

# АТОМИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭНЕРГИИ ПЕРЕХОДА ИЗ $\beta$ - В $\alpha$ - ФОРМУ $\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2$

*Кнотько А.В.,\* Мусоев Ш.А., Мардонова Р., Ерёмин Н.Н.*

*МГУ, Москва, Россия*

*\*knotko@inorg.chem.msu.ru*

Средний фосфат кальция (трикальцийфосфат (ТКФ),  $\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2$ ) широко используется для регенерации поврежденной костной ткани, поскольку в форме спеченного керамического материала он проявляет остеокондуктивные, а в некоторых случаях и остеоиндуктивные свойства. Другая важная область применения ТКФ для регенеративной медицины – это использование его как высокоосновного компонента смеси для формирования цементов на основе брусита  $\text{CaHPO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ , применяемых для залечивания костных дефектов сложной формы. Для указанных медицинских применений используются две формы ТКФ – термодинамически стабильная при комнатной температуре  $\beta$  форма со структурой витлокита и  $\alpha$  форма с с моноклинной структурой, производной от структуры глазерита, стабильная при температуре выше 1430 К. Фазовый переход из  $\beta$ - в  $\alpha$ - форму ТКФ, как показывают многочисленные ДТА и ДСК исследования, эндотермичен, однако численные оценки энергии решеток этих форм ТКФ, сделанные на основе потенциалов межатомного взаимодействия, одинаковых для обеих модификаций, показывают небольшую энергетическую предпочтительность  $\alpha$ -ТКФ. Кроме того, наличие в структуре витлокита ( $\beta$ -ТКФ) наполовину заполненной позиции Са позволяет ожидать энтропийной стабилизации именно этой формы при высоких температурах, что противоречит экспериментальным данным. В данной работе методами атомистического моделирования были проведены оценки энергий точечных дефектов (катионного и анионного замещения, вакансий Са) в  $\beta$ - и  $\alpha$ - формах  $\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2$ , показавшие, что для объяснения экспериментально наблюдаемых термодинамических характеристик перехода из  $\beta$ - в  $\alpha$ - форму  $\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2$  необходим учет энтропийного и энергетического факторов, связанных с распределением катионов по 6 структурным вакансиям структуры  $\alpha$ -  $\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2$  по сравнению со структурой глазерита.