit des Gradienten. Je steiler der Gradient, desto sprunghafter der Übergang in der Materialsteifigkeit und damit die materialschädigenden Spannungsspitzen. Um diesen Effekt zu untersuchen, wurden sechs Gradienten mit S-förmigem Sekanten-E-Modul-Verlauf unterschiedlicher Steilheit simuliert und hinsichtlich der resultierenden Spannungsverläufe verglichen. Die Ergebnisse der Untersuchung sind in Abbildung 19 zusammengefasst.

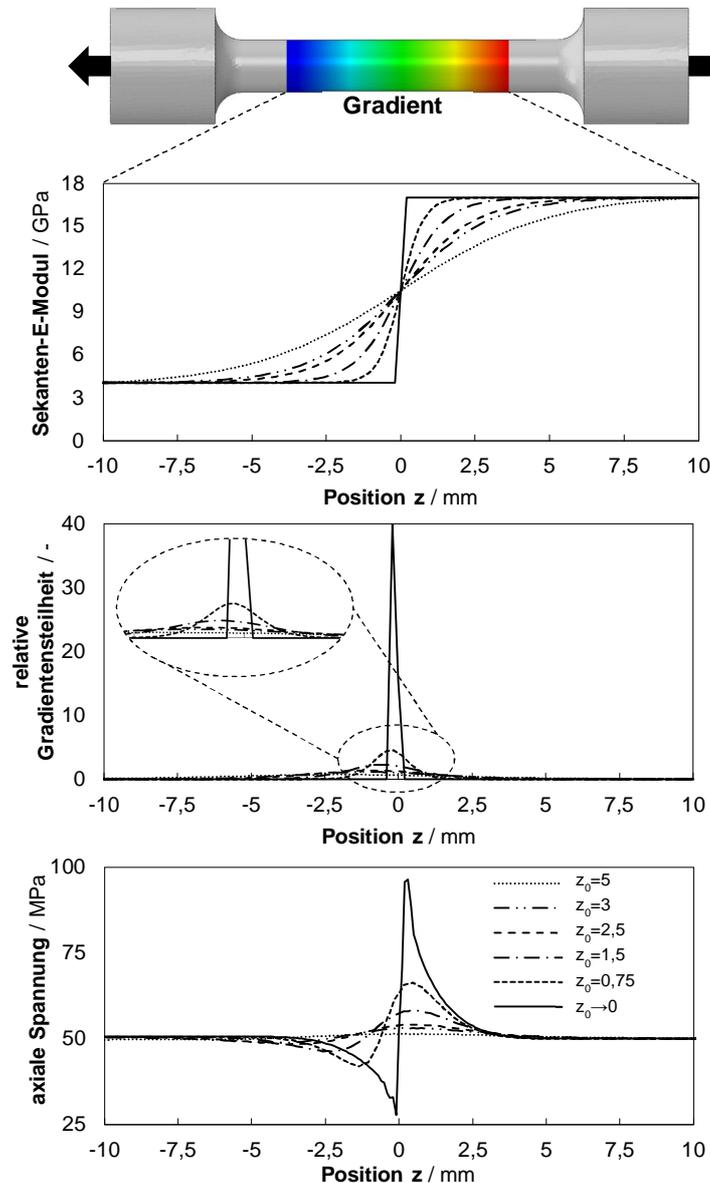


Abbildung 19: Gegenüberstellung unterschiedlicher steiler Gradientenverläufe und Vergleich der resultierenden Spannung in axialer Richtung

Der S-förmige Steifigkeitsverlauf wurde formelmäßig mit der logistischen Funktion beschrieben:

$$E_s = E_{s,min} + \frac{E_{s,max} - E_{s,min}}{1 + e^{-2 \cdot z/z_0}} \quad (13)$$

Hierbei bezeichnen $E_{s,min}$ und $E_{s,max}$ den unteren bzw. oberen Grenzwert des Sekanten-E-Moduls. Der Parameter z_0 ist ein Maß für die Breite des Gradienten und steuert damit seine Steilheit, denn für die Steigung im Punkt $z = 0$ gilt:

$$\left. \frac{dE_s}{dz} \right|_{z=0} = \frac{E_{s,max} - E_{s,min}}{2 \cdot z_0} \quad (14)$$

Je kleiner z_0 , desto steiler der Gradient. Um die lokale Steilheit des Steifigkeitsgradienten quantitativ beschreiben zu können, wurde die relative Gradientensteilheit als dimensionslose Kenngröße eingeführt, die wie folgt definiert ist:

$$s_{rel} = \frac{D}{E_s} \frac{dE_s}{dz} \quad (15)$$

Dabei bezeichnet D den Durchmesser der Zugprobe, der auf die absolute Materialsteifigkeit E_s bezogen wird. Die Verwendung dieses dimensionslosen Maßes macht die Gradientensteilheit für unterschiedliche absolute Steifigkeiten und Probenabmessungen vergleichbar.

Die Auswertung der Normalspannung in axialer Richtung zeigt deutlich den Einfluss der Gradientensteilheit auf den Spannungsverlauf. Je kleiner z_0 , desto steiler der Steifigkeitsgradient, was zu ausgeprägten, materialschädigenden Spannungskonzentrationen führt. Nicht die Kurvenform, sondern die Steilheit des Gradienten ist entscheidend für die Spannungsverteilung im Übergangsbereich. Um die Korrelation zwischen Gradientensteilheit und Spannungsspitze zu bestimmen, ist in Abbildung 20 die maximale Spannungsüberhöhung relativ zur Nennzugspannung von 50 MPa über der relativen Gradientensteilheit aufgetragen. Es ergibt sich ein näherungsweise linearer Zusammenhang. Damit die lokale Spannungsüberhöhung einen Wert von 10 % nicht überschreitet, sollte die relative Gradientensteilheit $s_{rel} < 1$ gewählt werden.

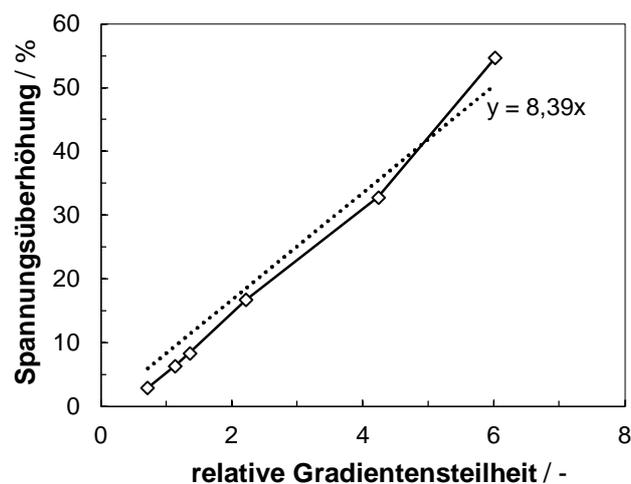


Abbildung 20: Korrelation zwischen Spannungsüberhöhung und relativer Gradientensteilheit

2.4.4 Anwendungsbeispiel: Achilles-Sehnenersatz

Bei den bisherigen Untersuchungen aus Abschnitt 2.4.3 wurde ein geometrisch einfaches Modell verwendet, um eindeutige Zusammenhänge zwischen Mineralisierungsgradienten und Steifigkeits- bzw. Spannungsverteilung bestimmen zu können. Im Folgenden wird die praktische Anwendbarkeit der entwickelten Simulationsmethodik anhand realitätsnaher Geometrien demonstriert. Hierfür wird exemplarisch der Ersatz einer Achillessehne betrachtet. Im Fokus der Simulation steht

der Übergang zwischen dem Sehnenersatzmaterial und dem Fersenknochen, wobei davon ausgegangen wurde, dass beide ideal miteinander verbunden (verwachsen) sind. Abbildung 21 zeigt das FE-Modell aus quadratischen Tetraederelementen.

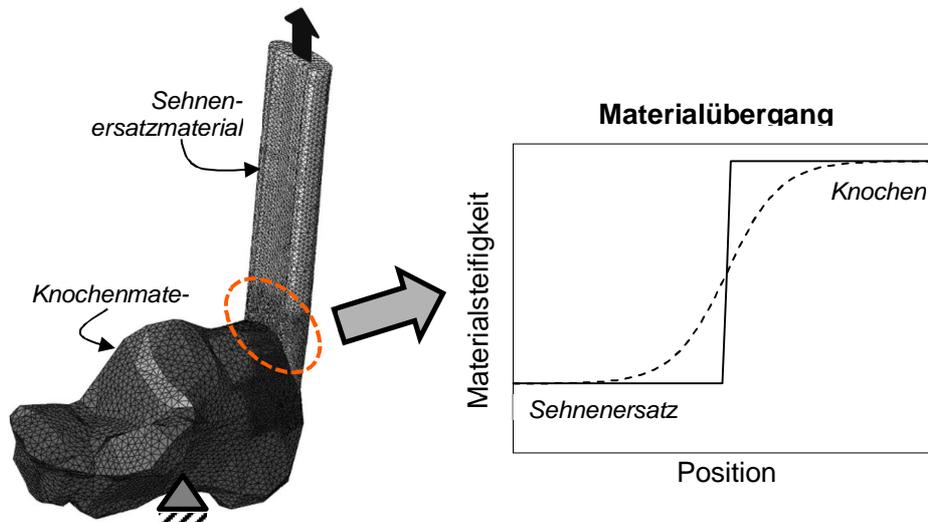


Abbildung 21: FE-Modell des Übergangs vom Sehnenersatzmaterial zum Knochen mit sprunghafter bzw. gradueller Steifigkeitsänderung

Im Übergangsbereich ist die Netzfeinheit erhöht, um die lokale Spannungsverteilung ausreichend genau abbilden zu können. Das Knochengewebe wird als linear-elastisch betrachtet mit einem E-Modul von 17 GPa und einer Poisson-Zahl von 0,27. Zur Definition des Materialverhaltens des Sehnenersatzgewebes dient die Materialkarte nach Abbildung 14. Der Übergangsbereich wurde zum einen mit sprunghafter Steifigkeitserhöhung ausgeführt und zum anderen mit einer allmählichen Anpassung der Materialsteifigkeit durch eine graduelle Erhöhung der Partikeldichte auf 45 Vol%. Das Modell ist am oberen Ende des Sehnenersatzmaterials mit einer Nennbelastung von 50 MPa beansprucht und am Fersenknochen fest eingespannt. Die Ergebnisse der Simulation mit sprunghaftem Steifigkeitsverlauf sind in Abbildung 22 dargestellt. Der Spannungsverlauf weist eine deutliche Spannungsüberhöhung von über 100 % am Übergang vom Sehnenersatzmaterial zum Knochen auf.

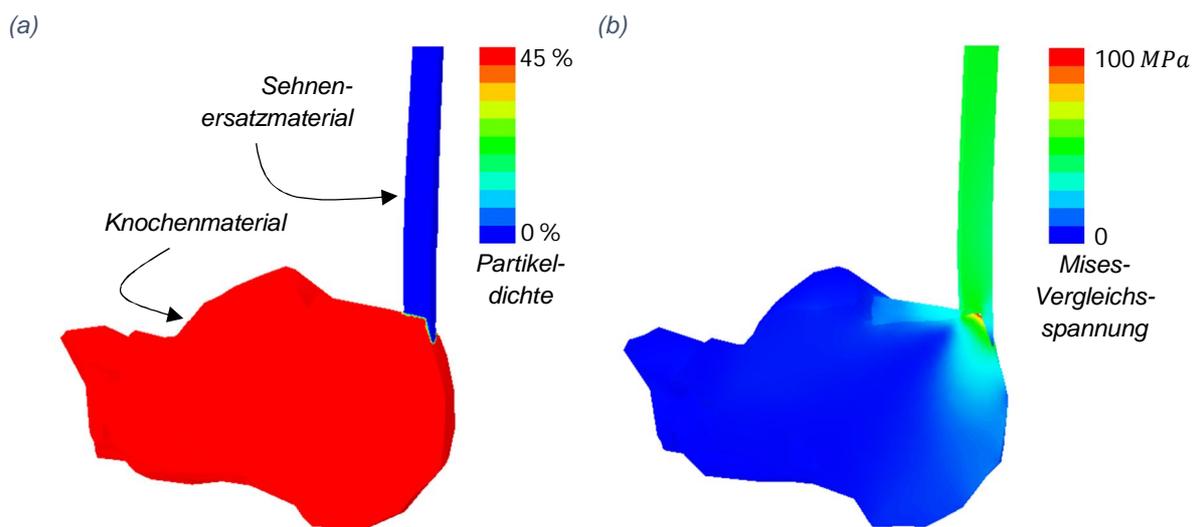


Abbildung 22: FE-Modell mit sprunghafter Steifigkeitsänderung: Materialsteifigkeit (a) und Spannungsfeld (b)

Diese Spannungskonzentration im Übergangsbereich lässt sich vermeiden, indem die Materialsteifigkeit graduell angepasst wird. Abbildung 23 zeigt dies in der FE-Simulation. Durch die graduelle Anpassung der elastischen Eigenschaften ergibt sich ein homogenes Spannungsfeld am Übergang zwischen dem Sehnenersatzmaterial und dem Knochengewebe.

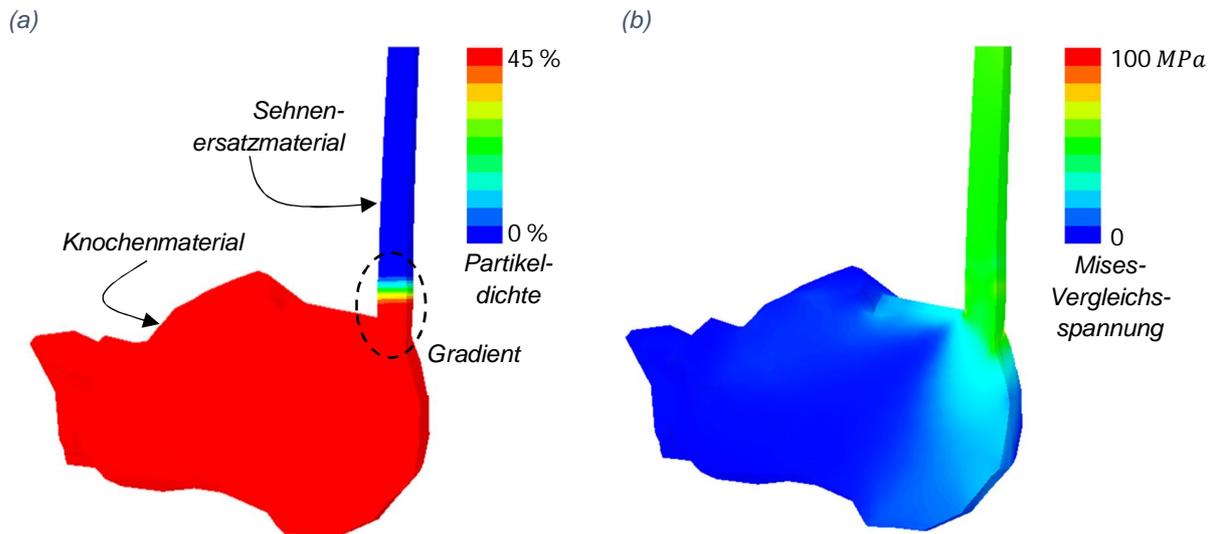


Abbildung 23: FE-Modell mit gradueller Steifigkeitsänderung: Materialsteifigkeit (a) und Spannungsfeld (b)

2.5 Einfluss anisotroper Partikelstrukturen auf das Materialverhalten

Das in Abschnitt 2.3 entwickelte mikromechanische Modell des partikelverstärkten Materials beruht auf der Annahme, dass sich die lokale Mikrostruktur im statistischen Mittel isotrop verhält. Die reale Partikelgeometrie muss dabei nicht zwangsläufig kugelförmig sein, jedoch wird unterstellt, dass die Ausrichtung der nichtkugelförmigen Partikel innerhalb der Mikrostruktur keine Vorzugsrichtung aufweist bzw. statistisch gleichverteilt ist. In diesem Fall zeigt die Mikrostruktur im Mittel ein richtungsunabhängiges effektives elastisches Verhalten und kann daher näherungsweise mithilfe der isotropen Einheitszelle nach Abbildung 24 beschrieben werden, welche aus einem kugelförmigen Partikel eingebettet in eine würfelförmige Matrix besteht.

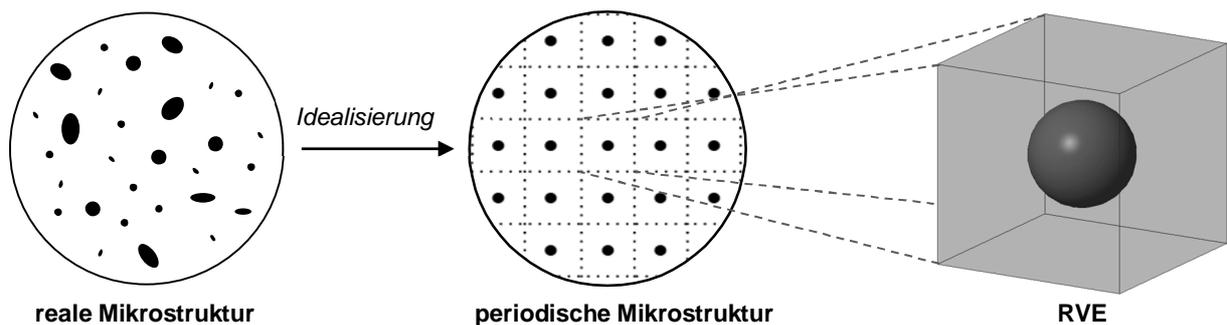


Abbildung 24: Idealisierende Abbildung der Mikrostruktur durch ein RVE mit richtungsunabhängigem Steifigkeitsverhalten

Je nach Herstellungsverfahren des Gradientenmaterials besteht jedoch die Möglichkeit, dass die Partikel in der Matrix eine Vorzugsausrichtung aufweisen. Insbesondere bei der Herstellung des Gradientenmaterials im 3D-Druckprozess ist eine Ausrichtung der Partikellängsachse in Strömungsrichtung wahrscheinlich. Aus makroskopischer Sicht weist das Material in diesem Fall ein anisotropes elastisches Verhalten auf. Die Bestimmung der effektiven elastischen Materialparameter erfolgt anhand eines RVE mit richtungsabhängigem Steifigkeitsverhalten, wie in Abbildung 25 exemplarisch gezeigt.

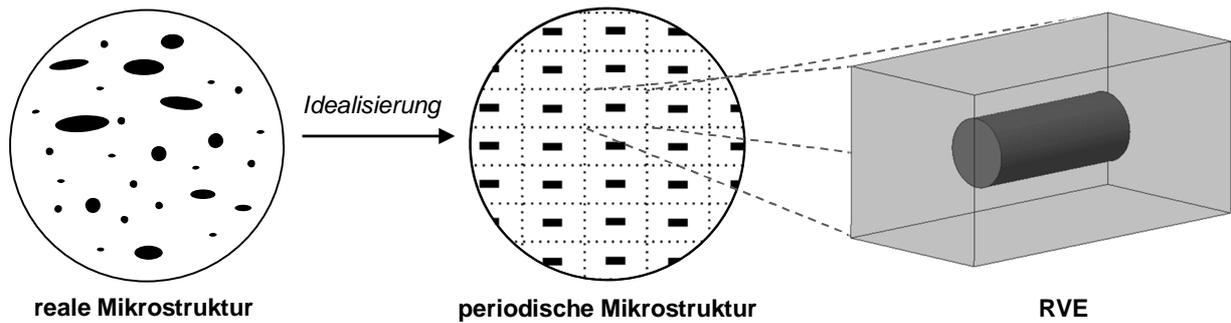


Abbildung 25: Idealisierende Abbildung der Mikrostruktur durch ein RVE mit richtungsabhängigem Steifigkeitsverhalten

Die abgebildete Einheitszelle besteht aus einem stabförmigen Partikel eingebettet in eine quadratische Matrix. Im Vergleich zur isotropen Einheitszelle nach Abbildung 24 weist die anisotrope Einheitszelle in Partikellängsrichtung eine höhere Materialsteifigkeit bei gleicher Partikeldichte auf, quer zur Partikellängsachse eine niedrigere Materialsteifigkeit. Umgekehrt lässt sich dieselbe Materialsteifigkeit mit einer niedrigeren Partikeldichte erzielen, was Vorteile im Herstellungsprozess mit sich bringen kann. Um diesen Effekt simulativ abbilden und untersuchen zu können, wurde die in Abschnitt 2.2 beschriebene Homogenisierungsmethodik zur Abbildung anisotroper Mikrostrukturen erweitert.

2.5.1 Bestimmung der anisotropen Materialeigenschaften

Anders als im isotropen Fall ist das elastische Verhalten von Mikrostruktur im anisotropen Fall richtungsabhängig. Ein einfacher Zugversuch ist zur Charakterisierung des effektiven elastischen Materialverhaltens nicht mehr ausreichend. Vielmehr ist ein Zugversuch für jede der drei Raumrichtungen erforderlich, um die richtungsabhängige Zugsteifigkeit bestimmen zu können. Ferner müssen drei Schubversuche zur Bestimmung der Schubsteifigkeiten um alle drei Achsen ausgeführt werden. Insgesamt lassen sich auf diese Weise neun unabhängige Materialparameter zur Beschreibung des orthotropen Verhaltens ermitteln: drei E-Moduln (E_{11} , E_{22} , E_{33}) zur Charakterisierung der Zugsteifigkeit, drei Schubmoduln (G_{12} , G_{13} , G_{23}) für die Schubsteifigkeit sowie drei Poisson-Zahlen (ν_{12} , ν_{13} , ν_{23}) zur Beschreibung des Querdehnungsverhaltens. Abbildung 26 zeigt die sechs zu simulierenden Prüfversuche mit einer Zuordnung der resultierenden Materialparameter. Um das elastische Umfeld der Einheitszelle mit berücksichtigen zu können, werden innerhalb der RVE-Simulationen periodische Randbedingungen zwischen den jeweils gegenüberliegenden Seitenflächen definiert (vgl. Abschnitt 2.3.1).

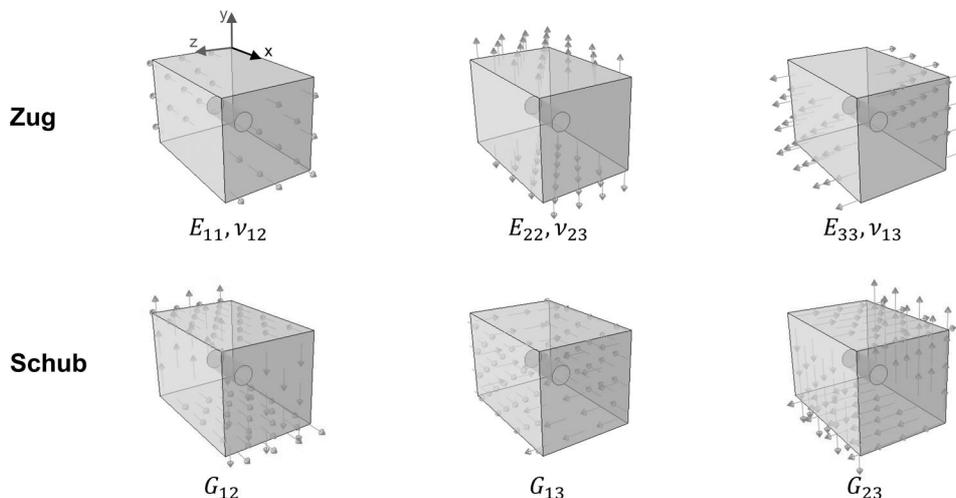


Abbildung 26: Sechs unterschiedliche Belastungszustände zur Charakterisierung des elastischen Materialparameter in Abhängigkeit der Belastungsrichtung

Im Allgemeinen sind die neun Materialparameter nicht konstant, sondern lastabhängig, wodurch die mathematische Beschreibung des elastischen Verhaltens in Form einer konstitutiven Gleichung sehr komplex wird. Ein allgemeingültiges Materialmodell ist aus der Literatur nicht bekannt. Daher wurde im Rahmen des Projekts vereinfachend ein linear-elastisches Materialverhalten angenommen, bei welchem die neun elastischen Materialparameter als konstant angenommen werden. In diesem Fall lässt sich das orthotrope Hookesche Gesetz zur Beschreibung des Zusammenhangs zwischen Spannung σ_{ij} und Dehnung ε_{ij} auf Makroebene verwenden [43]:

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{12} \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & -\nu_{12} & -\nu_{13} & 0 & 0 & 0 \\ E_{11} & E_{11} & E_{11} & 0 & 0 & 0 \\ \nu_{12} & 1 & \nu_{23} & 0 & 0 & 0 \\ E_{11} & E_{22} & E_{22} & 0 & 0 & 0 \\ \nu_{13} & \nu_{23} & 1 & 0 & 0 & 0 \\ E_{11} & E_{22} & E_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G_{23}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G_{13}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G_{12}} \end{bmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{13} \\ \sigma_{12} \end{pmatrix} \quad (16)$$

2.5.2 Umsetzung der Simulationsmethodik

Die softwaretechnische Umsetzung der in Abschnitt 2.5.1 beschriebenen Methodik zur Bestimmung des anisotropen effektiven elastischen Materialverhaltens erfolgte wiederum auf Basis der freien FE-Software Z88. Für die Entwicklung und Umsetzung der beschriebenen Strategie wurden die Berechnungskerne im Hinblick auf verschiedene Aspekte angepasst und erweitert. Die Bestimmung der effektiven elastischen Eigenschaften mithilfe der RVE-Simulationen erfolgt auf Basis des linearen Berechnungskerns Z88R. Die einzelnen Phasen der RVE werden dabei als isotrope, linear-elastische Materialien abgebildet. Wie bereits erwähnt, ist eine Besonderheit vieler für den Sehnensatz in Frage kommender Biomaterialien ihr (quasi-)inkompressibles Materialverhalten, was sich in Bezug auf die Materialparameter in einer Poisson-Zahl nahe dem Grenzwert $\nu = 0,5$ äußert. Bei den klassischen Finite-Elemente-Ansätzen aus Z88 kann dies zu numerischen Problemen wie Locking-Effekten und einer schlechten Kondition der konstitutiven Gleichung führen [45]. Um die numerische Stabilität der Simulation zu verbessern, wurde in der Berechnungsmethodik zur Bestimmung der Elementsteifigkeitsmatrizen eine selektiv-reduzierte Quadratur eingeführt [44]. Dabei wird die konstitutive Gleichung in einen volumetrischen und einen isochoren Anteil aufgeteilt [36, 45] und der volumetrische Teil mit einer reduzierten Integrationsordnung im Vergleich zur klassischen vollen Integrationsordnung integriert. Zur Berücksichtigung der periodischen Randbedingungen innerhalb der RVE-Simulation wurde analog zu Abschnitt 2.3.2.2 eine Schnittstelle zur Definition linearer Zwangsbedingungen in den Rechenkern Z88R implementiert. Diese Zwangsbedingungen werden ebenfalls mithilfe der Lagrange-Methode im FE-Gleichungssystem berücksichtigt.

Zur Generierung der FE-Netze für die RVE-Simulation wird das freie Vernetzungsprogramm GMSH verwendet [46]. Mithilfe des Tools können Einheitszellen mit grundsätzlich beliebigen Partikelgeometrien parametrisch beschrieben und mit linearen oder quadratischen Tetraedern automatisiert vernetzt werden. Aber auch kurz- oder endlosfaserverstärkte Einheitszellen lassen sich so generieren, womit die RVE-Simulationsmethodik nicht nur für partikelverstärkte, sondern für zukünftige Untersuchungen auch faserverstärkte Strukturen anwendbar ist. Im Rahmen des Projekts wurden vier Einheitszellentypen vordefiniert, welche in Abbildung 27 abgebildet sind. Die charakteristi-

schen Geometrieparameter, wie RVE-Kantenlänge und Partikeldurchmesser, sind in einer Steuerdatei zusammengefasst und lassen sich so einfach variieren, um den Einfluss der Partikeldichte auf die Materialsteifigkeit bestimmen zu können. Eine Erweiterung um weitere Einheitszellentypen durch den Anwender ist ohne weiteres möglich.

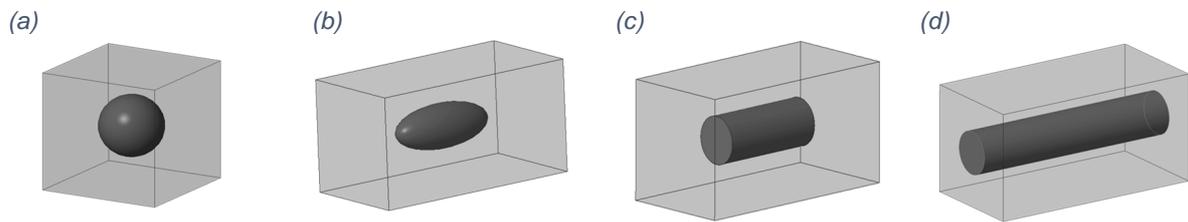


Abbildung 27: Vier vordefinierte Einheitszellen: Kugelpartikel (a) ellipsoides Partikel (b) zylindrisches Partikel / Kurzfaser (c) Endlosfaser (d).

Zur Automatisierung der RVE-Simulation wurde ein Rahmenprogramm in Form eines Matlab-Skripts geschrieben, welches den Modellaufbau, die Ansteuerung des Berechnungskerns Z88R sowie die Aufbereitung und Visualisierung der Simulationsergebnisse übernimmt. Hierzu übergibt der Anwender die Materialdaten für Partikel und Matrix sowie eine Liste mit den Werten für die Geometrieparameter der zu berechnenden RVE in Form einer Excel-Eingabedatei. Die Materialeigenschaften werden automatisch den entsprechenden Elementsets der Einheitszelle zugewiesen. Anschließend erfolgt die Definition der Rand- und Zwangsbedingungen für die Simulation der sechs verschiedenen Belastungszustände. Die fertigen FE-Modelle werden nacheinander an den Berechnungskern Z88R übergeben und berechnet. Am Ende jedes Berechnungslaufs werden die Simulationsergebnisse automatisch ausgewertet und graphisch aufbereitet. Dabei werden die neuen verschiedenen Materialparameter in Abhängigkeit der Partikeldichte dargestellt. Abbildung 28 zeigt den Berechnungsablauf im Überblick.

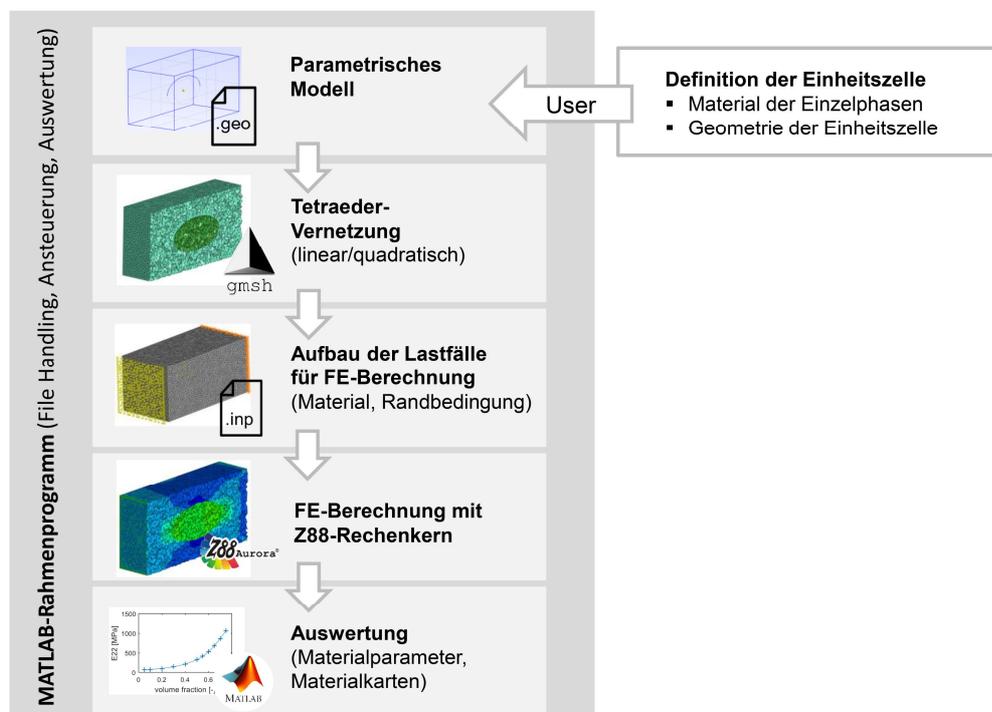


Abbildung 28: Automatisierter Berechnungsablauf zur Bestimmung der effektiven elastischen Materialeigenschaften von anisotropen Mikrostrukturen

Das Berechnungstool ist modular aufgebaut und besteht aus fünf Einzelmodulen, die grundsätzlich beliebig erweitert oder ausgetauscht werden können. Beispielsweise wäre es für zukünftige Anwendungen möglich, die Berechnungsmethodik um die Berücksichtigung nichtlinearen Materialverhaltens zu erweitern, indem der lineare Berechnungskern von Z88 durch den nichtlinearen Berechnungskern ersetzt wird.

2.5.3 Untersuchung des Einflusses anisotroper Partikelstrukturen

Um den Einfluss der Partikelgeometrie auf die Materialsteifigkeit exemplarisch aufzuzeigen, wurde die Zugsteifigkeit von RVE mit zylindrischem Partikel ermittelt, wobei das Durchmesser-zu-Längen-Verhältnis variiert wurde. Die resultierenden Zugsteifigkeiten wurden mit der eines RVEs mit kugelförmigem Partikel verglichen. Abbildung 29 zeigt die Einheitszelle, welche für die RVE-Simulationen verwendet wurde.

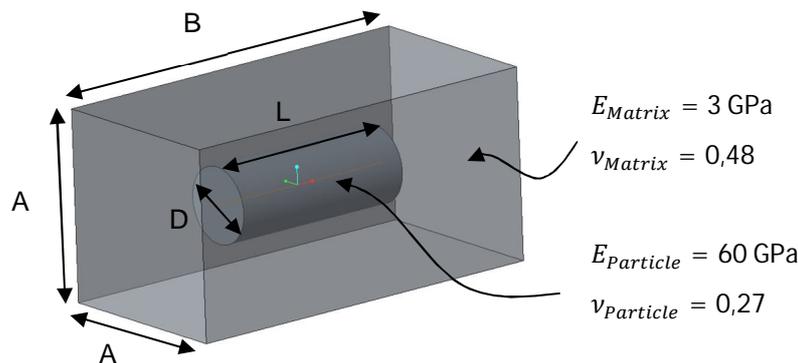


Abbildung 29: Aufbau der untersuchten Einheitszelle

Die Zugsteifigkeit wurde für vier verschiedene Aspekt-Verhältnisse, engl. aspect ratio (AR), in Abhängigkeit der Partikeldichte ermittelt. Das Aspekt-Verhältnis ist dabei definiert als:

$$AR = \frac{D}{L} = \frac{A}{B} \quad (17)$$

Die Ergebnisse für die Zugsteifigkeit in Längsrichtung aus RVE-Simulationen sind in Abbildung 30 zusammengefasst.

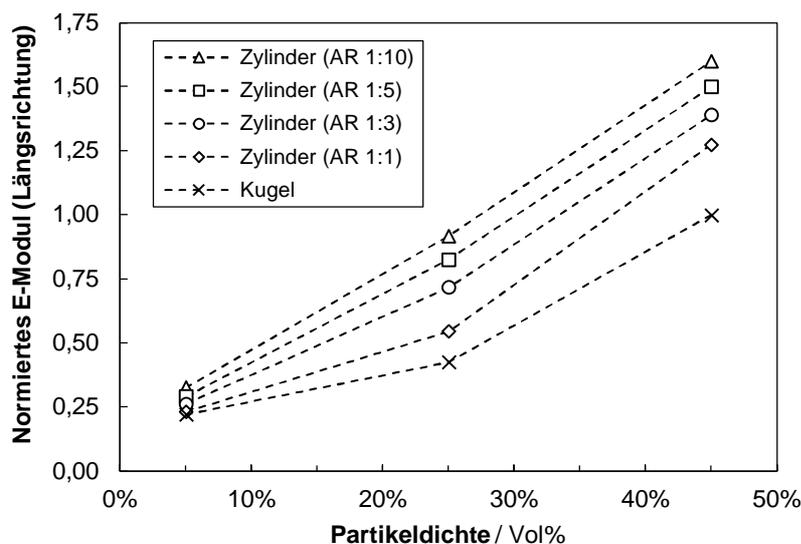


Abbildung 30: Vergleich der Zugsteifigkeit in Längsrichtung für RVEs unterschiedlicher Partikelgeometrie

Die Untersuchung zeigt deutlich den Einfluss der Partikelgeometrie auf die Materialsteifigkeit. Bei niedrigen Partikeldichten unter 10 % ist der Einfluss nur gering, steigt jedoch mit zunehmender

Partikeldichte an. Bei einer Partikeldichte von 25 % beispielsweise ist die Materialsteifigkeit bei einem zylindrischen Partikel mit $AR = 1:5$ etwa doppelt so hoch wie bei einem kugelförmigen Partikel. Umgekehrt kann mit einem zylindrischen Partikel mit $AR = 1:5$ die gleiche Materialsteifigkeit mit einer Partikeldichte von etwa 30 Vol% erzielt werden, wie mit einem kugelförmigen Partikel mit einer Partikeldichte von 45 Vol%.

Die Berücksichtigung eventuell auftretender Anisotropie in der Mikrostruktur ist daher entscheidend für die simulative Auslegung des Gradientenmaterials. Ein wichtiger Aspekt für zukünftige Entwicklungen ist die Erweiterung der Methodik zur Abbildung und Auslegung des Gradientenmaterials um die simulative Berücksichtigung anisotropen nichtlinear-elastischen Materialverhaltens auf makroskopischer Ebene.

3 Zusammenfassung

Der natürliche Sehne-Knochen-Übergang, die Entthese, gestaltet sich als ein mechanisch sehr anspruchsvolles Gewebe, das durch einen steilen Gradienten in Zellbesiedelung, Kollagenfaserausrichtung und Biomineralisation gekennzeichnet ist. Um diesen Konditionen im biomimetischen Nachbau zu begegnen, wurden im Rahmen des Forschungsvorhabens „Simulationsgestützte Entwicklung eines graduellen Sehnenersatzmaterials“ (OFS, P- Nr. 05266) experimentelle und simulationsgestützte Untersuchungen durchgeführt, auf deren Grundlage Lösungsansätze für die Herstellung und das Design des Sehnenersatzmaterials erarbeitet wurden. Grundidee war die gezielte graduelle Mineralisation des Basismaterials, um so die Materialsteifigkeit an der Anbindungsstelle zum Knochen graduell anzupassen. Als Basismaterialien wurden rekombinante Spinnenseide und Kollagen gewählt, welche sich beide durch ihre Biokompatibilität, Biomineralisierbarkeit und mechanische Stabilität auszeichnen. Besonderes Augenmerk der Entwicklung lag auf dem Design der Anbindungsstellen zwischen dem Sehnenersatzmaterial und dem Knochen bzw. dem Muskel. Diese Anbindungsstellen gelten als versagenskritisch, da hier Materialien unterschiedlicher Steifigkeit aufeinandertreffen, was zu hohen, materialschädigenden Spannungskonzentrationen führen kann. Um dies zu vermeiden, sollte das Sehnenersatzmaterial in diesen Bereichen eine gezielte graduelle Anpassung der Materialsteifigkeit aufweisen. Als Lösungsstrategie zur Umsetzung dieses Entwicklungsziels wurde sich für einen biomimetischen Nachbau der natürlichen Anbindungsstellen zwischen Sehne und Knochen entschieden.

Der Partikeldichtegradient bestimmt maßgeblich das graduelle Steifigkeitsverhalten des Sehnenersatzmaterials im Übergangsbereich zum Knochen. Zur Vorhersage und Auslegung des graduellen Materialsteifigkeitsverlaufs wurde eine Simulationsstrategie auf Basis der Finite-Elemente-Methode entwickelt. Eine direkte numerische Simulation des graduell partikelverstärkten Sehnenersatzmaterials ist aufgrund der Komplexität der Mikrostruktur und dem damit verbundenen hohen Modellierungs- und Rechenaufwand für den praktischen Einsatz wenig geeignet. Im Rahmen des Projekts wurde daher ein recheneffizientes Modellierungskonzept auf Basis einer Homogenisierung der Mikrostruktur entwickelt. Die Modellierungsstrategie gliedert sich in zwei Schritte: Mithilfe des mikromechanischen Modells lässt sich der versteifende Einfluss der Mineralisierung auf das effektive elastische Verhalten aus makroskopischer Sicht bestimmen. Die so ermittelten effektiven elastischen Materialparameter werden im zweiten Schritt dem homogenen Ersatzmaterial auf makroskopischer Ebene zugewiesen. Anhand des makroskopischen Ersatzmodells erfolgt sodann die Auslegung des Materialsteifigkeitsgradienten und der dazu erforderlichen Partikeldichteverteilung. Die entwickelte Modellierungsmethode wurde software-technisch auf Basis des freien FE-Programms Z88 umgesetzt. Anhand verschiedener Untersuchungen konnte die Anwendbarkeit der Methodik verifiziert werden und verschiedene Designregeln wurden davon abgeleitet.

Im Fokus zukünftiger Forschungsarbeiten sollte zunächst die Validierung des Zusammenspiels aus simulativer Auslegung und Herstellungsverfahren stehen. Ziel hierbei sollte sein, anhand verschiedener Varianten von Gradientenmaterialien die Grenzen der simulativen Vorhersagegenauigkeit zu ermitteln sowie Fertigungsrestriktionen bei der Herstellung zu identifizieren und im Auslegungsprozess zu berücksichtigen. Im nächsten Schritt könnten die erarbeiteten Methoden zur Entwicklung eines Prototyps für einen konkreten Anwendungsfall (wie z. B. dem Achilles-Sehnenersatz) eingesetzt und validiert werden.

4 Literaturverzeichnis

- [1] *Banos, C.C.; Thomas, A.H.; Kuo, C.K.*: Collagen fibrillogenesis in tendon development: current models and regulation of fibril assembly. *In: Birth defects research. Part C, Embryo today : reviews*, Vol. 84 (2008), Iss. 3, pp. 228-244.
- [2] *Neumann, K.*: Muskel- und Sehnenverletzungen. *In: König, B.; Reinhardt, D.; Schuster, H.-P.* (Hrsg.): Kompendium der praktischen Medizin. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2000, S. 1195-1203.
- [3] *Traveger, A.*: Tendon Degeneration and Repair: Lessons from Tendon Development and Ageing. *In: Orthopaedic Proceedings 100-B* (2018), SUPP_14, S. 136.
- [4] *Alt, E.; Rothoerl, R.; Hoppert, M. et al.*: Human Tendon Repair Following Injection of Autologous, Unmodified Stem Cells: A Comprehensive Immunohistochemical Evaluation, 2020.
- [5] *Hoffmann, A.; Gross, G.*: Tendon and ligament engineering: from cell biology to in vivo application. *In: Regenerative medicine*, Vol. 1 (2006), Iss. 4, pp. 563-574.
- [6] *Thomopoulos, S.; Birman, V.; Genin, G.M.*: Structural Interfaces and Attachments in Biology. Springer, New York, NY, 2013.
- [7] *Kumar, G.C.M.*: Functionally graded bio-ceramic reinforced PVA hydrogel composites for knee joint artificial cartilages. *In: , AIP Conference Proceedings*. Author(s), Karnataka, India, 2018, S. 20113.
- [8] *Kannus, P.*: Structure of the tendon connective tissue. *In: Scandinavian journal of medicine & science in sports*, Vol. 10 (2000), Iss. 6, pp. 312-320.
- [9] *Hardy, J.G.; Torres-Rendon, J.G.; Leal-Egaña, A. et al.*: Biom mineralization of Engineered Spider Silk Protein-Based Composite Materials for Bone Tissue Engineering. *In: Materials* (Basel, Switzerland), Vol. 9 (2016), Iss. 7.
- [10] *Heidebrecht, A.; Eisoldt, L.; Diehl, J. et al.*: Biomimetic fibers made of recombinant spidroins with the same toughness as natural spider silk. *In: Advanced materials* (Deerfield Beach, Fla.), Vol. 27 (2015), Iss. 13, pp. 2189-2194.
- [11] *Tucker, C.L.; Jones, J.A.; Bringham, H.N. et al.*: Mechanical and physical properties of recombinant spider silk films using organic and aqueous solvents. *In: Biomacromolecules*, Vol. 15 (2014), Iss. 8, pp. 3158-3170.
- [12] *Sharma, P.; Maffulli, N.*: Biology of tendon injury: healing, modeling and remodeling. *In: Journal of musculoskeletal & neuronal interactions*, Vol. 6 (2006), Iss. 2, pp. 181-190.
- [13] *Genin, G.M.; Kent, A.; Birman, V. et al.*: Functional grading of mineral and collagen in the attachment of tendon to bone. *In: Biophysical journal*, Vol. 97 (2009), Iss. 4, pp. 976-985.
- [14] *Hackenschmidt, R.; Kleinschrodt, C.; Hüter, F. et al.*: Konstruktionslehre in der Medizintechnik – Intelligente Entwicklung und Konstruktion mit FINITE-ELEMENTE-ANALYSE Z88 Aurora. *In: Senetics, N.* (Hrsg.): Fachtagung Medizintechnik, Ansbach, 2018.
- [15] *Koeck, K.S.*: Faserspinnen und 3D-Druck von Kollagen für biomedizinische Anwendungen, University of Bayreuth, 2022.
- [16] *Neubauer, V.J.*: Rekombinante Spinnenseidenproteine und Biomineralisation für technische und biomedizinische Anwendungen, University of Bayreuth, 2022.
- [17] *Bhavar, V.; Kattire, P.; Thakare, S. et al.*: A Review on Functionally Gradient Materials (FGMs) and Their Applications. *In: IOP Conference Series: Materials Science and Engineering* 229 (2017), S. 12021.
- [18] *Mahamood, R.M.; Akinlabi, E.T.*: Functionally Graded Materials, Topics in Mining, Metallurgy and Materials Engineering, Springer International Publishing, Cham, 2017.
- [19] *Fratzl, P.*: Collagen – Structure and mechanics. Springer, New York, NY, 2008.
- [20] *Lai, Y.-S.; Chen, W.-C.; Huang, C.-H. et al.*: The effect of graft strength on knee laxity and graft in-situ forces after posterior cruciate ligament reconstruction. *In: PloS one*, Vol. 10 (2015), Iss. 5, e0127293.

- [21] *Buschmann, J.; Bürgisser, G.M.*: Biomechanics of tendons and ligaments – Tissue reconstruction and regeneration, Woodhead publishing series in biomaterials, Woodhead Publishing is an imprint of Elsevier, Duxford, United Kingdom, 2017.
- [22] *Moser, K.*: Faser-Kunststoff-Verbund – Entwurfs- und Berechnungsgrundlagen, VDI-Buch, Springer, Berlin, 1992.
- [23] *Gross, D.; Seelig, T.*: Bruchmechanik – Mit einer Einführung in die Mikromechanik, Lehrbuch, Springer Vieweg, Berlin, 2016.
- [24] *Zohdi, T.I.; Wriggers, P.*: Introduction to Computational Micromechanics, Lecture Notes in Applied and Computational Mechanics no. 20, Springer-Verlag GmbH, Berlin Heidelberg, 2005.
- [25] *Park, J.B.; Lakes, R.S.*: Biomaterials – An introduction. Springer Science+Business Media, New York, NY, 2007.
- [26] *Borst, R. de; Crisfield, M.A.*: Non-linear finite element analysis of solids and structures, Wiley series in computational mechanics, Wiley, Chichester, 2012.
- [27] *Hüter, F.; Rieg, F.*: Extending Marlow's general first-invariant constitutive model to compressible, isotropic hyperelastic materials. *In: Engineering Computations ahead-of-print (2020)*, ahead-of-print.
- [28] *Ko, F.K.; Jovicic, J.*: Modeling of mechanical properties and structural design of spider web. *In: Biomacromolecules*, Vol. 5 (2004), Iss. 3, pp. 780-785.
- [29] *Stommel, M.; Stojek, M.; Korte, W.*: FEM zur Berechnung von Kunststoff- und Elastomerbauteilen. Hanser, München, 2018.
- [30] Z88, www.z88.de.
- [31] Anonymous: Abaqus/CAE Users's Guide – Version 6.14, 2014.
- [32] *Belytschko, T.; Liu, W.K.; Moran, B. et al.*: Nonlinear finite elements for continua and structures. Wiley, Chichester, 2014.
- [33] *Bergstrom, J.*: Mechanics of solid polymers – Theory and computational modeling. William Andrew is an imprint of Elsevier, Amsterdam, 2015.
- [34] *Marlow, R.S.*: A general first-invariant hyperelastic constitutive model. *In: Busfield, J. (ed.): Constitutive models for rubber III – Proceedings of the third European Conference on Constitutive Models for Rubber, 15 - 17 September 2003, London, UK. European Conference on Constitutive Models for Rubber. Balkema, Lisse, 2003*, pp. 157-160.
- [35] *Haynl, C.; Hofmann, E.; Pawar, K. et al.*: Microfluidics-Produced Collagen Fibers Show Extraordinary Mechanical Properties. *In: Nano letters*, Vol. 16 (2016), Iss. 9, pp. 5917-5922.
- [36] *Zienkiewicz, O.C.; Taylor, R.L.; Zhu, J.*: The finite element method – its basis and fundamentals. Elsevier Butterworth-Heinemann, Amsterdam, 2005.
- [37] *Holzapfel, G.A.*: Nonlinear solid mechanics – A continuum approach for engineering. Wiley, Chichester, 2000.
- [38] *Rieg, F.; Hackenschmidt, R.; Alber-Laukant, B.*: Finite Elemente - Analyse für Ingenieure – Grundlagen und praktische Anwendungen mit Z88Aurora. Hanser, München, 2019.
- [39] *Bonnet, J.; Gil, A.J.; Wood, R.D.*: Nonlinear Solid Mechanics for Finite Element Analysis: Statics. Cambridge University Press, Cambridge, 2016.
- [40] *Nasdala, L.*: FEM-Formelsammlung Statik und Dynamik – Hintergrundinformationen, Tipps und Tricks, Studium, Vieweg+Teubner Verlag / Springer Fachmedien Wiesbaden GmbH Wiesbaden, Wiesbaden, 2010.
- [41] *Bathe, K.-J.; Zimmermann, P.*: Finite-Elemente-Methoden. Springer, Berlin, 2002.
- [42] *Rupin, F.; Saied, A.; Dalmas, D. et al.*: Experimental determination of Young modulus and Poisson ratio in cortical bone tissue using high resolution scanning acoustic microscopy and nanoindentation. *In: The Journal of the Acoustical Society of America* 123 (2008), Heft 5, S. 3785.

- [43] *Barbero, E.J.*: Finite element analysis of composite materials. CRC Press, Boca Raton, Fla., 2008.
- [44] *Hughes, T.J.*: The finite element method – Linear static and dynamic finite element analysis. Dover Publ, Mineola, NY, 2012.
- [45] *Felippa, C.A.; Oñate, E.*: Stress, strain and energy splittings for anisotropic elastic solids under volumetric constraints. *In: Computers & Structures* 81 (2003), Heft 13, S. 1343-1357.
- [46] *Geuzaine, C.; Remacle, J.-F.*: Gmsh reference manual, 2021, <http://gmsh.info/doc/texinfo/gmsh.html>.