**Грубова, Ирина Юрьевна.**

**Механизмы межатомного взаимодействия на границе раздела титан-кальций-фосфатное покрытие : первопринципное исследование : диссертация ... кандидата физико-математические наук : 01.04.07 / Грубова Ирина Юрьевна; [Место защиты: С.-Петерб. гос. ун-т]. - Томск, 2018. - 251 с. : ил.; 14,5х20,5 см.**

**Оглавление диссертациикандидат наук Грубова Ирина Юрьевна**

**ВВЕДЕНИЕ**

**1. ОБЩИЕ СВЕДЕНИЯ О СТРУКТУРЕ ГИДРОКСИАПАТИТА И ТЕХНОЛОГИЯХ ФОРМИРОВАНИЯ БИОСОВМЕСТИМЫХ ПОКРЫТИЙ НА ЕГО ОСНОВЕ ДЛЯ ВНУТРИКОСТНЫХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ ИМПЛАНТАТОВ**

**19**

**1.1. Гидроксиапатит: структура и свойства**

**1.2. Биосовместимые покрытия на основе гидроксиапатита, сформированные на металлической подложке**

**1.3 Механические и адгезионные свойства гидроксиапатитовых покрытий\***

**1.4. Фундаментальные теоретические исследования гидроксиапатита с помощью компьютерного моделирования**

**2. ТЕОРИЯ И МЕТОДОЛОГИЯ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ**

**2.1. Численные методы моделирования**

**2.2. Теория функционала электронной плотности**

**2.2.1. Уравнение Шредингера**

**2.2.2. Приближение Борна — Оппенгеймера**

**2.2.3. Теория Томаса—Ферми**

**2.2.4. Теоремы Хоэнберга — Кона**

**2.2.5. Уравнение Кона-Шэма**

**2.2.6. Приближения обменно-корреляционной энергии**

**2.2.7. Волновая функция**

**2.3. VASP (The Vienna Ab initio Simulation Package) код**

**3. ПЕРВОПРИНЦИПНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МЕЖАТОМНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НА ГРАНИЦЕ РАЗДЕЛА ТИТАН/ПОКРЫТИЕ НА**

**ОСНОВЕ ГИДРОКСИАПАТИТА ДЛЯ БИОМЕДИЦИНСКИХ ПРИМЕНЕНИЙ\***

**3.1. Метод расчета**

**3.2. Элементарные ячейки гидроксиапатита и рутила**

**3.3. Поверхности ГА (001) и 1ТЮ2 (110)**

**3.3.1. Кислородные вакансии в структуре поверхности гТЮ2 (110)**

**3.4. Модель интерфейса**

**4. ВЛИЯНИЕ ЗАМЕЩЕНИЯ ФОСФАТНЫХ ГРУПП АНИОНАМИ КРЕМНИЯ В СТРУКТУРЕ ГИДРОКСИАПАТИТА НА ПРОЧНОСТЬ СЦЕПЛЕНИЯ НА ГРАНИЦЕ РАЗДЕЛА АМОРФНОГО ГА С АМОРФНЫМ ДИОКСИДОМ ТИТАНА**

**4.1 Метод расчета**

**4.2. Замещение фосфатных групп в структуре гидроксиапатита анионами кремния для выбранных интерфейсов**

**4.3 Расчёт предела прочности (при растяжении) аГА / аТЮ2 и аБ1ГА / аТЮ2 интерфейсов**

**ЗАКЛЮЧЕНИЕ**

**СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ**

**Приложение А Расчёт ПЭС**

**133**