

Научная статья

УДК 535-92, 535-94, 514.88, 519.673

doi: 10.17223/29491665/8/8

Модель метода неразрушающего контроля керамического материала на основе гидроксиапатита с добавками углеродных нанотрубок

Анастасия Евгеньевна Резванова¹, Борис Сергеевич Кудряшов²,
Александр Николаевич Пономарёв³

^{1, 2, 3} *Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Россия*

³ *Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники, Томск, Россия*

¹ *ranast@ispms.ru*

Аннотация. Керамические композиты, способные эффективно функционировать в условиях экстремальных нагрузок, должны обеспечивать их безопасную эксплуатацию. Определение оптических характеристик материалов методом неразрушающего контроля позволяет оценить их пористую структуру без механического разрушения. Построены структурные модели для представительного объема пористого керамического материала на основе гидроксиапатита с добавками 0,1 и 0,5 мас.% углеродных нанотрубок. С помощью метода конечных элементов смоделировано прохождение терагерцового излучения в частотном диапазоне от 0,2 до 1,1 ТГц, и проведена оценка влияния нанотрубок на структуру и оптические свойства модельных образцов.

Ключевые слова: гидроксиапатит, углеродные нанотрубки, метод конечных элементов, пористость, показатель преломления, коэффициент поглощения, терагерцовая спектроскопия

Благодарности: работа выполнена в рамках государственного задания ИФПМ СО РАН, тема № FWRW-2022-0002.

Для цитирования: Резванова А.Е., Кудряшов Б.С., Пономарёв А.Н. Модель метода неразрушающего контроля керамического материала на основе гидроксиапатита с добавками углеродных нанотрубок // Технологии безопасности жизнедеятельности. 2024. № 8. С. 59–66. doi: 10.17223/29491665/8/8

Original article

doi: 10.17223/29491665/8/8

Model of a non-destructive testing method for ceramic material based on hydroxyapatite with carbon nanotube additives

Anastasia E. Rezvanova¹, Boris S. Kudryashov², Alexander N. Ponomarev³

^{1, 2, 3} *Institute of Strength Physics and Materials Science SB RAS, Tomsk, Russian Federation*

³ *Tomsk State University of Control Systems and Radioelectronics, Tomsk, Russian Federation*

¹ *ranast@ispms.ru*

Abstract. The use of materials with improved physical and mechanical properties for biomedical applications that can function effectively under extreme loads, such as radiation and chemical exposure, will significantly reduce injuries and prolong the quality of life of employees. At the same time, the development of such materials is labor-intensive and requires a large amount of fundamental research, long-term acquisition and processing of large amounts of experimental data. The solution to this problem may be to conduct a computer experiment using the finite element method to simulate the structure of materials and solve physics problems. In this paper, structural models were constructed for representative volumes of porous ceramic material based on hydroxyapatite with 0.1 and 0.5 wt. % carbon nanotubes additives. The effect of carbon nanotubes on the structure and optical properties of model samples was estimated by finite element simulations of terahertz radiation transmission in the frequency range from 0.2 to 1.1 THz. The optical properties such as the refractive index and absorption coefficient were calculated for the resulting models using the obtained data on the intensity, transmission speed and time delay of the THz pulse. The addition of nanotubes to the hydroxyapatite ceramic matrix leads to a decrease in the pore space in the samples, due to which the time delay of the THz pulse transmission through the models and the refractive index increase, while the absorption coefficient decreases. The simulation results showed quantitative similarity with the literature data on the refractive index and absorption coefficient of dental enamel and human cortical bone, and qualitative agreement with the experimental data on hydroxyapatite-carbon nanotubes ceramic composite.

Keywords: hydroxyapatite, carbon nanotubes, finite element method, porosity, refractive index, absorption coefficient, terahertz spectroscopy

Acknowledgements: The work was performed according to the Government research assignment for ISPMS SB RAS, Project FWRW-2022-0002.

For citation: Rezvanova, A.E., Kudryashov, B.S. & Ponomarev, A.N. (2024) Model of a non-destructive testing method for ceramic material based on hydroxyapatite with carbon nanotube additives. *Tekhnologii bezopasnosti zhiznedeyatel'nosti – Life Safety / Security Technologies*. 8. pp. 59–66. (In Russian). doi: 10.17223/29491665/8/8

Введение

В современных условиях возрастает необходимость разработки новых материалов, способных противостоять техногенным и биологическим угрозам. Одним из важных аспектов обеспечения безопасности является использование биомедицинских материалов с улучшенными физико-механическими свойствами, способных эффективно функционировать в условиях экстремальных нагрузок. Оптимизация структуры таких материалов для устойчивости к внешним воздействиям играет ключевую роль в обеспечении безопасности жизнедеятельности человека. Восстановление поврежденных костных тканей осуществляется за счет реконструкции и замещения дефектов при помощи имплантатов, в том числе керамических. Материалы для имплантатов должны удовлетворять таким требованиям, как биосовместимость с человеческими костными тканями, а также обладать близкими с ними физико-механическими свойствами [1–3]. Наиболее предпочтительным материалом для разработки керамического имплантата является гидроксиапатит (ГА), который относится к биоматериалам из ортофосфатов кальция, обладает высокой биосовместимостью и является основной минеральной составляющей костной ткани человека [4–6]. В то же время механические свойства ГА керамики, такие как твердость, прочность, вязкость разрушения, значительно ниже, чем у костной ткани [7–9], что ограничивает их использование в местах имплантации с высокими механическими нагрузками.

Одним из важных параметров керамических материалов на основе ГА является пористость [10], которая напрямую оказывает влияние на структуру [11] и физико-механические свойства [3, 12–14]. Структуру таких материалов можно изменять варьированием добавок углеродных нанотрубок (УНТ), которые при внедрении в матрицу ГА приводят к снижению пористости и получению необходимых физико-механических свойств [15]. Добавки УНТ заполняют поровое пространство матрицы ГА [1, 15], увеличивая плотность композита, а также укрепляют границы зерен керамики [16–18]. В работе [19] показано, что введение в матрицу ГА 1 мас.% добавок многостенных углеродных нанотрубок (МУНТ) приводит к уменьшению пористости от 2 до 1,5%, а в [20] проиллюстрировано, что при добавлении 4 мас.% МУНТ наблюдается снижение пористости от $10 \pm 1,5$ до $5 \pm 2,5\%$.

Одним из способов качественного анализа пористой структуры материалов является терагерцовая (ТГц) спектроскопия во временной области [21–23]. Данный метод позволяет исследовать внутреннюю структуру материалов без механических разрушений с помощью определения их оптических свойств в терагерцовом диапазоне частот [24]. Оптические свойства керамических материалов, в частности показатель преломления и коэффициент поглощения, зависят от эффектов, связанных с пространственным распределением локальных электрических полей, и обусловлены рассеянием ТГц излучения как отдельными структурными элементами, так и их группами [25]. Таким образом, определение оптических свойств позволяет получить важную информацию о внутренней структуре материалов, что необходимо учитывать при анализе их пористости.

Экспериментальные исследования оптических параметров требуют получения множества образцов с различным содержанием добавок УНТ, а также необходимости обработки большого количества экспериментальных данных. Для дополнения экспериментальных данных предлагается с помощью метода конечных элементов проведение компьютерного эксперимента по созданию структурных моделей керамических материалов ГА и композитов ГА–УНТ, а также пропускания ТГц-излучения через них.

Целью настоящего исследования является проведение компьютерного эксперимента по пропусканию ТГц-излучения через модели керамических композитов на основе ГА с добавками УНТ 0,1 и 0,5 мас.%. Предполагается определение таких оптических свойств, как показатель преломления и коэффициент поглощения, а также связанных с ними параметров, таких как временная задержка ТГц-импульса и интенсивность излучения.

Моделирование пористых структур композитной керамики ГА–МУНТ

Моделирование пористых структур композитного материала на основе гидроксиапатита (ГА) с добавками углеродных нанотрубок (УНТ) выполнялось в среде COMSOL Multiphysics [26] на основе метода конечных элементов (МКЭ). Данный метод может применяться в области инженерно-математического моделирования в задачах структурного анализа, теплопередачи, потока жидкости, массопереноса и электромагнитного потенциала [27] для моделирования

электрической проводимости двумерных и трехмерных сред [28], а также для моделирования наночастиц типа ядро–оболочка для анализа их магнитоэлектрического поведения [29].

Для автоматического построения структурных моделей разработана программа, которая учитывает такие параметры, как размеры образца, количество пор, максимальные и минимальные радиусы пор, минимальное и максимальное количество УНТ, содержащихся в порах. За основу модели взят представительный объем материала в виде сплошного цилиндра с радиусом 20 мкм и высотой 40 мкм [30].

Первым шагом создания моделей материалов с пористой структурой, содержащих нанотрубки, является задание начальной конфигурации моделей с определенными параметрами. Для формирования пористой структуры ГА создаются сферы радиусами от 0,1 мкм до 1 мкм, которые произвольно располагаются внутри основного цилиндра и вырезаются из него с использованием инструмента «Difference» (рис. 1, а). Далее в каждой поре моделируются УНТ в виде цилиндров длиной 5 мкм с различными углами наклона, образующие агломераты нанотрубок (рис. 1, б).

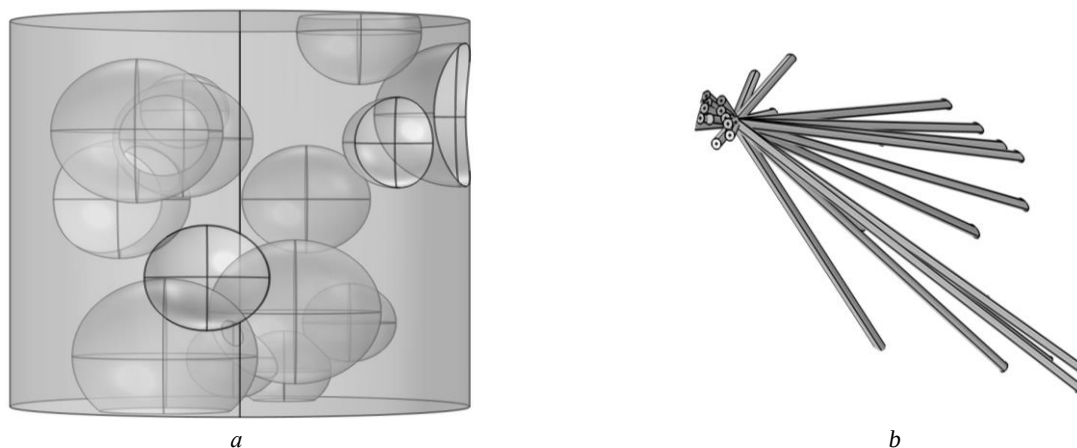


Рис. 1. Модели цилиндрического пористого образца ГА (а) и агломерата УНТ (б)

Fig. 1. Models of the cylindrical porous hydroxyapatite sample (а) and carbon nanotube agglomerate (б)

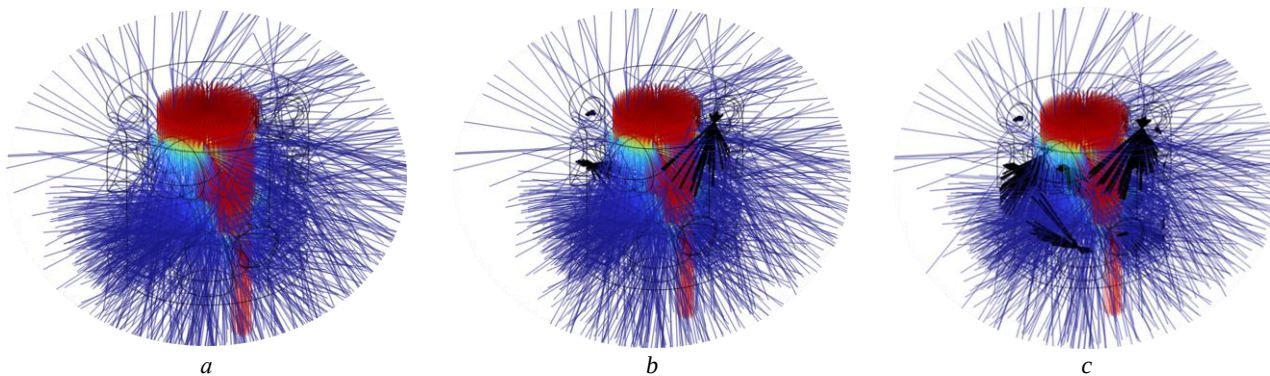


Рис. 2. Модели пропускания терагерцового излучения: ГА без добавок (а), ГА+0,1 мас.% УНТ (б), ГА+0,5 мас.% УНТ (с)

Fig. 2. Models of terahertz radiation transmission: hydroxyapatite without additives (а), hydroxyapatite with addition 0.1 mass. % of carbon nanotubes (б), hydroxyapatite with addition 0.5 mass. % of carbon nanotubes (с)

Затем каждая нанотрубка покрывается наружным слоем ГА с радиусом 45 нм и высотой, соответствующей длине УНТ. Дополнительные цилиндры того же размера, что и основной, используются для обрезки УНТ на поверхности модели с помощью инструмента «Intersection». Ключевым параметром разрабатываемых моделей является диаметр УНТ, равный 18 нм,

соответствующий среднему диаметру МУНТ, определенному экспериментально в работах [17, 30, 31]. С помощью модуля Release from Grid генерируется сетка точек на плоскости, образующая окружность диаметром, равным 1/2 диаметра цилиндрической модели образца. Прохождение лучей через образец моделировалось плоской волной, колеблющейся в

диапазоне частот от 0,2 до 1,1 ТГц. Начальная интенсивность излучения составляла 1000 Вт/м^2 . В данной работе проведение компьютерного эксперимента направлено на пропускание излучения в широком диапазоне частот от 0,2 до 1,1 ТГц в соответствии с экспериментальным исследованием керамики ГА-МУНТ [30], что является развитием исследования [32], в котором вычисление преломления и поглощения выполнялось при фиксированной частоте излучения в 1 ТГц.

Моделирование процесса пропускания ТГц излучения через пористые структуры

На рис. 2 показаны модели прохождения терагерцового излучения через пористую структуру материалов на основе ГА трех типов: ГА без добавок УНТ (a), ГА+0,1 мас.% УНТ (b) и ГА+ 0,5 мас.% УНТ (c).

Для каждой модели выполнялись расчеты интенсивностей излучения и временной задержки прохождения ТГц-лучей через пористые структуры с помощью модуля The Ray Optics Module [33], что представлено на рис. 3, 4.

Анализ данных на рис. 3 показывает, что добавление 0,5 мас.% УНТ приводит к увеличению временной задержки от 0,055479 до 0,055571 пс. Оценка полученных значений для построенных моделей качественно согласуется с экспериментальными данными [30], согласно которым наблюдается тенденция роста временной задержки импульса с увеличением МУНТ до 0,5 мас.% в матрицу ГА. На рис. 4 показано, что интенсивность ТГц-излучения зависит как от частоты излучения, так и от пористости материала, которая снижается с увеличением содержания УНТ. Полученные значения временной задержки и интенсивностей были использованы для расчета коэффициентов поглощения по закону Бугера–Ламберта–Бера и показателей преломления по закону Снеллиуса [34].

Зависимости показателей преломления и коэффициентов поглощения от частоты излучения для полученных моделей представлены на рис. 5: увеличение содержания УНТ в ГА-матрице приводит к увеличению показателя преломления (рис. 5, a) и уменьшению коэффициента поглощения (рис. 5, b), что качественно согласуется с оптическими свойствами керамики ГА–МУНТ, экспериментально определенными в диапазоне частот от 0,2 до 1,1 ТГц [30].

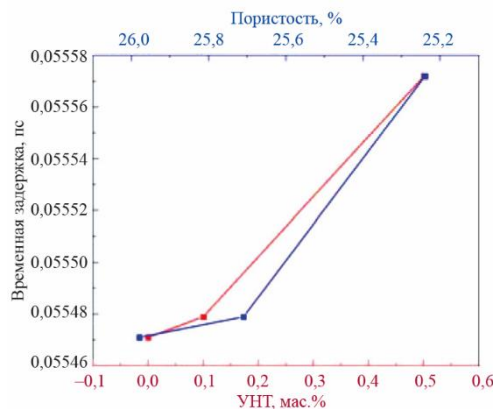


Рис. 3. Модельная зависимость временной задержки от концентрации УНТ и пористости

Fig. 3. The model dependence on time delay on the carbon nanotube concentration and porosity

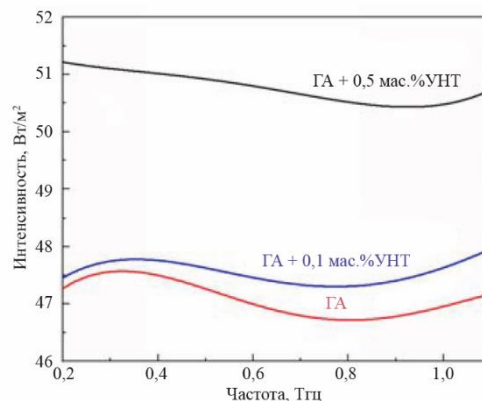


Рис.4. Модельная зависимость интенсивности от частоты ТГц-излучения

Fig. 4. The model dependence on intensity on the frequency of THz radiation

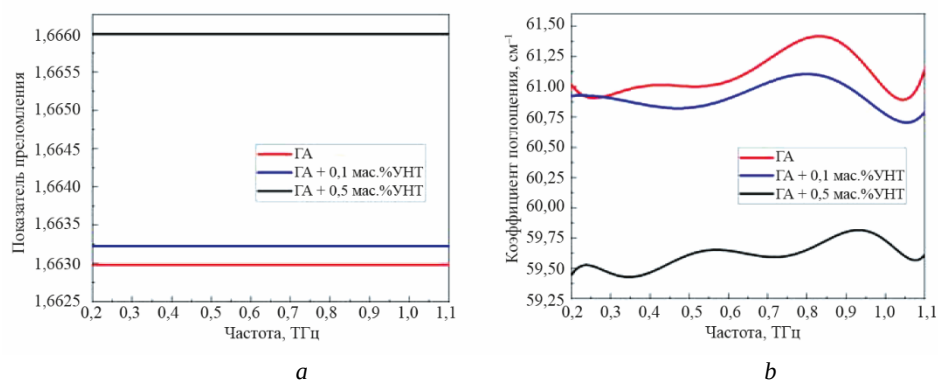


Рис. 5. Модельные частотные зависимости показателя преломления (a) и коэффициента поглощения (b) материалов на основе ГА

Fig. 5. The model frequency dependences on refractive index (a) and absorption coefficient (b) of hydroxyapatite-based materials

Результаты моделирования оптических свойств ГА материалов демонстрируют количественное согласие с литературными данными, где показатель преломления равен 1,64 [35], а коэффициент поглощения варьируется в диапазоне $5\text{--}37,08\text{ см}^{-1}$ [36]. Кроме того, установлено соответствие модельных данных с кортикальной костью человека, преломление которой $\sim 1,93$, а поглощение изменяется в диапазоне $5\text{--}72\text{ см}^{-1}$ в зависимости от частоты излучения

[37]. Сравнительный анализ модельных и экспериментальных данных оптических свойств представлен в таблице. Незначительное изменение показателя преломления и коэффициента поглощения моделей, содержащих УНТ, а также количественное расхождение между численными и экспериментальными данными обусловлено меньшими линейными размерами структурных моделей по сравнению с экспериментом и упрощениями при моделировании включений УНТ и их агломератов.

Оптические свойства экспериментальных и модельных образцов керамики на основе ГА в диапазоне частот от 0,2 до 1,1 ТГц

Материал	Показатель преломления	Коэффициент поглощения, см^{-1}
Эксперимент [30]		
ГА	2,45–2,63	15,65–34,48
ГА+0,1 мас.% МУНТ	2,59–2,70	8,52–28,29
ГА+0,5 мас.% МУНТ	2,72–2,83	7,80–28,35
Моделирование		
ГА	1,6632	60,93–61,47
ГА+0,1 мас.% УНТ	1,6630	60,75–61,20
ГА+0,5 мас.% УНТ	1,6660	59,45–59,91

Заключение

Проведенное моделирование пористой керамики на основе гидроксиапатита показало, что добавление углеродных нанотрубок способствует снижению пористости материала и получению оптических характеристик, схожих с костной тканью человека, что может быть полезным для потенциально новых применений в области медицины. Результаты моделирования коррелируют с экспериментальными данными и

могут быть использованы для дальнейших исследований в области создания медицинских имплантатов, что особенно актуально в условиях повышения требований к безопасности жизнедеятельности, в том числе для защиты в условиях воздействия электромагнитного излучения. Разработанные модели также могут снизить затраты на производство экспериментальных образцов и ускорить процесс тестирования материалов, предназначенных для обеспечения безопасности в критических условиях.

Список источников

1. Moussy F. Biomaterials for the developing world // Journal of Biomedical Materials Research Part A. 2010. Vol. 94, № 4. P. 1001–1003. doi: 10.1002/jbm.a.32866
2. Lahiri D., Ghosh S., Agarwal A. Carbon nanotube reinforced hydroxyapatite composite for orthopedic application: a review // Materials Science and Engineering: C. 2012. Vol. 32, № 7. P. 1727–1758. doi: 10.1016/j.msec.2012.05.010

3. Han Y., Wei Q., Chang P., Hu K., Okoro O.V., Shavandi A., Nie L. Three-dimensional printing of hydroxyapatite composites for biomedical application // *Crystals*. 2021. Vol. 11, № 4. P. 353. doi: 10.3390/cryst11040353
4. Díaz M., Barba F., Miranda M., Guitián F., Torrecillas R., Moya J.S. Synthesis and Antimicrobial Activity of a Silver-Hydroxyapatite Nanocomposite // *Journal of Nanomaterials*. 2009. № 2009. P. 1–6. doi: 10.1155/2009/498505
5. Zhang T., Cai W., Chu F., Zhou F., Liang S., Ma C., Hu Y. Hydroxyapatite/polyurea nanocomposite: Preparation and multiple performance enhancements // *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing*. 2020. № 128. P. 105681. doi: 10.1016/j.compositesa.2019.105681
6. Fiume E., Magnaterra G., Rahdar A., Verne E., Bairo F. Hydroxyapatite for biomedical applications: A short overview // *Ceramics*. 2021. Vol. 4, № 4. P. 542–563. doi: 10.3390/ceramics4040039
7. Zhao X., Zheng J., Zhang, W., Chen X., Gui Z. Preparation of silicon coated-carbon fiber reinforced HA bio-ceramics for application of load-bearing bone // *Ceramics International*. 2020. Vol. 46, № 6. P. 7903–7911. doi: 10.1016/j.ceramint.2019.12.010
8. Khalid P., Suman V.B. Carbon nanotube-hydroxyapatite composite for bone tissue engineering and their interaction with mouse fibroblast L929 In Vitro // *Journal of Bionanoscience*. 2017. Vol. 11, № 3. P. 233–240. doi: 10.1166/jbns.2017.1431
9. Ferreira C.R.D., Santiago A.A.G., Vasconcelos R.C., Paiva D.F.F., Pirihi F.Q., Araújo A.A., Motta F.V., Bomio M.R.D. Study of microstructural, mechanical, and biomedical properties of zirconia/hydroxyapatite ceramic composites // *Ceramics International*. 2022. Vol. 48, № 9. P. 12376–12386. doi: 10.1016/j.ceramint.2022.01.102
10. Gregg S.J., Sing K.S.W. Adsorption, Surface Area and Porosity. London : Academic Press, 1982.
11. Cox S.C., Thornby J.A., Gibbons G.J., Williams M.A., Mallick K.K. 3D printing of porous hydroxyapatite scaffolds intended for use in bone tissue engineering applications // *Materials Science and Engineering: C*. 2015. № 47. P. 237–247. doi: 10.1016/j.msec.2014.11.024
12. Akinribide O.J., Mekgwe G.N., Akinwamide S.O., Gamaoun F., Abeykoon C., Johnson O.T., Olubambi P.A. A review on optical properties and application of transparent ceramics // *Journal of materials research and technology*. 2022. № 21. P. 712–738. doi: 10.1016/j.jmrt.2022.09.027
13. Wagner A., Ratzker B., Kalabukhov S., Sokol M., Frage N. Residual porosity and optical properties of spark plasma sintered transparent polycrystalline cerium-doped YAG // *Journal of the European Ceramic Society*. 2019. Vol. 39, № 4. P. 1436–1442. doi: 10.1016/j.jeurceramsoc.2018.11.006
14. Shahmiri R., Standard O.C., Hart J.N., Sorrell C.C. Optical properties of zirconia ceramics for esthetic dental restorations: A systematic review // *The Journal of prosthetic dentistry*. 2018. Vol. 119, № 1. P. 36–46. doi: 10.1016/j.prosdent.2017.07.009
15. Faingold A., Cohen S.R., Shahar R., Weiner S., Rapoport L., Wagner H.D. The effect of hydration on mechanical anisotropy, topography and fibril organization of the osteonal lamellae // *Journal of Biomechanics*. 2014. Vol. 47, № 2. P. 367–372. doi: 10.1016/j.jbiomech.2013.11.022
16. Veljović Đ., Vuković G.D., Steins I., Palcevskis E., Uskoković P., Petrović R., Janačković Đ. Improvement of the mechanical properties of spark plasma sintered hap bioceramics by decreasing the grain size and by adding multi-walled carbon nanotubes // *Science of Sintering*. 2013, Vol. 45, № 2. P. 33–243. doi: 10.2298/SOS1302233V
17. Barabashko M.S., Tkachenko M.V., Neiman A.A., Ponomarev A.N., Rezvanova A.E. Variation of Vickers microhardness and compression strength of the bioceramics based on hydroxyapatite by adding the multi-walled carbon nanotubes // *Applied Nanoscience*. 2019. Vol. 10, № 8. P. 2601–2608. doi: 10.1007/s13204-019-01019-z
18. Barabashko M.S., Tkachenko M.V., Rezvanova A.E., Ponomarev A.N. Analysis of temperature gradients in the hydroxyapatite ceramics with the additives of multi-walled carbon nanotubes // *Russian Journal of Physical Chemistry A*. 2021. Vol. 95, № 5. P. 1017–1022. doi: 10.1134/S0036024421050058
19. Mukherjee S., Kundu B., Chanda A., Sen S. Effect of functionalisation of CNT in the preparation of HAp–CNT biocomposites // *Ceramics international*. 2015. Vol. 41, № 3. P. 3766–3774. doi: 10.1016/j.ceramint.2014.11.052
20. Lahiri D., Singh V., Keshri A.K., Seal S., Agarwal A. Carbon nanotube toughened hydroxyapatite by spark plasma sintering: Microstructural evolution and multiscale tribological properties // *Carbon*. 2010. Vol. 48, № 11. P. 3103–3120. doi: 10.1016/j.carbon.2010.04.047
21. Nikoghosyan A.S., Ting H., Shen J., Martirosyan R.M., Tunyan M.Y., Papikyan A.V., Papikyan A.A. Optical properties of human jawbone and human bone substitute Cerabone® in the terahertz range // *J. Contemp. Phys*. 2016. Vol. 51, № 3. P. 256–264. doi: 10.3103/S1068337216030087
22. Bawuah P., Ervasti T., Tan N., Zeitler J.A., Ketolainen J., Peiponen K.E. Noninvasive porosity measurement of biconvex tablets using terahertz pulses // *International journal of pharmaceutics*. 2016. Vol. 509, № 1–2. P. 439–443. doi: 10.1016/j.ijpharm.2016.06.023
23. Kistenev Yu.V., Nikolaev V.V., Kurochkina O.S., Borisov A.V., Sandykova E.A., Krivova N.A., Tuchina D.K., Timoshina P.A. Use of terahertz spectroscopy for in vivo studies of lymphedema development dynamics // *Optics and Spectroscopy*. 2019. № 126. P. 523–529. doi: 10.1134/S0030400X19050138
24. Bawuah P., Markl D., Farrell D., Evans M., Portieri A., Anderson A., Goodwin D., Lucas R., Zeitler J.A. Terahertz-based porosity measurement of pharmaceutical tablets: A tutorial // *J. Infrared, Millimeter, Terahertz Waves*. 2020. Vol. 41, № 4. P. 450–469. doi: 10.1007/s10762-019-00659-0
25. Безмельницкий Д.С., Лизункова Д.А., Шишкин И.А. Оптические свойства наноструктурированного кремния // *Вестник молодых учёных и специалистов Самарского университета*. 2020. Т. 1, № 16. С. 261–266.
26. COMSOL. URL: <https://www.comsol.ru> (accessed: 1 July 2024).
27. Fish J., Belytschko T. A First Course in Finite Elements. John Wiley & Sons, 2017.
28. Сизин П.Е. Теоретическое и численное моделирование электрической проводимости пористых сред // *Горный информационно-аналитический бюллетень*. 2023. Т. 5. С. 43–56. doi: 10.25018/0236_1493_2023_5_0_43
29. Fiocchi S., Chiamarello E., Marrella A., Suarato G., Bonato M., Parazzini M., Ravazzani P. Modeling of core-shell magneto-electric nanoparticles for biomedical applications: Effect of composition, dimension, and magnetic field features on magnetoelectric response // *PLoS one*. 2022. Vol. 17, № 9. P. e0274676. doi: 10.1371/journal.pone.0274676
30. Rezvanova A.E., Kudryashov B.S., Ponomarev A.N., Knyazkova A.I., Nikolaev V.V., Kistenev Y.V. Composite hydroxyapatite-multi-walled carbon nanotubes: study of porosity by terahertz time domain spectroscopy // *Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics*. 2023. Vol. 14, № 5. P. 530–538. doi: 10.1371/journal.pone.0274676

31. Barabashko M., Ponomarev A., Rezvanova A., Kuznetsov V., Moseenkov S. Young's modulus and vickers hardness of the hydroxyapatite bio-ceramics with a small amount of the multi-walled carbon nanotubes // *Materials*. 2022. Vol. 15, № 15. P. 5304. doi: 10.3390/ma15155304
32. Резванова А.Е. Кудряшов Б.С., Скоробогатов Д.Д., Пономарев А.Н. Модель распространения терагерцового импульса через керамику на основе гидроксипатита // *Журнал технической физики*. 2024. Т. 94, № 3. С. 358–365. doi: 10.61011/JTF.2024.03.57372.18-24
33. Ray Optics Module User's Guide. URL: <https://doc.comsol.com/5.4/doc/com.comsol.help.roptics> (accessed: 1 July 2024).
34. Borisenko S.I., Revinskaya O.G., Kravchenko N.S., Chernov A.V. The refractive index of light and methods for its experimental determination. Tomsk : Publishing house of Tomsk Polytechnic University, 2014. P. 142.
35. Huang P., Zhou B., Zheng Q., Tian Y., Wang M., Wang L., Li J., Jiang W. Nano wave plates structuring and index matching in transparent hydroxyapatite-YAG: Ce composite ceramics for high luminous efficiency white light-emitting diodes // *Advanced Materials*. 2020. Vol. 32, № 1. P. 905951. doi: 10.1002/adma.201905951
36. Plazanet M., Tasseva J., Bartolini P., Taschin A., Torre R., Combes C., Rey C., Michele A.Di., Verezhak M., Gourrier A. Time-domain THz spectroscopy of the characteristics of hydroxyapatite provides a signature of heating in bone tissue // *PLoS One*. 2018. Vol. 13, № 8. P. e0201745. doi: 10.1371/journal.pone.0201745
37. Bessou M., Chassagne B., Caumes J.-P., Pradère C., Maire P., Tondusson M., Abraham E. Three-dimensional terahertz computed tomography of human bones // *Applied optics*. 2012. Vol. 51, № 28. P. 6738–6744. doi: 10.1364/AO.51.006738

References

1. Moussy, F. (2010) Biomaterials for the developing world. *Journal of Biomedical Materials Research Part A*. 94 (4). pp. 1001–1003. doi: 10.1002/jbm.a.32866
2. Lahiri, D., Ghosh, S. & Agarwal, A. (2012) Carbon nanotube reinforced hydroxyapatite composite for orthopedic application: a review. *Materials Science and Engineering: C*. 32 (7). pp. 1727–1758. doi: 10.1016/j.msec.2012.05.010
3. Han, Y., Wei, Q., Chang, P., Hu, K., Okoro, O.V., Shavandi, A. & Nie, L. (2021) Three-dimensional printing of hydroxyapatite composites for biomedical application. *Crystals*. (11) 4. p. 353. doi: 10.3390/cryst11040353
4. Díaz, M., Barba, F., Miranda, M., Guitián, F., Torrecillas, R. & Moya, J.S. (2009) Synthesis and Antimicrobial Activity of a Silver-Hydroxyapatite Nanocomposite. *Journal of Nanomaterials*. 2009 (2009). pp. 1–6. doi: 10.1155/2009/498505
5. Zhang, T., Cai, W., Chu, F., Zhou, F., Liang, S., Ma, C. & Hu, Y. (2020) Hydroxyapatite/polyurea nanocomposite: Preparation and multiple performance enhancements. *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing*. 128. p. 105681. doi: 10.1016/j.compositesa.2019.105681
6. Fiume, E., Magnaterra, G., Rahdar, A., Verne, E. & Baino, F. (2021) Hydroxyapatite for biomedical applications: A short overview. *Ceramics*. 4 (4). pp. 542–563. doi: 10.3390/ceramics4040039
7. Zhao, X., Zheng, J., Zhang, W., Chen, X. & Gui, Z. (2020) Preparation of silicon coated-carbon fiber reinforced HA bio-ceramics for application of load-bearing bone. *Ceramics International*. 46 (6). pp. 7903–7911. doi: 10.1016/j.ceramint.2019.12.010
8. Khalid, P. & Suman, V.B. (2017) Carbon nanotube-hydroxyapatite composite for bone tissue engineering and their interaction with mouse fibroblast L929 In Vitro. *Journal of Bionanoscience*. 11 (3). pp. 233–240. doi: 10.1166/jbns.2017.1431
9. Ferreira, C. R. D., Santiago, A.A.G., Vasconcelos, R.C., Paiva, D.F.F., Pirihi, F.Q., Araújo, A.A., Motta F.V. & Bomio M.R.D. (2022) Study of microstructural, mechanical, and biomedical properties of zirconia/hydroxyapatite ceramic composites. *Ceramics International*. 48 (9). pp. 12376–12386. doi: 10.1016/j.ceramint.2022.01.102
10. Gregg, S.J. & Sing, K.S.W. (1982) *Adsorption, Surface Area and Porosity*. London: Academic Press.
11. Cox, S.C., Thornby, J.A., Gibbons, G.J., Williams, M.A. & Mallick, K.K. (2015) 3D printing of porous hydroxyapatite scaffolds intended for use in bone tissue engineering applications. *Materials Science and Engineering: C*. 47. pp. 237–247. doi: 10.1016/j.msec.2014.11.024
12. Akinribide, O.J., Mekgwe, G.N., Akinwamide, S.O., Gamaoun, F., Abeykoon, C., Johnson, O.T. & Olubambi, P.A. (2022) A review on optical properties and application of transparent ceramics. *Journal of materials research and technology*. 21. pp. 712–738. doi: 10.1016/j.jmrt.2022.09.027
13. Wagner, A., Ratzker, B., Kalabukhov, S., Sokol, M. & Frage, N. (2019) Residual porosity and optical properties of spark plasma sintered transparent polycrystalline cerium-doped YAG. *Journal of the European Ceramic Society*. 39 (4). pp. 1436–1442. doi: 10.1016/j.jeurceramsoc.2018.11.006
14. Shahmiri, R., Standard, O.C., Hart, J.N. & Sorrell, C.C. (2018) Optical properties of zirconia ceramics for esthetic dental restorations: A systematic review. *The Journal of prosthetic dentistry*. 119 (1). pp. 36–46. doi: 10.1016/j.prosdent.2017.07.009
15. Faingold, A., Cohen, S.R., Shahar, R., Weiner, S., Rapoport, L. & Wagner, H.D. (2014) The effect of hydration on mechanical anisotropy, topography and fibril organization of the osteonal lamellae. *Journal of Biomechanics*. 47 (2). pp. 367–372. doi: 10.1016/j.jbiomech.2013.11.022
16. Veljović, Đ., Vuković, G.D., Steins, I., Palcevskis, E., Uskoković, P., Petrović, R. & Janačković, Đ. (2013) Improvement of the mechanical properties of spark plasma sintered hap bioceramics by decreasing the grain size and by adding multi-walled carbon nanotubes. *Science of Sintering*. 45 (2). pp. 33–243. doi: 10.2298/SOS1302233V
17. Barabashko, M.S., Tkachenko, M.V., Neiman, A.A., Ponomarev, A.N. & Rezvanova, A.E. (2019) Variation of Vickers microhardness and compression strength of the bioceramics based on hydroxyapatite by adding the multi-walled carbon nanotubes. *Applied Nanoscience*. 10 (8). pp. 2601–2608. doi: 10.1007/s13204-019-01019-z
18. Barabashko, M.S., Tkachenko, M.V., Rezvanova, A.E. & Ponomarev, A.N. (2021) Analysis of temperature gradients in the hydroxyapatite ceramics with the additives of multi-walled carbon nanotubes. *Russian Journal of Physical Chemistry A*. 95 (5). pp. 1017–1022. doi: 10.1134/S0036024421050058
19. Mukherjee, S., Kundu, B., Chanda, A. & Sen, S. (2015) Effect of functionalisation of CNT in the preparation of HAp–CNT biocomposites. *Ceramics international*. 41 (3). pp. 3766–3774. doi: 10.1016/j.ceramint.2014.11.052
20. Lahiri, D., Singh, V., Keshri, A.K., Seal, S. & Agarwal, A. (2010) Carbon nanotube toughened hydroxyapatite by spark plasma sintering: Microstructural evolution and multiscale tribological properties. *Carbon*. 48 (11). pp. 3103–3120. doi: 10.1016/j.carbon.2010.04.047

21. Nikoghosyan, A.S., Ting, H., Shen, J., Martirosyan, R.M., Tunyan, M.Y., Papikyan, A.V. & Papikyan, A.A. (2016) Optical properties of human jawbone and human bone substitute Cerabone® in the terahertz range. *J. Contemp. Phys.* 51 (3). pp. 256–264. doi: 10.3103/S1068337216030087
22. Bawuah, P., Ervasti, T., Tan, N., Zeitler, J.A., Ketolainen, J. & Peiponen, K.E. (2016) Noninvasive porosity measurement of biconvex tablets using terahertz pulses. *International journal of pharmaceutics*. 509 (1–2). pp. 439–443. doi: 10.1016/j.ijpharm.2016.06.023
23. Kistenev, Yu.V., Nikolaev, V.V., Kurochkina, O.S., Borisov, A.V., Sandykova, E.A., Krivova, N.A., Tuchina, D.K. & Timoshina, P.A. (2019) Use of terahertz spectroscopy for in vivo studies of lymphedema development dynamics. *Optics and Spectroscopy*. 126. pp. 523–529. doi: 10.1134/S0030400X19050138
24. Bawuah, P., Markl, D., Farrell, D., Evans, M., Portieri, A., Anderson, A., Goodwin, D., Lucas, R. & Zeitler, J.A. (2020) Terahertz-based porosity measurement of pharmaceutical tablets: A tutorial. *J. Infrared, Millimeter, Terahertz Waves*. 41 (4). pp. 450–469. doi: 10.1007/s10762-019-00659-0
25. Bezmelnitsin, D.S., Lizunkova, D.A. & Shishkin, I.A. (2020) Opticheskiye svoystva nanostrukturirovannogo kremniya [Nanostructured silicon optical properties]. *Vestnik molodykh uchonykh i spetsialistov Samarskogo universiteta [Bulletin of young scientists and specialists of Samara University]*. 1 (16). pp. 261–266.
26. COMSOL. URL <https://www.comsol.ru>. Accessed 1 July 2024.
27. Fish, J. & Belytschko T. (2017) *A First Course in Finite Elements*. John Wiley & Sons.
28. Sizin, P.E. (2023) Teoreticheskoye i chislennoye modelirovaniye elektricheskoy provodimosti poristyykh sred [Theoretical and numerical modeling of electric conductance in porous media]. *Mining Informational and Analytical Bulletin*. 5. pp. 43–56. (in Russian). doi: 10.25018/0236_1493_2023_5_0_43
29. Focchi, S., Chiaramello, E., Marrella, G., Bonato, M., Parazzini, M. & Ravazzani, P. (2022) Modeling of core-shell magneto-electric nanoparticles for biomedical applications: Effect of composition, dimension, and magnetic field features on magnetoelectric response. *PLoS one*. 17 (9). p. e0274676. doi: 10.1371/journal.pone.0274676
30. Rezvanova, A.E., Kudryashov, B.S., Ponomarev, A.N., Knyazkova, A.I., Nikolaev, V.V. & Kistenev, Y.V. (2023) Composite hydroxyapatite-multi-walled carbon nanotubes: study of porosity by terahertz time domain spectroscopy. *Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics*. 14 (5). pp. 530–538. doi: 10.1371/journal.pone.0274676
31. Barabashko M., Ponomarev A., Rezvanova A., Kuznetsov V. & Moseenkov S. (2022) Young's modulus and vickers hardness of the hydroxyapatite bioce-ramics with a small amount of the multi-walled carbon nanotubes. *Materials*. 15 (15). p. 5304. doi: 10.3390/ma15155304
32. Rezvanova, A.E., Kudryashov, B.S., Skorobogatov, D.D. & Ponomarev, A.N. (2024) A model of the propagation of a terahertz pulse through ceramics based on hydroxyapatite. *Technical Physics*. 94 (3). p. 339. doi: 10.61011/JTF.2024.03.57372.18-24
33. Ray Optics Module User's Guide. URL <https://doc.comsol.com/5.4/doc/com.comsol.help.roptics>. Accessed 1 July 2024.
34. Borisenko, S.I., Revinskaya, O.G., Kravchenko, N.S. & Chernov, A.V. (2014) The refractive index of light and methods for its experimental determination. Tomsk: Publishing house of Tomsk Polytechnic University.
35. Huang, P., Zhou, B., Zheng, Q., Tian, Y., Wang, M., Wang, L., Li, J. & Jiang, W. (2020) Nano wave plates structuring and index matching in transparent hydroxyapatite-YAG: Ce composite ceramics for high luminous efficiency white light-emitting diodes. *Advanced Material*. 32 (1). p. 905951. doi: 10.1002/adma.201905951
36. Plazanet, M., Tasseva, J., Bartolini, P., Taschin, A., Torre, R., Combes, C., Rey, C., Michele, A.Di., Verezhak, M. & Gourrier, A. (2018) Time-domain THz spectroscopy of the characteristics of hydroxyapatite provides a signature of heating in bone tissue. *PLoS One*. 13 (8). p. e0201745. doi: 10.1371/journal.pone.0201745
37. Bessou, M., Chassagne, B., Caumes, J.-P., Pradère, C., Maire, P., Tondusson, M. & Abraham, E. (2012) Three-dimensional terahertz computed tomography of human bones. *Applied optics*. 51 (28). pp. 6738–6744. doi: 10.1364/AO.51.006738

Информация об авторах:

Резванова Анастасия Евгеньевна, младший научный сотрудник лаборатории молекулярного имиджинга и фотоакустики Института физики прочности и материаловедения СО РАН (Томск, Россия). E-mail: ranast@ispms.ru. ORCID ID: 0000-0002-7067-7979

Кудряшов Борис Сергеевич, инженер-исследователь лаборатории молекулярного имиджинга и фотоакустики Института физики прочности и материаловедения СО РАН (Томск, Россия). ORCID ID: 0009-0000-5133-4893

Пономарёв Александр Николаевич, кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, заведующий лабораторией молекулярного имиджинга и фотоакустики Института физики прочности и материаловедения СО РАН (Томск, Россия); Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники (Томск, Россия). ORCID ID: 0000-0003-1524-7842

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Information about the authors:

Rezvanova Anastasia E., Junior researcher at the laboratory of molecular imaging and photoacoustics, Institute of Strength Physics and Material Science, Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences (Tomsk, Russian Federation). E-mail: ranast@ispms.ru. ORCID ID: 0000-0002-7067-7979

Kudryashov Boris S., Research engineer at the laboratory of molecular imaging and photoacoustics, Institute of Strength Physics and Material Science, Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences (Tomsk, Russian Federation). ORCID ID: 0009-0000-5133-4893

Ponomarev Alexander N., Cand. Sc. (Physics and Mathematics), senior researcher, head of the laboratory of molecular imaging and photoacoustics, Institute of Strength Physics and Material Science, Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences (Tomsk, Russian Federation); Tomsk State University of Control Systems and Radioelectronics (Tomsk, Russian Federation). ORCID ID: 0000-0003-1524-7842

The authors declare no conflicts of interests.

Статья поступила в редакцию 22.11.2024; одобрена после рецензирования 23.12.2024; принята к публикации 26.12.2024

The article was submitted 22.11.2024; approved after reviewing 23.12.2024; accepted for publication 26.12.2024