

Рисунок 22 – Схема обтекания уступа

Распределение поля скоростей показано на рис. 17-21.

В теории вязко-невязкого взаимодействия была предложена схема обтекания препятствия (рассмотрена в) [10]. Обтекания по результатам численного эксперимента имеют тот же характер что и схема.

**Список литературы:** 1. Лойцянский Л.Г. Механика жидкости и газа. – М.: Наука, 1970. – 456 с. 2. Кочин Н.Е. Теоретическая гидромеханика / Кочин Н.Е., Кибель И.А., Розе Н.В. – М.: ОГИЗ, 1948. – 432 с. 3. Милн-Томсон Л.М. Теоретическая гидродинамика. – М.: Мир, 1967. – 287 с. 4. Численные методы в динамике жидкостей (материалы кармановских чтений) / Под ред. О.М. Белоцерковского и В.П.Шидловского. – М.: Мир, 1981. – 320 с. 5. Oberkampf W.L. Domain Mappings for the Numerical Solution of Partial Differential Equations//Int. J. Numer Methods Eng. – 1976. – 10. – P. 211-223. 6. Рвачев В.Л. Теория R-функций и некоторые ее приложения. – Киев: Наук. думка, 1982. – 552 с. 7. Суворова И.Г. Автоматизация расчетов методом R-функций применительно к задачам стройиндустрии / Суворова И.Г., Шевченко А.Н. – Киев: Учеб.-метод. каб. высш. образования, 1991. – 60 с. 8. Рвачев В.Л. Численная реализация задачи о течении вязкой жидкости методом R-функций в системе ПОЛЕ-3 / Рвачев В.Л., Суворова И.Г., Шейко Т.И. // Мат. методы и физ.-мех. поля. – Львов, 1991. – № 33. – С. 95-99. 9. Суворова И.Г. Компьютерное моделирование осесимметричных течений жидкости в каналах сложной формы //Вестник НТУ ХПИ. – Харьков, 2004. – № 31. – С.141-148. 10. Гогши Л.В. Отрывные и кавитационные течения: основные свойства и расчетные модели / Гогши Л.В., Степанов Г.Ю. – М.: Наука, 1990. – 384 с.

Поступила в редколлегию 20.05.2006

УДК 539.3

**А.А.СТЕПУК**, МГУ им. М.В.Ломоносова, Москва, Россия;

**А.В.СТЕПУК**, канд.физ.-мат.наук;

**Л.В.АВТОНОМОВА**, канд.техн.наук; НТУ «ХПИ»

## СТРУКТУРНО-МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА И МОРФОЛОГИЯ БИОКЕРАМИКИ

Гідроксилатапіт кальцію (ГАП) має склад близький за фізико-хімічними параметрами до кісткової тканини й застосовується для різних цілей як кераміка, цемент, композитні імпланти у медицині. Показано, що термічна обробка зразків призводить до модифікації форми й структури кристалітів. Вивчено морфологію кристалітів, яка впливає на структурно-механічні властивості ГАП.

The Calcium Hydroxyapatite (HAp), which physical and chemical properties are similar to bone tissue, is applied in various medicine areas as ceramics, cements and composite implants. It is exposed that thermo treatment leads to crystallites form and structure modification. It is examined the crystallites morphology, that influence to structural and mechanical HAп properties.

Гидроксилapatит кальция  $\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$  (ГАП) и родственные ему фосфаты кальция представляют значительный интерес для медицины в роли биосовместимых материалов, поскольку ГАП является основным компонентом костной ткани, зубов [1,2]. Благодаря близости состава ГАП костному минералу и уникальным физико-химическим характеристикам, материалы на основе фосфатов кальция находят широкое использование в виде керамики, цемента и композитов.

Кристаллы синтетического апатита и его биологического аналога различаются по форме и размерам [1]. Так, апатит костной ткани представлен уплощенными кристаллами с размерами в плоскости менее 50 нм. Наиболее типичная форма кристаллов синтетического апатита – удлиненные гексагональные призмы. Поскольку практическое применение ГАП (в том числе и медико-биологическое) часто обусловлено состоянием и свойствами порошка, то контроль морфологии кристаллов ГАП, прочностных свойств представляется чрезвычайно важным [2].

Механические свойства ГАП определяются морфологией синтезированной биокерамики, которая, в свою очередь, зависит от начальной концентрации растворов, pH, температуры синтеза, ионной силы раствора и концентрации иона-модификатора. Последние приходится выбирать при планировании любого варианта осаждения ГАП из раствора. В работе предполагалось, что модифицирующее действие аниона на морфологию кристаллов ГАП может быть вызвано наличием специфического взаимодействия аниона с растущим кристаллом: а) адсорбцией аниона на поверхности апатита, б) замещением данным анионом фосфат- или гидроксид-иона в решетке ГАП.

Наиболее устойчивые кристаллиты ГАП и термически стабильные порошки получались при отжиге в муфельной печи при температурах (500, 700, 900, 1100 °C).

Рентгенографические исследования порошков проводили на дифрактометре ДРОН-3М в  $\text{Cu K}_\alpha$  излучении (ср. длина волны  $\lambda = 1,54 \text{ \AA}$ , никелевый  $\beta$ -фильтр). Регистрация проводилась в пошаговом режиме на интервале углов  $2\theta = 20\text{-}60^\circ$  с шагом 0,1 при экспозиции в точке 2 сек – для фазового анализа, и 0,03 с экспозицией 6 сек в диапазоне  $2\theta = 24\text{-}27^\circ$  – для исследования профилей дифракционных пиков.

По данным рентгенофазового анализа (РФА) при синтезе гидроксилapatита из разных кальциевых солей во всех случаях в качестве основного продукта был получен ГАП.

Значительная ширина линий на дифрактограммах свидетельствует о малых размерах частиц (табл. 1). Оценка средних размеров частиц проводилась при помощи формулы Дебая-Шеррера.

Рентгенографический анализ образцов показал, что в результате отжига порошков при температурах 500-1100°C размер кристаллов возрастает, о чем свидетельствует уменьшение ширины дифракционных пиков (см. табл.1). Увеличение размеров кристаллов является закономерным следствием усиления процессов массопереноса с увеличением температуры. Порошкообразная

система стремится минимизировать избыточную поверхностную энергию за счет укрупнения частиц. В результате рекристаллизации происходит рост более крупных частиц за счет поглощения малых.

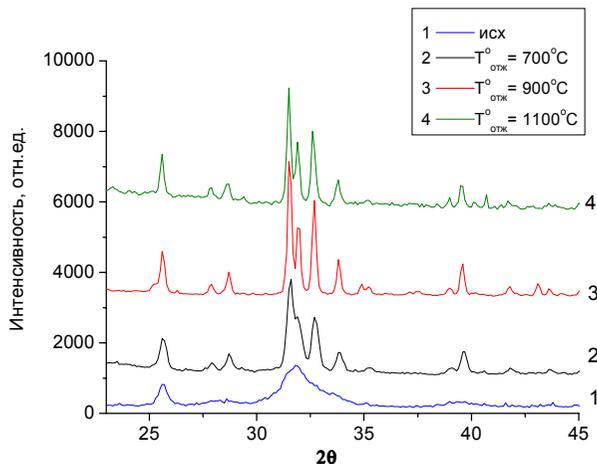


Рисунок 1 – Рентгенограмма образцов ГАП, полученного по реакции (1) из ацетата кальция

Таблица 1 – Размеры кристаллов образцов, полученных из разных кальциевых солей

CaX <sub>2</sub>	Исходный образец	T <sub>отж</sub> = 500 °C	T <sub>отж</sub> = 700 °C	T <sub>отж</sub> = 900 °C	T <sub>отж</sub> = 1100 °C
Хлорид	25нм	25нм	40 нм	85 нм	60 нм
Нитрат	15 нм	30 нм	40 нм	50 нм	70нм
Ацетат	25 нм	25 нм	40 нм	55 нм	80 нм

Согласно результатам РФА фазового состава образцов, прокаленных при T = 500-1100 °C, позволяет судить о термической стабильности биокерамики и косвенно оценивать их стехиометрию.

Исследование микроструктуры порошков проводили на сканирующем электронном микроскопе с автоэмиссионным источником LEO SUPRA 50VP. ИК-спектры поглощения образцов фиксировали на спектрометре Spectrum One (Perkin Elmer, США) в диапазоне 400-4000 см<sup>-1</sup> с шагом сканирования 4 см<sup>-1</sup>. Образцы прессовали в таблетки диаметром 13 мм с бромистым калием (давление ручного пресса – 7 метрических тонн) из расчета 1 мг порошка на 150 мг КВг. Во всех образцах по данным ИК-спектров содержание карбонатных ионов во всех образцах практически одинаково. Следует отметить, что апатит кости также содержит карбонатные группы (до 4 % масс.) [3].

На снимке микрофотографии исходного образца ГАП заметны крупные агрегаты с размерами в несколько мкм, состоящие из частиц нанометрового размера

(рис. 2). Таким образом, методом осаждения из водных растворов солей кальция были синтезированы порошки гидроксилалатита с размером первичных частиц 25 нм и высокой степенью агрегации. Микроморфология полученных образцов менялась в зависимости от природы исходных анионов (хлорид, нитрат, ацетат): пластинки, иглы, равноосные частицы. Термическая обработка порошков при 500-1100 °С в течение 2 ч. приводит к огрублению частиц – увеличение размера кристаллитов до 2 мкм и появлению огранки. Форма конечных частиц в существенной степени определяется структурой первичных агрегатов.

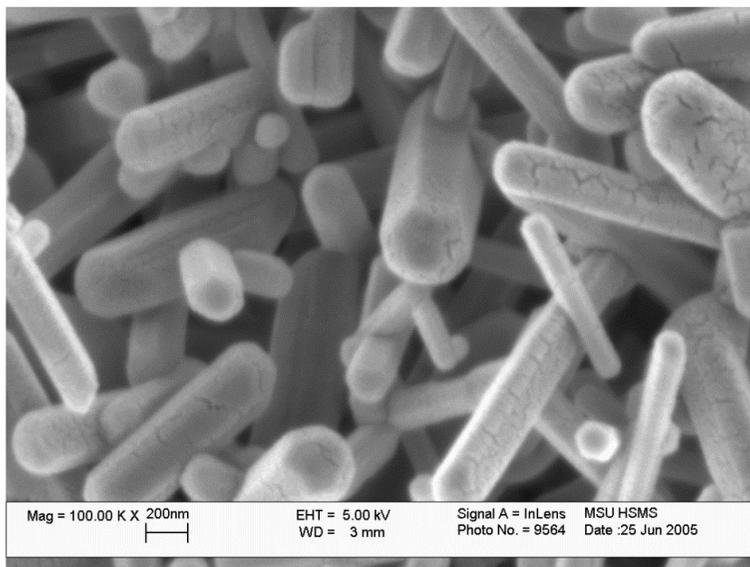


Рисунок 2 – Микрофотография кристаллов ГАП, синтезированных из нитрата кальция, после отжига при 900 °С.

Таким образом, методом осаждения из водных растворов солей кальция были синтезированы порошки гидроксилалатита с размером первичных частиц 25 нм и высокой степенью агрегации. Микроморфология полученных образцов менялась в зависимости от природы исходных анионов (хлорид, нитрат, ацетат): пластинки, иглы, равноосные частицы.

При проведении механических исследований и определении структурно-механических свойств выполнялось измерение прочности на сжатие и определение микротвердости (табл. 2) для образцов, прошедших различные режимы термообработки (рис. 3).

Результаты измерений прочности на сжатие хорошо коррелируют с измерениями микротвердости образцов. Были получены максимальные значения нагрузок для образцов с хитозаном порядка 130 МПа.

Возможности формирования различной текстуры ГАП позволяют модифицировать прочностные свойства полученной биокерамики, что подтверждается

широким диапазоном достигнутых прочностных свойств и микротвердости. В частности, концентрация и размеры сформированных кристаллитов, перспективы получения анизотропных структур могут быть использованы в качестве оптимизационных параметров для достижения высоких прочностных свойств такой керамики в рамках модели хрупкого разрушения Гриффитса.

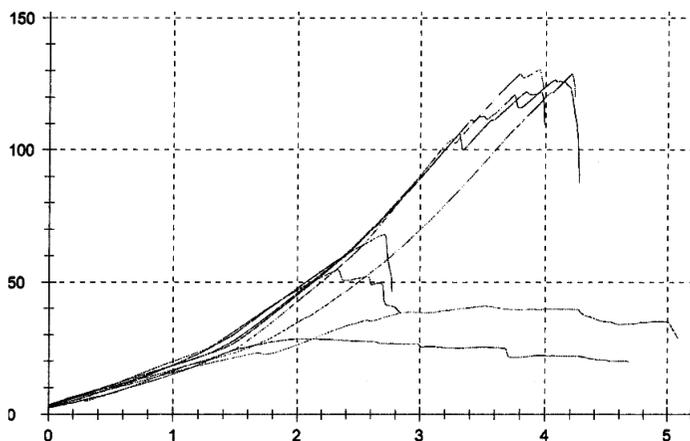


Рисунок 3 – Зависимость прочности на сжатие керамики ГАП (в МПа) от морфологии образцов при различных температурах отжига

Таблица 2 – Зависимость микротвердости при различном нагружении (в МПа) от морфологии образцов, ТСП с ГАП (10 %)

№ обр	Нагр, МПа	Сред. знач.	№ обр	Нагр, МПа	Сред. знач.	№ обр	Нагр, МПа	Сред. знач.
1	13,63	12,98	2	5,44	9,32	3	16,33	14,9
	13,56			4,83			16,61	
	14			7,8			11,66	
	10,09			9,99			14	
	15,02			5,44			16,27	
	12,4			4,83			15,5	
	11,16			10,75			21,71	
	13,96			16,19				
				7,48				
				15,71				
			6,72					
			8,32					

**Список литературы:** 1. Suchanek W., Yoshimura M. Processing and properties of hydroxyapatite-based biomaterials for use as hard tissue replacement implants. – J. Mater. Res. – 1998. – Vol. 13, No. 1. – P. 94-117. 2. Dorozhkin S.V., Epple M. Biological and medical significance of calcium phosphates. – Angew. Chem. Int. Ed. – 2002. – Vol. 41. – P. 3130-3146. 3. L.M.Rodriguez-Lorenzo, M.Vallet-Regi Controlled Crystallization of calcium phosphate apatites. – J. Chem. Mater. – 2000. – Vol. 12. – P. 2460-2465.

Поступила в редколлегию 22.09.2006.