

## Силицирование гидроксиапатитных структур в имплантации костных тканей

Научный руководитель – Стебеньков Артём Михайлович

*Зимин Игорь Алексеевич*

*Студент (магистр)*

Волгоградский государственный медицинский университет, Волгоград, Россия

*E-mail: piratesld@mail.ru*

В последние годы значительное внимание уделяется созданию биокерамических материалов медицинского назначения, которые применяются при реконструкции дефектов костных тканей.

Так как синтетический нанокристаллический гидроксиапатит (ГАП- $\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$ ) является кристаллохимическим аналогом минеральной составляющей костей, то данный материал может быть использован для покрытия металлических и керамических имплантатов[1].

Структура гидроксиапатита позволяет различного рода замещения одних элементов другими. Известно, что силикат-ионы являются естественной компонентой межтканевой жидкости. Кремний это жизненно важный микроэлемент для формирования кости и поддержания нормальной ее структуры[3].

В данной работе была поставлена задача: разработать технологию, с помощью которой можно было бы улучшить свойства ГАП путем внедрения в него силикат - ионов, затем сравнить данные, полученные от ГАП и Si-ГАП, выявить частоту наиболее энергетически выгодной связи, которую можно задать лазеру для нанесения Si-ГАП на имплантат как покрытия.

Квантово-механический метод расчета. Метод необходим для подтверждения физической адекватности, а также для нахождения электронно-энергетических характеристик построенной модели. Из основных используемых квантово-механических методов расчета был выбран метод DFT так как он обладает наибольшей точностью по отношению к другим методам, что является необходимым условием в поставленной задаче. Данный квантово-механический метод расчета будет осуществляться с помощью программы Gaussian 09W[2].

Для дальнейшей оценки произведенной работы необходимо сравнить результаты расчетов с помощью графиков плотности состояния энергетического спектра.

Следуя этапам разработки технологии, необходимо найти частоту связи P-O и P=O в местах замещения. Для этого необходимо рассчитать колебания атомов исследуемых структур, используя те же координаты атомов, что и при расчетах пространственных структур методом DFT. Полученные частоты будут переданы специальному лазеру, которым необходимо обработать незамещенный ГАП и SiO<sub>2</sub>, осуществляя, таким образом, необходимые замещения. С помощью технологии силицирования ГАП появляются предпосылки для увеличения скорости биорезорбции, остеоиндукции, а также появляется возможность снизить хрупкость ГАП как покрытия на имплантат.

При осуществлении всех расчетов были получены необходимые данные для создания технологии силицирования гидроксиапатитных структур.

### Источники и литература

- 1) Баринов С.М., Комлев В.С. Биокерамика на основе фосфатов кальция. – М.: Наука, 2005. – 187 с.

- 2) Стебеньков А.М. Электронное строение и спектр одноэлектронных состояний тетраэдрических кристаллов с локальными дефектами. Диссертация ВолгГМУ, Волгоград 2009. – 36-46с.
- 3) Трубицын М.А., Габрук Н.Г., Олейникова И.И., Ле Ван Тхуан, Доан Ван Дат. Синтез перспективных материалов для костной хирургии и стоматологии на основе модифицированных наноразмерных гидроксиапатитов. – Фармакон. -2011. – № 3. – С. 35-39.

### Иллюстрации

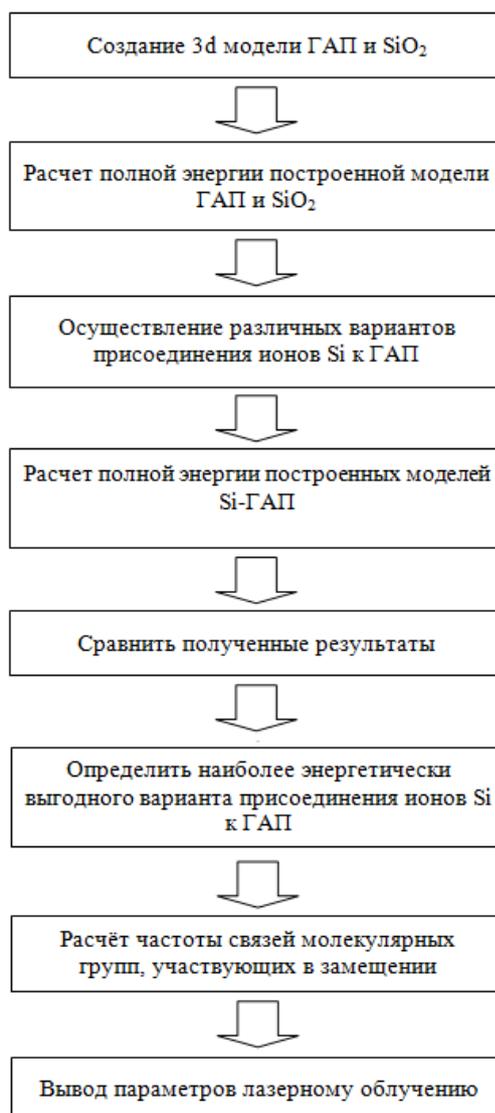


Рис. 1. Схема разработки технологии улучшения свойств ГАП

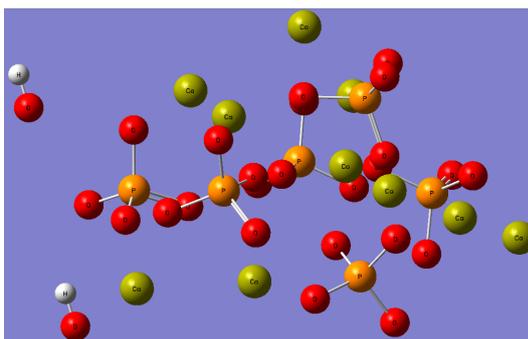


Рис. 2. 3d модель гидроксиапатита

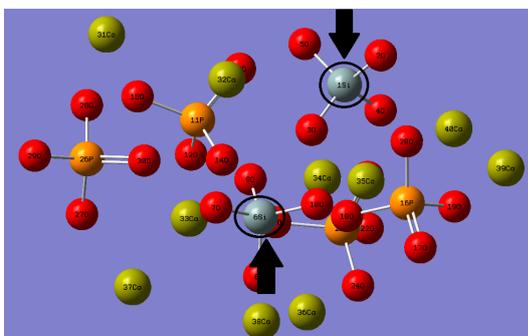


Рис. 3. Один из вариантов замещения фосфатной группы на ионы кремния

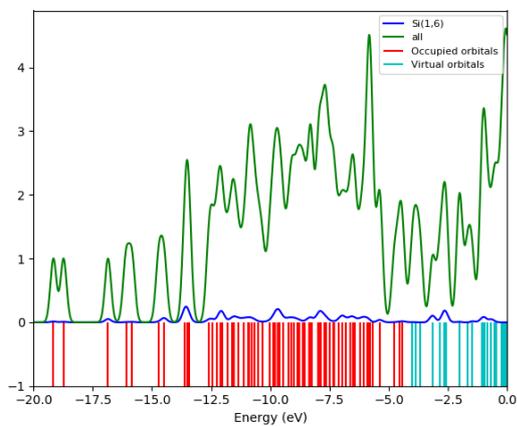


Рис. 4. График плотности состояний энергетического спектра, вклад заместителя (Si 1,6)

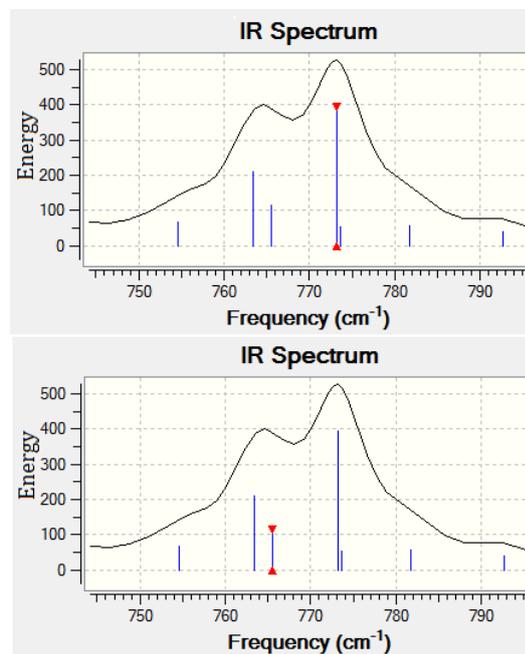


Рис. 5. Расчет частоты связей участвующих в замещении (P=O, P-O)