

УДК 539.3

PACS 46.00.00, 62.20.-x, 81.70.Bt

## Моделирование использования АСМ при исследовании полиуретановых образцов с карбонизированной поверхностью

О. К. Гаришин, А. К. Соколов\*

Институт механики сплошных сред УрО РАН, Пермь

\* Aleksandr\_Sokol@mail.ru

Одной из важнейших характеристик используемых в современной медицинской практике полиуретановых эндопротезов является качество их поверхности. Как правило, такие изделия покрываются специальным карбонизированным нанослоем для улучшения биосовместимости с живой тканью. С точки зрения механических свойств эти слои не обладают столь высокой эластичностью как полиуретан и подвержены возникновению в них хрупких микрповреждений. Поэтому надежное определение наличия и распределения микротрещин в нанокуглеродном слое на поверхности эндопротеза является важным фактором для оценки биосовместимости и возможной травматичности живых тканей в зоне контакта. В статье представлены результаты компьютерного моделирования контактного взаимодействия зонда АСМ с полиуретановыми образцами, имеющими карбонизированное нанопокрывтие. Основная задача исследований состояла в поиске ответа на вопрос о том, можно ли с помощью атомно-силовой микроскопии определить наличие микрповреждений в скрытом под карбонизированным покрытием полиуретане и произвести их классификацию. Очевидно, что их наличие может существенно усугубить повреждающее воздействие поверхностных трещин на живую биологическую ткань при деформировании эндопротеза. Рассматривались три варианта локальных микрповреждений, которые могут возникнуть в таких образцах: а) имеется вертикальная трещина в углеродном нанослое, повреждения в полиуретане отсутствуют; б) к вертикальной трещине в нанослое добавлено когезионное повреждение полиуретана (вертикальная трещина); в) к вертикальной трещине в нанослое добавлено адгезионное отслоение между слоем и полиуретаном (горизонтальная трещина). Компьютерное моделирование показало, что с помощью атомно-силовой микроскопии можно достаточно точно определять наличие микротрещин в поверхностном углеродном нанослое, в то время как скрытые под ним микрповреждения собственно полиуретана на наноиндентацию влияют существенно слабее.

**Ключевые слова:** атомно-силовая микроскопия; компьютерное моделирование; полиуретановые эндопротезы

*Поступила в редакцию 02.05.2023; после рецензии 21.05.2023; принята к опубликованию 22.05.2023*

## Modeling of the use of AFM in the study of polyurethane samples with a carbonized surface

O. K. Garishin, A. K. Sokolov\*

Institute of Continuous Media Mechanics UB RAS, Perm, Russia

\* Aleksandr\_Sokol@mail.ru

One of the most important characteristics of polyurethane endoprostheses used in modern medical practice is the quality of their surface. As a rule, such products are coated with a special carbonized nanolayer to improve biocompatibility with living tissue. In terms of mechanical properties, these layers are not as flexible as polyurethane and are prone to brittle microdamage. Therefore, a reliable determination of the presence and distribution of microcracks in the nanocarbon layer on the surface of an endoprosthesis is an important factor for assessing the biocompatibility and possible injury to living tissues in the contact zone. The article presents the results of computer simulation of an AFM probe contact interaction with polyurethane samples having a carbonized nanocoating. The main goal of the study was to find an answer to the question whether it is possible to determine the presence of microdamages in polyurethane hidden under a carbonized coating using atomic force microscopy, and to classify them. Obviously, their presence can significantly aggravate the damaging effect of surface cracks on living biological tissue during the deformation of an endoprosthesis. Three cases of local microdamages that can occur in such samples are considered: a) there is a vertical crack in the carbon nanolayer, no damage in polyurethane; b) a cohesive damage of polyurethane (a vertical crack) was added to the vertical crack in the nanolayer; c) an adhesive delamination between the layer and polyurethane (a horizontal crack) was added to the vertical crack in the nanolayer. Computer modeling has shown that using atomic force microscopy, it is possible to quite accurately determine the presence of microcracks in the surface carbon nanolayer, while microdamages of the polyurethane itself, hidden under it, have a much weaker effect on nanoindentation.

**Keywords:** atomic force microscopy; computer modeling; polyurethane endoprostheses

*Received 02 May 2023; revised 21 May 2023; accepted 22 May 2023*

doi: 10.17072/1994-3598-2023-2-35-43

## 1. Введение

Одним из наиболее перспективных медицинских материалов для аллопластики (метод пластической хирургии, использующий для восстановления внутренних органов человека материалы небиологического происхождения) являются полиуретаны. Высокая химическая стойкость и наличие в этом полимере уретановой функциональной группы, близкой по строению к пептидной группе белков  $-CO-NH$ , способствуют хорошей его биосовместимости с живыми тканями и особенно гемосовместимости. В настоящее время полиуретановые эластомеры (в различных модификациях) интенсивно используются при замене суставов, коронарных сосудов, клапанов сердца, герниопластики, косметическом эндопротезировании и т.д. [1–4]. Однако следует отметить что, хотя из всех известных эластомерных материалов полиуретаны наилучшим образом подходят для таких операций, они все же не идеальны в этом смысле. В медицинской практике известны случаи, когда применение эндопротезов может приводить к воспалению окружающих их тканей и другим возможным осложнениям (реакция живой ткани на инородное тело) [5, 6].

Одним из способов решения проблемы биологического отторжения является нанесение на поверхность полиуретановых имплантов углеродного покрытия [7–8], которые получают с помощью ионо-плазменной обработки. Такой прием также улучшает пролиферацию (разрастание организма путём размножения клеток делением) живой ткани и ее адгезию с эндопротезом [9–10]. При этом из-

вестны работы, свидетельствующие, что данные эффекты существенно зависят от морфологии поверхностного углеродного слоя [11–12] – шероховатости рельефа, наличия микроскопических трещин и разрывов и т.д.

На сегодняшний день в экспериментальных исследованиях внутреннего строения полимерных материалов на микро и наноструктурном уровне широко используются как электронные (SEM (scanning), ТЕМ (transmission)) [13–17], так и атомно-силовые микроскопы (AFM) [15, 18–20], причем довольно часто совместно. С помощью электронной микроскопии исследуется геометрия структуры, а атомно-силовые микроскопы позволяют получать еще и дополнительную информацию о «локальных» физико-механических свойствах материала на микроуровне, которые могут очень существенно отличаться от макроскопических [21–22].

В процессе эксперимента зонд АСМ сканирует выбранный участок поверхности образца. Получаемые при этом экспериментальные данные представляют собой зависимости между координатами точек сканирования, силой реакции, действующей на зонд, и глубиной его индентации в исследуемый материал. Эти результаты сами по себе (без дополнительных знаний о предмете исследований) малоинформативны. Поэтому требуется их дальнейшая теоретическая расшифровка с привлечением различных физическо-механических моделей [23–33].

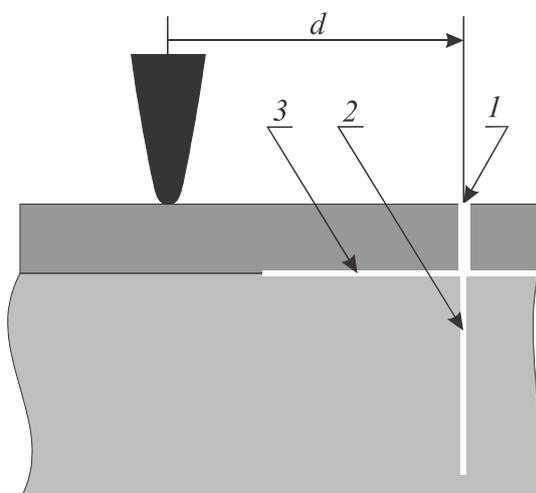
В данной работе представлены результаты компьютерного моделирования взаимодействия зонда АСМ с углеродным нанослоем, лежащем на плоской поверхности эластомерного материала.

При этом исследовались варианты, когда в эластомере и карбонизированном слое имеются локальные микрповреждения в виде трещин, расположенных вдоль и поперек к поверхности материала. Именно эти места являются наиболее проблемными с точки зрения возникновения микротравм в живой ткани, контактирующей с эндопротезом.

Основная задача исследований состояла в поиске ответа на вопрос можно ли по реакции зонда АСМ определить наличие микрповреждений в скрытом под карбонизированной поверхностью полиуретане и произвести их классификацию. Очевидно, что такие внутренние микроразрушения могут существенно усугубить повреждающее воздействие поверхностных трещин на живую биологическую ткань при деформировании эндопротеза – увеличение расхождение берегов трещины, наполнение одного края на другой (эффект ножниц) и т.д.

## 2. Компьютерное моделирование

Расчетная схема компьютерной модели, описывающей взаимодействие зонда АСМ с полиуретановым образцом, имеющим карбонизированный нанослой на его поверхности, представлена на рис. 1.



**Рис. 1.** Расчетная схема компьютерной модели взаимодействия зонда АСМ и полиуретанового образца с карбонизированным нанослой. 1 – трещина в карбонизированном нанослое; 2 – вертикальная трещина; 3 – горизонтальная трещина

Зонд (1) давит на горизонтальную поверхность образца в вертикальном направлении (2 – полиуретан, 3 – карбонизированный нанослой). Локальная поврежденность моделировалась в трех вариантах:

а) имеется вертикальная трещина в углеродном нанослое, повреждения в полиуретане отсутствуют;

б) к вертикальной трещине в нанослое добавлено когезионное повреждение полиуретана (вертикальная трещина);

с) к вертикальной трещине в нанослое добавлено адгезионное отслоение между слоем и полиуретаном (горизонтальная трещина).

Адгезионное повреждение без образования вертикальных трещин на нанослое в данной работе не рассматривалось.

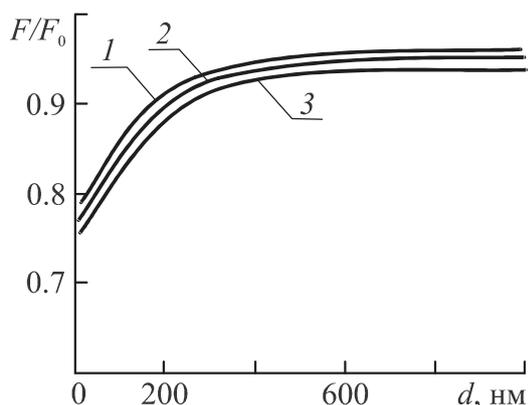
Размеры моделируемого образца составляли 20 (А)×10 мкм (В), что обеспечивало отсутствие влияния границ на напряженно-деформированное состояние материала вблизи зоны индентирования. Адгезионное отслоение располагалось симметрично по отношению к вертикальной трещине в нанослое и имело длину, равную 2×300 нм (слева и справа). Когезионное повреждение глубиной в 300 нм лежало в той же плоскости что и вертикальная трещина в нанослое.

Нижняя горизонтальная граница образца (А) жестко закреплялась, а вертикальные боковые поверхности были свободными от напряжений. Нагружение системы производилось за счет вертикального смещения зонда в глубину образца, причем его горизонтальное положение относительно трещины в нанослое варьировалось от 0 до 1000 нм. При расчетах толщину углеродного слоя задавали от 20 до 60 нм.

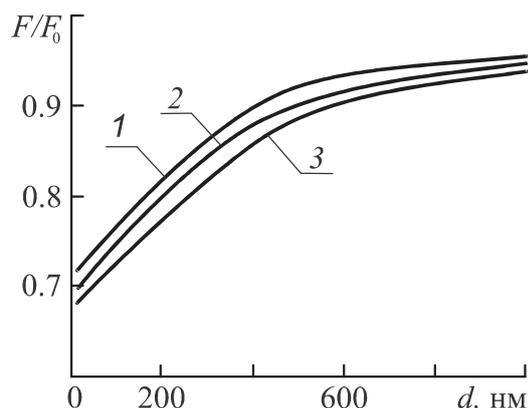
Полиуретан при расчетах считали несжимаемой нелинейно-упругой неогуковой средой с модулем сдвига равным 0.2 МПа. Углеродный слой моделировался как линейно-упругий материал с модулем Юнга  $E_L=9.6$  ГПа (соответствующий модуль сдвига  $G_L=3.2$  ГПа). Зонд АСМ считался абсолютно жестким телом. При таком соотношении жесткостей образца и слоя индентация зонда в углеродный слой практически отсутствовала (т.е. форма зонда в этом случае была несущественна – можно взять просто точечное усилие). Вертикальное смещение зонда АСМ приводило в основном к изгибу слоя и деформированию эластомера под ним (что и было подтверждено дальнейшими расчетами). Данную краевую задачу решали методом конечных элементов в двумерной постановке (плоские деформации).

## 3. Результаты моделирования

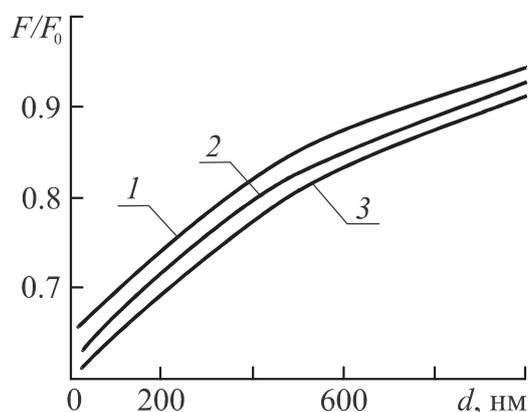
При расчетах глубина индентации зонда АСМ в образец всегда равнялась одной и той же величине – 60 нм. Соответственно при отсутствии повреждений сила вдавливания будет одна и та же во всех точках поверхности, и тем больше, чем толще будет углеродное покрытие. Обозначим ее как  $F_0$ , а силу, необходимую для внедрения зонда АСМ при наличии повреждений, как  $F$ . Анализ отношения  $F/F_0$  позволяет провести оценку потери жесткости системы при появлении микрповреждения и сделать выводы о его локализации, даже если его не видно в микроскоп под поверхностным



**Рис. 2.** Зависимость  $F/F_0$  от расстояния зонда АСМ до трещины в углеродном нанослое  $d$ ,  $\delta=20$  нм: 1 – трещина в нанослое; 2 – трещина в нанослое и когезионное повреждение; 3 – трещина в нанослое и адгезионное повреждение



**Рис. 3.** Зависимость  $F/F_0$  от расстояния зонда АСМ до трещины в углеродном нанослое  $d$ ,  $\delta=40$  нм: 1 – трещина в нанослое; 2 – трещина в нанослое и когезионное повреждение; 3 – трещина в нанослое и адгезионное повреждение



**Рис. 4.** Зависимость  $F/F_0$  от расстояния зонда АСМ до трещины в углеродном нанослое  $d$ ,  $\delta=60$  нм: 1 – трещина в нанослое; 2 – трещина в нанослое и когезионное повреждение; 3 – трещина в нанослое и адгезионное повреждение

карбонизированным слоем. Зависимости  $F/F_0$  от горизонтального расстояния точки приложения зонда до трещины в нанослое  $d$  представлены на рис. 2, 3 и 4. Рисунок 2 соответствует толщине углеродного покрытия  $\delta=20$  нм, рис. 3 –  $\delta=40$  нм, рис. 4 –  $\delta=60$  нм.

На графиках видно, что для всех слоев значения  $F/F_0$  вблизи микроповреждения явно меньше, чем на удалении, т.е. такой подход позволяет достаточно точно установить его местоположение. Чем толще нанослой, тем дальше распространяется эффект от наличия повреждения. В то же время различия между кривыми, соответствующими различным типам трещин, не столь выражены. Поэтому нельзя однозначно судить о том, какое именно микроповреждение произошло в данной точке образца, хотя и можно сделать определенные оценки.

Так, зависимости  $F/F_0$  от  $d$  для случая, когда трещина имеется только в углеродном слое (1), всегда лежат выше. Если же имеется еще и когезионное повреждение (2 – вертикальная трещина в

полиуретане), то зависимости будут самыми низкими. Кривые для варианта с трещиной в углеродном покрытии и отслоением нанослоя от полиуретана лежат примерно посередине между ними.

Следует отметить, что различие между этими зависимостями было существенно меньше, чем эффект от индентации зонда АСМ вблизи трещины в поверхностном карбонизированном слое.

На рис. 5–7 показаны поля распределения обезразмеренных значений интенсивности напряжений  $\sigma_1/E_L$  при индентации зонда АСМ в образцы с различными типами вышерассмотренных микроповреждений. Из их анализа можно сделать вывод, что во всех случаях наибольшие напряжения наблюдаются именно в углеродном слое, тогда как в полиуретане они практически на порядок меньше. Таким образом, наличие достаточно жесткого поверхностного слоя микроповреждения в приповерхностной области полиуретана не вызывает какой-то заметной концентрации напряжений под действием зонда АСМ. Благодаря жесткому покрытию сосредоточенная нагрузка относительно

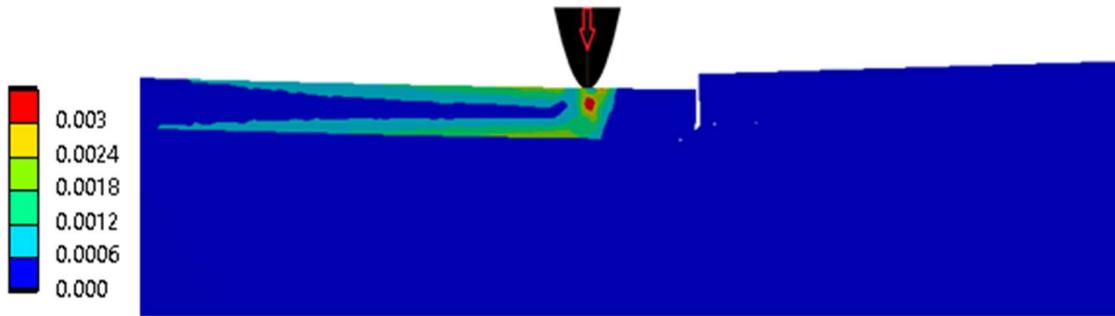


Рис. 5. Поля распределения интенсивности напряжений  $\sigma/E_L$  при индентации зонда АСМ в образце с трещиной в нанослое ( $\delta=40$  нм)

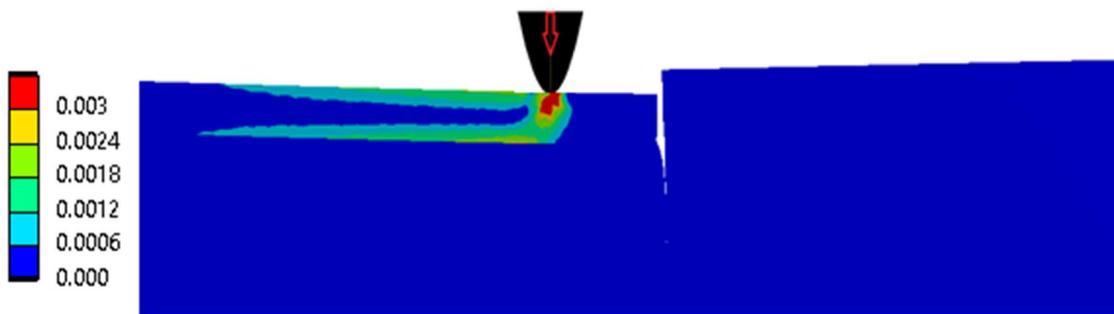


Рис. 6. Поля распределения интенсивности напряжений  $\sigma/E_L$  при индентации зонда АСМ в образце с трещиной в нанослое и когезионным повреждением полиуретана (вертикальная трещина) ( $\delta=40$  нм)

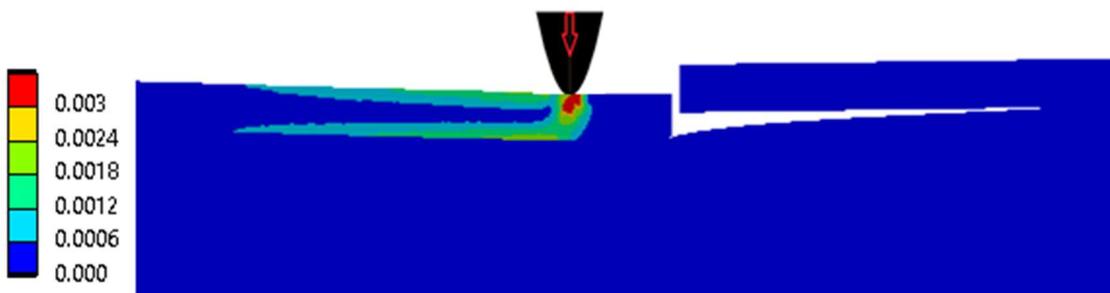


Рис. 7. Поля распределения интенсивности напряжений  $\sigma/E_L$  при индентации зонда АСМ в образце с трещиной в нанослое и адгезионным повреждением полиуретана (горизонтальная трещина) ( $\delta=40$  нм)

равномерно передается на эластомер и, соответственно, значения напряжений резко падают. Именно этим можно объяснить тот факт, что все кривые  $F/F_0$  от  $d$  на рис. 2–4 находятся поблизости друг от друга.

#### 4. Выводы

Компьютерное моделирование контакта зонда АСМ с полиуретановыми образцами, имеющими карбонизированное нанопокрывтие, показало, что атомно-силовая микроскопия позволяет достаточно точно определять, где находятся микротрещины в углеродном слое. Определение наличия и распределения таких микротрещин по поверхности эндопротеза является важным фактором с точ-

ки зрения оценки биосовместимости и возможной травматичности живых тканей в зоне контакта. В то же время, скрытые под карбонизированным покрытием микровреждения собственно полиуретана, влияют на наноиндентацию существенно слабее. То есть данный подход не дает возможности надежно судить о том, какие именно повреждения имеются во внутренних приповерхностных областях материала, хотя и позволяет оценить их наличие.

#### 5. Благодарности

Работа выполнена в рамках Государственного задания ПФИЦ УрО РАН. Регистрационный номер: АААА-А20-120022590044-7 (2020).

### Список литературы

1. *Shtilman M. I.* Polymeric Biomaterials. Part I. Polymer Implants. Boca Raton: CRC Press, 2003. 295 p.
2. *Domanska A., Boczkowska A., Izydorzak M., Jaegermann Z., Kurzydowski K. J.* Polyurethanes used in the endoprosthesis of joints // Polish Journal of Chemical Technology. 2010. Vol. 12. N. 3. P. 10–14. DOI: 10.2478/v10026-010-0025-y
3. *Жуковский В. А.* Полимерные эндопротезы для герниопластики. СПб.: Эскулап, 2011. 104 с.
4. *Резвова М. А., Овчаренко Е. А.* Полимерные протезы клапанов сердца: состояние и перспективы // Вестник трансплантологии и искусственных органов. 2018. Т. 20. № 2. С. 100–111. DOI: 10.15825/1995-1191-2018-2-100-111
5. *Song R., Murphy M., Li C., Ting K., Soo C., Zheng Z.* Current development of biodegradable polymeric materials for biomedical applications // Drug Design, Development and Therapy. 2018. Vol. 12. P. 3117–3145. DOI: 10.2147/DDDT.S165440
6. *Mariani E, Lisignoli G., Borzi R. M., Pulsatelli L.* Biomaterials: foreign bodies or tuners for the immune response // International Journal of Molecular Science. 2019. Vol. 20, 636. P. 1–42. DOI: 10.3390/ijms20030636
7. *Парфенов И. П., Должиков А. А., Ярош Л. Я.* Изучение биосовместимости сетчатых эндопротезов с наноразмерным алмазоподобным углеродным покрытием для пластики дефектов передней брюшной стенки // Научные ведомости Белгородского государственного университета Серия Медицина. Фармация. 2011. № 22 (117). Выпуск 16. С. 195–201.
8. *Chudinov V. S., Kondyurina I. V., Shardakov I. N., Svistkov A. L., Osorgina I. V., Kondyurin A. V.* Polyurethane modified by plasma ion implantation for medical application // Biophysics. 2018. Vol. 63. N. 3. P. 330–339. DOI: 10.1134/S0006350918030053
9. *Kondyurina I., Shardakov I., Nechitailo G., Terpigov V., Kondyurin A.* Cell growing on ion implanted polytetrafluorethylene // Applied Surface Science. 2014. Vol. 314. P. 670–678. DOI: 10.1016/j.apsusc.2014.07.057
10. *Denchai A., Tartarini D., Mele E.* Cellular response to surface morphology: electrospinning and computational modeling // Frontier Bioengineering and Biotechnology. 2018. Vol. 6, 155. DOI: 10.3389/fbioe.2018.00155
11. *Nedela O., Slepicka P., Svorcik V.* Surface modification of polymer substrates for biomedical applications // Materials. 2017. Vol. 10. N. 10, 1115. DOI: 10.3390/ma10101115
12. *Kondyurin A., Bilek M.* Ion Beam Treatment of Polymers. Application Aspects from Medicine to Space. 2nd ed. Oxford: Elsevier, 2014. 260 p.
13. *Le Cam J.-B., Huneau B., Verron E., Gornet L.* Mechanism of fatigue crack growth in carbon black filled natural rubber // Macromolecules. 2004. Vol. 37. P. 5011–5017. DOI: 10.1021/ma0495386
14. *Akutagava K., Yamaguchi K., Yamamoto A., Heguru H.* Mesoscopic mechanical analysis of filled elastomer with 3D-finite element analysis and transmission electron microtomography // Rubber Chemistry and Technology. 2008. Vol. 81. P. 182–189. DOI: 10.5254/1.3548203
15. *Zaimova D., Bayraktar E., Miskioglu I.* Design and manufacturing of new elastomeric composites: Mechanical properties, chemical and physical analysis // Composites Part B: Engineering. 2016. Vol. 105. P. 203–210. DOI: 10.1016/j.compositesb.2016.05.061
16. *Han T., Nagarajan S., Zhao H., Sun C., Wen S., Zhao S., Zhang L.* Novel reinforcement behavior in nanofilled natural rubber (NR) / butadiene-acrylonitrile rubber (NBR) blends: Filling-polymer network and supernanosphere // Polymer. 2020. Vol. 186. P. 122005–122012. DOI: 10.1016/j.polymer.2019.122005
17. *Li X., Yang Q., Ye Y., Zhang L., Hong S., Ning N., Tian M.* Quantifying 3D-nanosized dispersion of SiO<sub>2</sub> in elastomer nanocomposites by 3D-scanning transmission electron microscope (STEM) // Composites Part A. 2020. Vol. 131. P. 105778–105784. DOI: 10.1016/j.compositesa.2020.105778
18. *Watabe H., Komura M., Nakajima K., Nishi T.* Atomic Force Microscopy of Mechanical Property of Natural Rubber // Japanese Journal of Applied Physics. 2005. Vol. 44. N. 7S. P. 5393–5396. DOI: 10.1143/JJAP.44.5393
19. *Morozov I.* Structural-mechanical AFM study of surface defects in natural rubber vulcanizates // Macromolecules. 2016. Vol. 49. P. 5985–5992. DOI: 10.1021/acs.macromol.6b01309
20. *Shadrinov N. V., Nartakhova S. I.* Structure and properties of nitrile-butadiene rubber filled with carbon and basalt fibers // Inorganic Materials: Applied Research. 2017. Vol. 8. N. 1. P. 140–144. DOI: 10.1134/S207511331701035X
21. *Butt H.-J., Capella B., Kappl M.* Force measurements with the atomic force microscope: Technique, interpretation and applications // Surface Science Reports. 2005. Vol. 59. P. 1–152. DOI: 10.1016/j.surfrep.2005.08.003
22. *Schuh C. A.* Nanoindentation studies of materials // Materials Today. 2006. Vol. 9. N. 5. P. 32–40. DOI: 10.1016/S1369-7021(06)71495-X
23. *Muller V. M., Derjaguin B. V., Toporov Yu. P.* On two methods of calculation of the force of sticking

- of an elastic sphere to a rigid plane // *Colloids and Surfaces*. 1983. Vol. 7. N. 3. P. 251–259. DOI: 10.1016/0166-6622(83)80051-1
24. Johnson K. L. *Contact Mechanics*. Cambridge: Cambridge University Press, 1985. 452 p.
  25. Maugis D. Adhesion of spheres: The JKR - DMT transition using a Dugdale model // *Journal of Colloid and Interface Science*. 1992. Vol. 150. N. 1. P. 243–269. DOI: 10.1016/0021-9797(92)90285-T
  26. Feng J. Q. Contact behavior of spherical elastic particles: a computational study of particle adhesion and deformations // *Colloids and Surfaces A*. 2000. Vol. 172. P. 175–198. DOI: 10.1016/S0927-7757(00)00580-X
  27. Greenwood J. A. On the DMT theory // *Tribology Letters*. 2007. Vol. 26. N. 3. P. 203–211. DOI: 10.1007/s11249-006-9184-7
  28. Garishin O.K. Simulation of atomic-force microscope contact mode operating taking into account nonmechanical forces of interaction with a specimen surface // *Computational Continuum Mechanics*. 2012. Vol. 5. N. 1. P. 61–69. DOI: 10.7242/1999-6691/2012.5.1.8
  29. Ivaneiko I., Toshchevnikov V., Saphiannikova M., Stockelhuber K. W., Petry F., Westermann S., Heinrich G. Modeling of dynamic-mechanical behavior of reinforced elastomers using a multiscale approach // *Polymer*. 2016. Vol. 82. P. 356–365. DOI: 10.1016/j.polymer.2015.11.039
  30. Cole D. P., Henry T. C., Gardea F., Haynes R. A. Interphase mechanical behavior of carbon fiber reinforced polymer exposed to cyclic loading // *Composites Science and Technology*. 2017. Vol. 151. P. 202–210. DOI: 10.1016/j.compscitech.2017.08.012
  31. Malagu M., Goudarzi M., Lyulin A., Benvenut E., Simone A. Diameter-dependent elastic properties of carbon nanotube-polymer composites: Emergence of size effects from atomistic-scale simulations // *Composites Part B: Engineering*. 2017. Vol. 131. P. 260–281. DOI: 10.1016/j.compositesb.2017.07.029
  32. Sapkota J., Gooneie A., Shirole A., Martinez Garcia J. C. A refined model for the mechanical properties of polymer composites with nanorods having different length distributions // *Journal of Applied Polymer Science*. 2017. Vol. 134. N. 36, 45279. DOI: 10.1002/app.45279
  33. Hassanzadeh-Aghdam M. K., Ansari R., Darvizeh F. Multi-stage micromechanical modeling of effective elastic properties of carbon fiber/carbon nanotube-reinforced polymer hybrid composites // *Mechanics of Advanced Materials and Structures*. 2019. Vol. 26. N. 24. P. 2047–2061. DOI: 10.1080/15376494.2018.1472336
  2. Domanska A., Boczkowska A., Izydorzak M., Jaegermann Z., Kurzydłowski K. J. Polyurethanes used in the endoprosthesis of joints. *Polish Journal of Chemical Technology*, 2010, vol. 12, no. 3, pp. 10–14. DOI: 10.2478/v10026-010-0025-y
  3. Zhukovskii V. A. *Polimernye endoprotezy dlia gernioplastiki* [Polymer Endoprostheses for Hernioplasty]. St. Petersburg: Eskulap, 2011. 104 p. (In Russian)
  4. Rezvova M. A., Ovcharenko E. A. Polimernye protezy klapanov serdtsa: sostoianie i perspektivy [Polymeric heart valve prostheses: condition and perspectives]. *Vestnik transplantologii i iskusstvennykh organov* [Russian Journal of Transplantation and Artificial Organs], 2018, vol. 20, no. 2, pp. 100–111. DOI: 10.15825/1995-1191-2018-2-100-111 (In Russian)
  5. Song R., Murphy M., Li C., Ting K., Soo C., Zheng Z. Current development of biodegradable polymeric materials for biomedical applications. *Drug Design, Development and Therapy*, 2018, vol. 12, pp. 3117–3145. DOI: 10.2147/DDDT.S165440
  6. Mariani E., Lisignoli G., Borzi R. M., Pulsatelli L. Biomaterials: foreign bodies or tuners for the immune response. *International Journal of Molecular Science*, 2019, vol. 20, 636, pp. 1–42. DOI: 10.3390/ijms20030636
  7. Parfenov I. P., Dolzhikov A. A., Yarosh L. Ya. Izuchenie biosovmestimosti setchatykh endoprotezov s nanorazmernym almazopodobnym uglerodnym pokrytiem dlia plastiki defektov perednei briushnoi stenki [Study of biocompatibility of mesh endoprostheses with nanosized diamond-like carbon coating for repairs of anterior abdominal wall defects]. *Nauchnye vedomosti Belgorodskogo gosudarstvennogo universiteta Seriya Meditsina. Farmatsiya*, 2011, no. 22 (117), Issue 16, pp. 195–201. (In Russian)
  8. Chudinov V. S., Kondyurina I. V., Shardakov I. N., Svistkov A. L., Osorgina I. V., Kondyurin A. V. Polyurethane modified by plasma-ion implantation for medical application. *Biophysics*, 2018, vol. 63, no. 3, pp. 330–339. DOI: 10.1134/S0006350918030053
  9. Kondyurina I., Shardakov I., Nechitailo G., Terpugov V., Kondyurin A. Cell growing on ion implanted polytetrafluorethylene. *Applied Surface Science*, 2014, vol. 314, pp. 670–678. DOI: 10.1016/j.apsusc.2014.07.057
  10. Denchai A., Tartarini D., Mele E. Cellular response to surface morphology: electrospinning and computational modeling. *Frontier Bioengineering and Biotechnology*, 2018, vol. 6, 155. DOI: 10.3389/fbioe.2018.00155
  11. Nedela O., Slepicka P., Svorcik V. Surface modification of polymer substrates for biomedical ap-

## References

1. Shtilman M. I. *Polymeric Biomaterials. Part I. Polymer Implants*. Boca Raton: CRC Press, 2003. 295 p.

- plications. *Materials*, 2017, vol. 10. no. 10, 1115. DOI: 10.3390/ma10101115
12. Kondyurin A., Bilek M. *Ion Beam Treatment of Polymers. Application Aspects from Medicine to Space*. 2nd ed. Oxford: Elsevier, 2014. 260 p.
  13. Le Cam J.-B., Huneau B., Verron E., Gornet L. Mechanism of fatigue crack growth in carbon black filled natural rubber. *Macromolecules*, 2004, vol. 37, pp. 5011–5017. DOI: 10.1021/ma0495386
  14. Akutagava K., Yamaguchi K., Yamamoto A., Heguru H. Mesoscopic mechanical analysis of filled elastomer with 3D-finite element analysis and transmission electron microtomography. *Rubber Chemistry and Technology*, 2008, vol. 81, pp. 182–189. DOI: 10.5254/1.3548203
  15. Zaimova D., Bayraktar E., Miskioglu I. Design and manufacturing of new elastomeric composites: Mechanical properties, chemical and physical analysis. *Composites Part B: Engineering*, 2016, vol. 105, pp. 203–210. DOI: 10.1016/j.compositesb.2016.05.061
  16. Han T., Nagarajan S., Zhao H., Sun C., Wen S., Zhao S., Zhao S., Zhang L. Novel reinforcement behavior in nanofilled natural rubber (NR) / butadiene-acrylonitrile rubber (NBR) blends: Filling-polymer network and supernanosphere, *Polymer*, 2020, vol. 186, pp. 122005–122012. DOI: 10.1016/j.polymer.2019.122005
  17. Li X., Yang Q., Ye Y., Zhang L., Hong S., Ning N., Tian M. Quantifying 3D-nanosized dispersion of SiO<sub>2</sub> in elastomer nanocomposites by 3D-scanning transmission electron microscope (STEM). *Composites Part A*, 2020, vol. 131, pp. 105778–105784. DOI: 10.1016/j.compositesa.2020.105778
  18. Watabe H., Komura M., Nakajima K., Nishi T. Atomic force microscopy of mechanical property of natural rubber. *Japanese Journal of Applied Physics*, 2005, vol. 44, no. 7S, pp. 5393–5396. DOI: 10.1143/JJAP.44.5393
  19. Morozov I. Structural-mechanical AFM study of surface defects in natural rubber vulcanizates. *Macromolecules*, 2016, vol. 49, pp. 5985–5992. DOI: 10.1021/acs.macromol.6b01309
  20. Shadrinov N. V., Nartakhova S. I. Structure and properties of nitrile-butadiene rubber filled with carbon and basalt fibers. *Inorganic Materials: Applied Research*, 2017, vol. 8. no. 1, pp. 140–144. DOI: 10.1134/S207511331701035X
  21. Butt H.-J., Capella B., Kappl M. Force measurements with the atomic force microscope: Technique, interpretation and applications. *Surface Science Reports*, 2005, vol. 59, pp. 1–152, DOI: 10.1016/j.surfrep.2005.08.003
  22. Schuh C. A. Nanoindentation studies of materials. *Materials Today*, 2006, vol. 9, no. 5, pp. 32–40. DOI: 10.1016/S1369-7021(06)71495-X
  23. Muller V. M., Derjaguin B. V., Toporov Yu. P. On two methods of calculation of the force of sticking of an elastic sphere to a rigid plane. *Colloids Surf.*, 1983, vol. 7, no. 3, pp. 251–259. DOI: 10.1016/0166-6622(83)80051-1
  24. Johnson K. L. *Contact Mechanics*. Cambridge: Cambridge University Press, 1985. 452 p.
  25. Maugis D. Adhesion of spheres: The JKR - DMT transition using a Dugdale model. *Journal of Colloid and Interface Science*, 1992, vol. 150, no. 1, pp. 243–269. DOI: 10.1016/0021-9797(92)90285-T
  26. Feng J. Q. Contact behavior of spherical elastic particles: a computational study of particle adhesion and deformations. *Colloids Surf. A*, 2000, vol. 172, pp. 175–198. DOI: 10.1016/S0927-7757(00)00580-X
  27. Greenwood J. A. On the DMT theory. *Tribology Letters*, 2007, vol. 26, no. 3, pp. 203–2011. DOI: 10.1007/s11249-006-9184-7
  28. Garishin O.K. Simulation of atomic-force microscope contact mode operating taking into account nonmechanical forces of interaction with a specimen surface. *Computational Continuum Mechanics*, 2012, vol. 5, no. 1, pp. 61–69. DOI: 10.7242/1999-6691/2012/5/1/8
  29. Ivaneiko I., Toshchevnikov V., Saphiannikova M., Stockelhuber K. W., Petry F., Westermann S., Heinrich G. Modeling of dynamic-mechanical behavior of reinforced elastomers using a multiscale approach. *Polymer*, 2016, vol. 82, pp. 356–365. DOI: 10.1016/j.polymer.2015.11.039
  30. Cole D. P., Henry T. C., Gardea F., Haynes R. A. Interphase mechanical behavior of carbon fiber reinforced polymer exposed to cyclic loading. *Composites Science and Technology*, 2017, vol. 151, pp. 202–210. DOI: 10.1016/j.compscitech.2017.08.012
  31. Malagu M., Goudarzi M., Lyulin A., Benvenut E., Simone A. Diameter-dependent elastic properties of carbon nanotube-polymer composites: Emergence of size effects from atomistic-scale simulations. *Composites Part B: Engineering*, 2017, vol. 131, pp. 260–281. DOI: 10.1016/j.compositesb.2017.07.029
  32. Sapkota J., Gooneie A., Shirole A., Martinez Garcia J. C. A refined model for the mechanical properties of polymer composites with nanorods having different length distributions. *Journal of Applied Polymer Science*, 2017, vol. 134, no. 36, 45279. DOI: 10.1002/app.45279
  33. Hassanzadeh-Aghdam M. K., Ansari R., Darvizeh F. Multi-stage micromechanical modeling of effective elastic properties of carbon fiber/carbon nanotube-reinforced polymer hybrid composites. *Mechanics of Advanced Materials and Structures*, 2019, vol. 26, no. 24, pp. 2047–2061. DOI: 10.1080/15376494.2018.1472336.

**Просьба ссылаться на эту статью в русскоязычных источниках следующим образом:**

Гаришин О. К., Соколов А. К. Моделирование использования АСМ при исследовании полиуретановых образцов с карбонизированной поверхностью // Вестник Пермского университета. Физика. 2023. № 2. С. 36–44. doi: 10.17072/1994-3598-2023-2-36-44

**Please cite this article in English as:**

Garishin O. K., Sokolov A. K. Modeling of the use of AFM in the study of polyurethane samples with a carbonized surface. *Bulletin of Perm University. Physics*, 2023, no. 2, pp. 36–44. doi: 10.17072/1994-3598-2023-2-36-44

**Сведения об авторах**

1. *Олег Константинович Гаришин*, д. физ.-мат. наук, с.н.с., Институт механики сплошных сред УрО РАН, ул. Академика Королева, 1, Пермь, 614013.
2. *Александр Константинович Соколов*, инженер, Институт механики сплошных сред УрО РАН, ул. Ак. Королева, 1, Пермь, 614013.

**Author information**

1. *Oleg K. Garishin*, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Senior Researcher, Institute of Continuous Media Mechanics UB RAS; 1, Akademika Koroleva st., Perm, 614013, Russia.
2. *Alexander K. Sokolov*, Engineer, Institute of Continuous Media Mechanics UB RAS; 1, Akademika Koroleva st., Perm, 614013, Russia.