

Title	In silico 解析に基づく歯科用コンポジットレジンの構造最適化
Author(s)	堺, 貴彦
Citation	平成27年度学部学生による自主研究奨励事業研究成果報告書. 2016
Version Type	VoR
URL	https://hdl.handle.net/11094/54676
rights	
Note	

Osaka University Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

Osaka University

平成 27 年度学部学生による自主研究奨励事業研究成果報告書

ふりがな 氏名	さかい たかひこ 堺 貴彦	学部 学科	歯学部	学年	4年
ふりがな 共同 研究者名	あべ ともひろ 安部 友大	学部 学科	歯学部	学年	4年 年
アドバイザー教員 氏名	山口 哲	所属	歯学研究科 顎口腔機能再建学講座		
研究課題名	<i>In silico</i> 解析に基づく歯科用コンポジットレジンの構造最適化				
研究成果の概要	研究目的、研究計画、研究方法、研究経過、研究成果等について記述すること。必要に応じて用紙を追加してもよい。				
<p>研究目的</p> <p>コンポジットレジン（CR）が金属代替材料として広く使用されるためには、機械的強度のさらなる向上が必要であり、CR の構造と強度の関係を調べるためのシミュレーション実験が数多く行われている。しかし、これまでのシミュレーションでは、球状フィラーを填入した単純なモデルが用いられているに過ぎず、不定形フィラーが複雑に組み合わせられて配合されている実際の市販 CR の構造が再現されていない¹⁾。そこで、我々は高解像度ナノ CT による撮影画像を利用すれば、フィラーの形状やサイズ、幾何学的配置などを忠実に再現した <i>in silico</i> CR モデルの作製が可能となり、この問題を解決できるのではないかと着想した。本研究では、高解像度のナノ CT 画像を用いてミクロスケールの構造を高精度に再現した <i>in silico</i> モデルを作成し、これを用いてマクロスケール解析での CR の機械的性質を評価することを目的とした。</p> <p>研究計画</p> <p>本研究の最終目標は、最も強度にすぐれた CR の構造を解明することであるが、研究期間内では、まず CR の不定形フィラーを高解像度で再現したミクロスケールのシミュレーションモデルを作成し、幾何学的構造を様々に変化させて均質化解析を行い、マクロスケールのヤング率とポアソン比を予測した。次に、得られた機械的性質、3 点曲げ試験を実施して得られる平均破断荷重を用いて 3 点曲げ解析を行い、試験片モデルの下部中央で得られるパラメータを用いて局所化解析を行った。以上より、ミクロスケールにおける不定形フィラーの幾何学的構造がマクロスケールの機械的性質に及ぼす影響を明らかにした。</p>					

研究方法

【*In vitro* 実験】

不定形シリカフィラーを体積含有率 31.2%（重量含有率 50%）で Bis-GMA/TEGDMA に填入した CR を作成し，500nm の解像度を持つナノ CT（SkyScan1272，東洋テクニカ）を用いて撮影を行った．撮影領域 $616 \times 616 \times 628.5 \mu\text{m}$ からランダムに $100 \times 100 \times 100 \mu\text{m}$ の領域を抽出し，10 種類のミクロスケールモデルを作成した（図 1）．

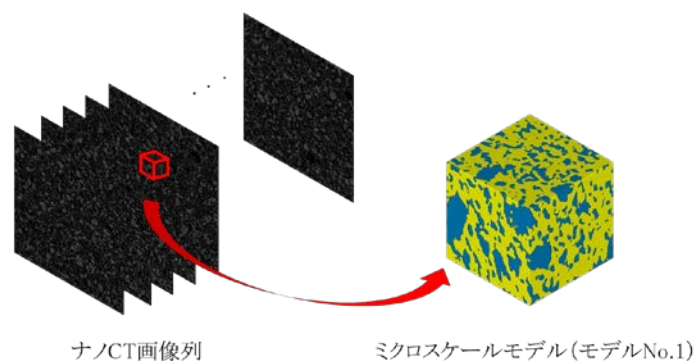


図 1. ナノ CT 画像から抽出したミクロスケールモデル

次に，小型卓上試験機（EZ-SX，島津製作所）を用いて ISO4049:2009 に準拠した 3 点曲げ試験を実施し，平均破断荷重を求めた（ $n=8$ ）．

【*In silico* 解析】

作成したミクロスケールモデルを用いて，均質化解析（Voxelcon2015, Quint）を行い，マクロスケールにおけるヤング率（ E_1, E_2, E_3 ）とポアソン比（ ν_1, ν_2, ν_3 ）を求め，統計学的に分析した（One-way ANOVA and Tukey's HSD test）．また，得られたヤング率とポアソン比，3 点曲げ試験で得られた平均破断荷重を用いて 3 点曲げ解析を行い，試験片モデルの下部中央で得られた垂直ひずみとせん断ひずみを入力として，局所化解析（Voxelcon2015）を行った．本研究では，破断が最大主ひずみ説にしたがうものとして，破断時のミクロスケールにおける最大主ひずみの分布と最大を求め，平均値と標準偏差を計算した．加えて，標準偏差を最大主応力，ミーゼス相当応力，せん断応力と比較した．

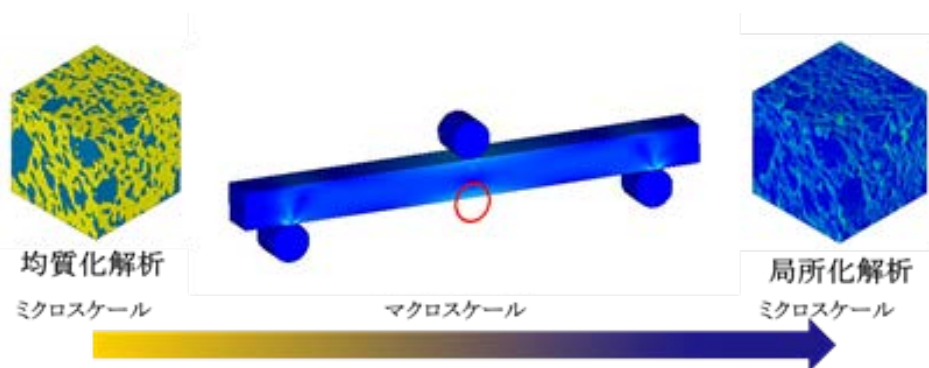


図 2. マルチスケール解析

研究経過

ヤング率については、 E_1 と E_3 、 E_2 と E_3 の間に有意差を認めた。また、 E_3 が3方向のうちで最大値を示した(図2左)。ポアソン比については、 ν_1 、 ν_2 、 ν_3 間で全てに有意差を認めた。 ν_1 が3方向のうち最大値を示し、 ν_2 が最小値を示した(図2右)。

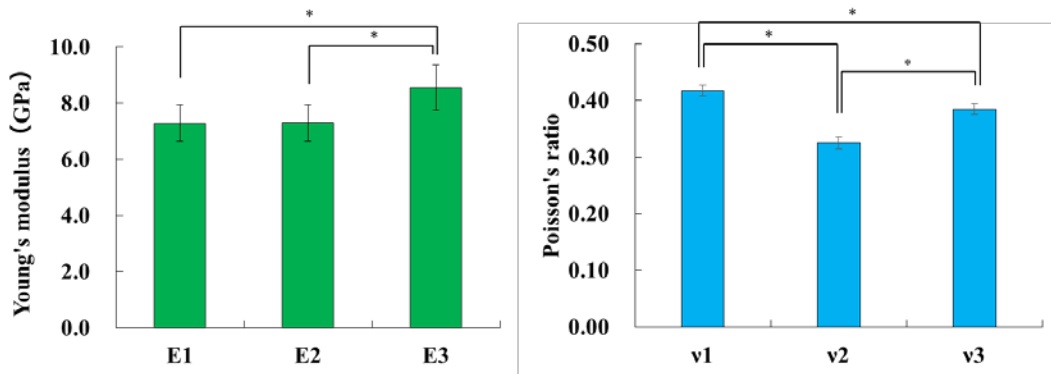


図2. 均質化解析の結果 (*: $p < 0.05$, one-way ANOVA and Tukey's HSD test)

最大主ひずみの標準偏差は6.719%となり、その他の基準と比べて最も小さな値を示した(図3)。

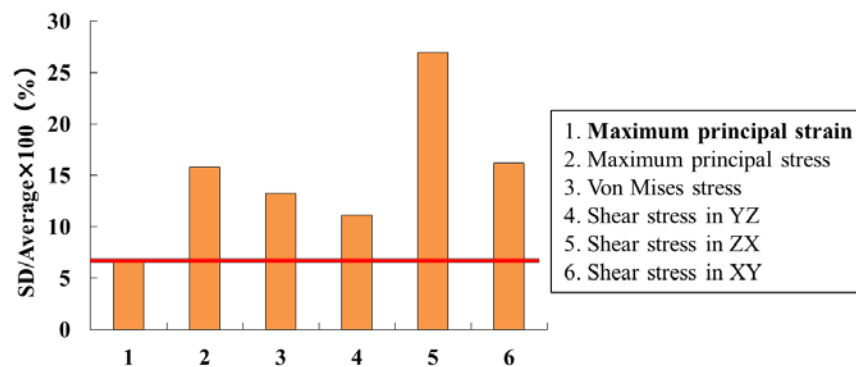


図3. 破断基準の比較

局所化解析の結果、いずれのモデルにおいても最大主ひずみの最大値は不定形フィラーの間のマトリックス内部に集中した。

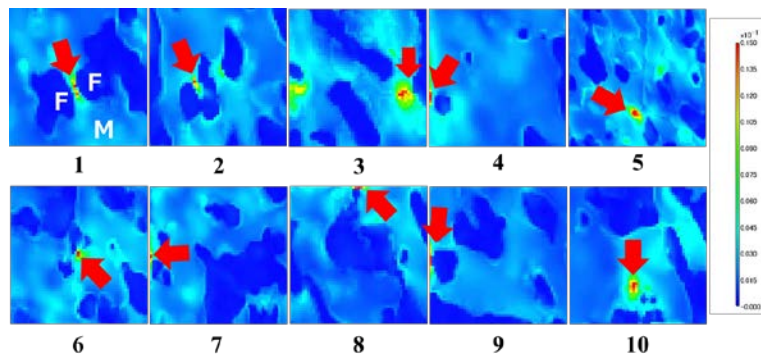


図4. 局所化解析の結果 (最大主ひずみ分布)

撮影領域から対象領域をランダムに抽出したにもかかわらず、再現性の高い体積含有率が得られたことから、非常に小さな領域であってもフィラーが均一に分布していることがうかがえる。したがって、本研究で撮影に用いた CR は解析するうえで妥当であったことが確認できた。

ヤング率とポアソン比に有意な異方性を認めたことから、ごく小さな領域においては CR に異方性があることが示唆された。不定形フィラーの配向性などを最適化することで、CR の強度を 1 方向に高められる可能性が明らかとなった。

最大主ひずみの最大値の標準偏差が他の基準と比べて最も小さいことから、不定形フィラーの分散具合が異なっているにもかかわらず、ほぼ同じ破断荷重を示すことが予想される。したがって、体積含有率が 31.2% の CR においては、破壊が最大主ひずみ説にしているという仮定が成り立っているものと考えられる。しかしながら、体積含有率が異なると破壊の性質が変わる可能性があることから、今後、最大主応力や最大せん断応力などさまざまなパラメータを閾値として検証を行うことで、あらゆるタイプの CR で強度設計が可能になるものと考えられる。

また、マトリックスレジン内部に最大主ひずみの最大値が生じたことから、マトリックスレジンの機械的性質を向上させることで、CR の機械的性質を改良できる可能性が示唆された。

研究成果

本研究で行った *in silico* 解析では、不定形シリカフィラーを含んだ CR が機械的特性に異方性を呈することが明らかとなり、さらに CR の初期破壊がマトリックスレジン内部から生じている可能性が示唆された。

本研究では、実際の市販 CR に使用されているフィラーをシミュレーションするとともに、ミクロスケールからのボトムアップでマルチスケール解析を行う手法を用いるため、従来叶わなかった複雑かつ多様なパラメータの最適化を実現できる点が特徴的である。これにより、実用的な最適構造条件の探索が可能となり、最終目標である高強度 CR の開発を飛躍的に加速できるものと期待できる。

参考文献

1. Tanimoto Y, Kitagawa T, Aida M, Nishiyama N. Experimental and computational approach for evaluating the mechanical characteristics of dental composite resins with various filler sizes. *Acta Biomater* 2: 633-9, 2006.