

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

**МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
«Перспективные материалы с иерархической структурой
для новых технологий и надежных конструкций»**

**X МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
«Химия нефти и газа»**

Томск

Издательский Дом ТГУ

2018

DOI: 10.17223/9785946217408/117

МОДЕЛЬ НАЧАЛЬНОЙ СТАДИИ ОСАЖДЕНИЯ БИОАКТИВНОГО ПОКРЫТИЯ

¹Назаренко Н.Н., ^{1,2}Князева А.Г.

¹ФГБУН Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Россия

²Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «НИ Томский политехнический университет», Россия
nnelli@ispms.tsc.ru

Металлические элементы с модифицированными поверхностями широко используют в самых различных областях техники, включая металлообработку и производство медицинских изделий. Имплантаты должны быть биосовместимыми, для этого на них наносят кальций фосфатные покрытия. Одним из наиболее эффективных методов нанесения кальцийфосфатных (КФ) покрытий является метод микродугового оксидирования (МДО). Эта перспективная технология позволяет создавать КФ покрытия на поверхности металлических имплантатов с градиентной поровой структурой и с повышенной биологической активностью. Кроме того, этот метод позволяет создавать на поверхности титана и его сплавов покрытия, характеризующиеся широким спектром физико-химических свойств. Выяснено, что электрокинетические явления в значительной степени определяют формирование покрытий, особенно на начальной стадии. Заряд поверхности влияет на формирования новой фазы на поверхности подложки, и в дальнейшем, на формирование структуры растущего покрытия. Заряд возникает в результате адсорбции ионов, находящихся в электролите, или вследствие диссоциации молекул на твердой поверхности. Этот заряд может быть обнаружен при наложении электрического поля на электролит, когда отрицательно и положительно заряженные частицы начинают притягиваться соответственно к аноду и катоду.

В настоящей работе предложена и исследована модель начальной стадии осаждения биоактивного покрытия с выделением структурного элемента поверхности. Математическая модель включает уравнения диффузии с учетом переноса ионов под действием электрического поля (для каждого вида ионов) и уравнение для расчета электрического поля. Закон распределения заряда на поверхности подложки заданной формы также задан. Выделенный элемент поверхности характеризуется выпуклостью и впадиной и рассматривается как повторяющийся элемент структуры. Для удобства численного решения задачи делается замена переменных, переводящая область неправильной формы в прямоугольную. Для разработки подходящего вычислительного алгоритма и изучения особенностей, вносимых новыми параметрами, каждая из подзадач (диффузионная и электрическая) была проанализирована независимо. Ранее была исследована электрическая подзадача, включающая уравнение Пуассона с заданным распределением концентраций. В данной работе рассмотрена диффузионная часть задачи, учитывающая перераспределение ионов в жидкой и твердой фазах и образование нового вещества в покрытии. Получаемая при этом система нелинейных уравнений решается численно в безразмерных переменных. Разработанный алгоритм численного решения основан на неявной разностной схеме. В процессе расчетов исследуется динамика начальной стадии осаждения ионов и соединений для различных форм поверхности.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23.