

# Visualización cristalográfica de la hidroxiapatita

José Luis Gómez Ortega, Nora Elizondo Villarreal,  
Héctor Martín Guerrero Villa  
Facultad Ciencias Físico Matemáticas-UANL.  
jogomez@ccr.dsi.uanl.mx, nelizond@ccr.dsi.uanl.mx,  
hguerrero@fcfm.uanl.mx

## RESUMEN

*Según ensayos clínicos, el calcio de la Hidroxiapatita es una de las formas más absorbibles y más eficaces de calcio para la prevención de la pérdida del hueso. La superficie de la hidroxiapatita ayuda a atraer y sostener en reserva al potasio, el magnesio, el boro, el cinc, el sílice, y el cromo. En este trabajo se presenta una visualización de la estructura cristalina de la hidroxiapatita.*

## PALABRAS CLAVE

Hidroxiapatita, cristalografía, red cristalina, eje tornillo.



## ABSTRACT

*According to clinical tests, the calcium of the Hydroxyapatite is one of the easiest to absorb as well as one of the more effective forms of calcium for the prevention of bone loss. The surface of the Hydroxyapatite aids to attract and to maintain in reserve potassium, magnesium, boron, zinc, silica, and chromium. In this work is showed a visualization of the Hydroxyapatite's crystal structure.*

## KEYWORDS

Hydroxyapatite, crystallography, crystal lattice structure, screw axis.

## INTRODUCCIÓN

La hidroxiapatita  $\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$  es una forma de fosfato que tiene una gran cantidad de aplicaciones tales como la separación y la purificación de proteínas y los implantes de hueso. Para cada aplicación, el uso de las materias primas de calcio es optimizado especificando las propiedades físicas y químicas tales como: la geometría, la dimensión, la densidad, el tamaño del poro, la fuerza mecánica, la pureza, y la fase química del material.

La hidroxiapatita es un compuesto cristalino integrado por tres moléculas de fosfato del calcio y de una molécula de hidróxido de calcio. El concentrado de la hidroxiapatita es la matriz de calcio de la proteína encontrada en el hueso sin procesar. Esta sustancia natural contiene aproximadamente 14% la proteína del colágeno y 4% de otras proteínas y aminoácidos pequeños (sobre todo hidroxiprolina, glicina, y ácido glutámico). El calcio abarca entre el 24 - 30% de la matriz de la hidroxiapatita y junto con varios minerales (cinc, potasio, silicio, manganeso, hierro) forma un conjunto biodisponible activo de calcio.

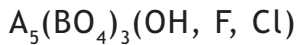
Se ha realizado un enorme crecimiento en las investigaciones de ciencia de los biomateriales. Las cirugías ortopédicas comunes ahora exigen una cantidad grande de substitutos bioactivos de hueso con una variedad de respuestas osteogénicas. En el sistema del fosfato de calcio, la hidroxiapatita  $\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$  y el fosfato tricálcico  $\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2$  son excelentes materiales bioactivos convenientes para el prótesis duro del tejido fino.

Usando métodos de proceso especiales, muchos materiales bioactivos se han fabricado en formas de polvo y de bulto con variaciones en porosidad. Tales materiales se utilizan en cirugía ortopédica.<sup>1,2,3,4,5</sup>

**HIDROXIAPATITA**

Los minerales del grupo de la apatita son un grupo de fosfatos, arseniatos y vanadatos que tienen estructuras hexagonales o monoclinicas pseudo-hexagonales muy similares. Este grupo incluye varios minerales tales como la apatita (de donde este grupo consigue su nombre), mimetita, piromorfita y vanadinita. Apatita es el nombre general para los minerales: clorapatita, fluorapatita e hidroxiapatita (figura 1 y 2).

La fórmula general para el grupo apatita es:



Los cationes A pueden ser varios iones metálicos tales como calcio, bario, sodio, plomo, estroncio, lantano y/o cerio. Los cationes B pueden ser fósforo, vanadio o arsénico. Los grupos del anión de carbonato,  $\text{CO}_3$ , y los grupos del anión de silicato,  $\text{SiO}_4$ , pueden sustituir en un grado limitado a los grupos  $\text{BO}_4$ .<sup>6</sup>

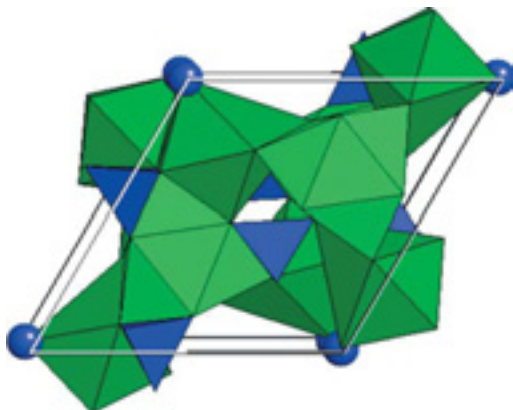


Fig. 1. Hidroxiapatita.

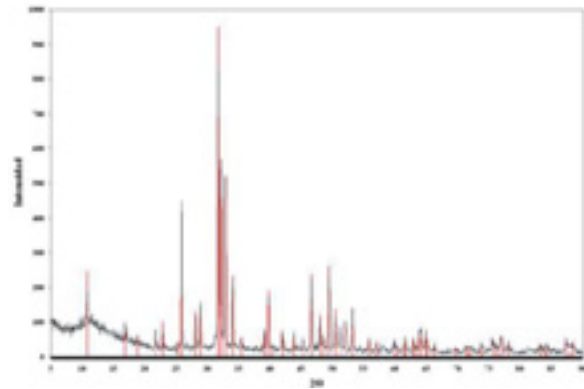


Fig. 2. Difractograma de la hidroxiapatita  $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3(\text{OH})$ .

Tabla I. Características de la estructura cristalina de la hidroxiapatita segun Hughes, *et al*.

Celda	a = 9.36Å,	b = 9.36Å,	c = 6.86Å;
	$\alpha = 90^\circ$	$\beta = 90^\circ$	$\gamma = 120^\circ$
SGR	P 63 / m		
Clase	6 / m		
Átomo	Coordenada*		
	X	Y	Z
Ca	2/3	1/3	0.0016
Ca	-0.0070	0.2416	1/4
P	0.3694	0.3984	1/4
O	0.4859	0.3273	1/4
O	21/45	0.5882	1/4
O	0.2575	0.3414	0.0707
OH	0	0	1/4

\*Las coordenadas son coordenadas reducidas.

**GENERACIÓN DE LA ESTRUCTURA CRISTALINA**

Como modelo de la estructura cristalina de la hidroxiapatita se utilizaron los resultados expuestos en el trabajo de Hughes, J. M., M. Cameron, and K.D. Crowle.<sup>7</sup> Los datos corresponden a la tabla I. En la visualización se puede exhibir la hidroxiapatita con el modelo de Pauling. Mostrándose las propiedades de la estructura cristalina, mediante el software. La aplicación que se utilizó fue Crystal Office 98.

Los radios del enlace covalente están dados en la tabla II.

Tabla II. Radios de enlaces covalentes de los elementos presentes en HAp.

Elemento	Radio Covalente
Calcio	1.740 Å
Fósforo	1.056 Å
Oxígeno	0.728 Å
Hidróxido	0.680 Å

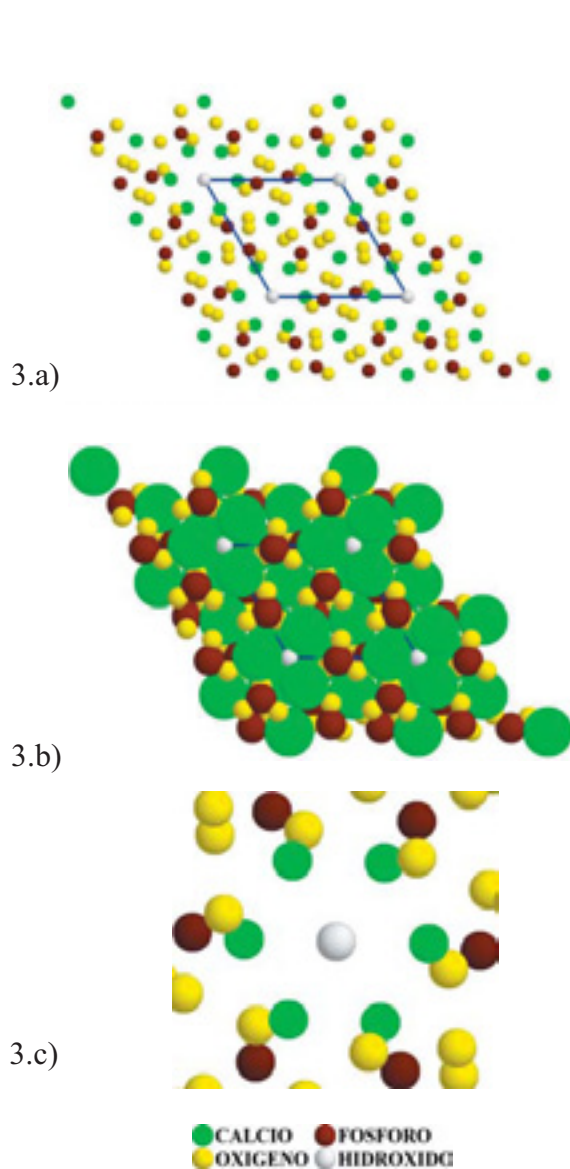


Fig. 3. La figura muestra: a) los átomos con un radio de 0.5 Å, b) los átomos con los radios correspondientes a la tabla 2, c) la aparente distribución hexagonal de los enlaces Ca-OH con un radio de 0.5 Å.

Con el modelo podemos observar la red cristalina de la hidroxiapatita en el plano cristalográfico 001 (figura 3a y 3c), los átomos son representados por esferas de radio 0.5 armstrongs (figura 3a). En esta figura se puede visualizar un aparente acomodamiento hexagonal de los átomos de calcio alrededor de los de hidróxido. Este supuesto hexágono son enlaces de CaOH sobrepuestos (figura 4), este aparente hexágono es porque se está viendo el plano cristalográfico 001.

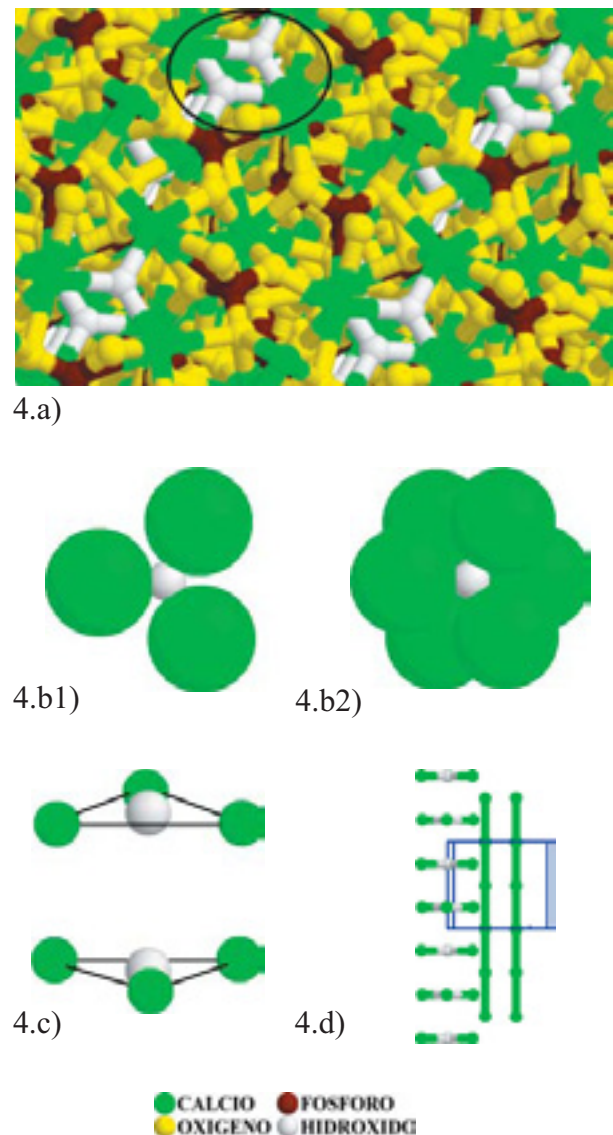


Fig. 4. La figura muestra: a) hidroxiapatita, b) los enlaces covalentes Ca-OH (ver tabla II), c) los dos triángulos formados por los enlaces Ca-OH en el eje z de la celda convencional, d) los enlaces de Ca-OH a lo largo del eje z contrastados con los enlaces Ca-Ca.

En la figura 4 se muestran los triángulos formados por los enlaces Ca-OH. Esto es reportado en la bibliografía.<sup>8</sup> Los átomos de calcio de los enlaces Ca-OH forman un triángulo equilátero, lo que da como resultado un ángulo de 120° en los enlaces. Estos triángulos equiláteros están centrados en el eje tornillo. En la figura 4a se aprecian las hélices. En la figura 3b se visualizan también los enlaces Ca-OH. En la figura 3c se visualizan a lo largo del eje z los enlaces Ca-OH, que forman un triángulo equilátero, dichos triángulos se extienden a lo largo de todo el eje z (figura 4d), estos enlaces son paralelos a los enlaces Ca-Ca, los enlaces Ca-OH le dan libertad de compresión a la hidroxiapatita y los enlaces Ca-Ca le dan dureza, lo que le permite a la hidroxiapatita ser un material idóneo para los implantes en huesos humanos.

En la figura 5a se aprecia el plano especular  $z = 1/4$ , el cual es perpendicular a los enlaces Ca-Ca que se distribuyen a lo largo del eje z y paralelo a los enlaces Ca-OH (figura 5b), en esta imagen se muestran los enlaces covalentes Ca-OH, que están en el plano de simetría, así como los Ca-Ca.

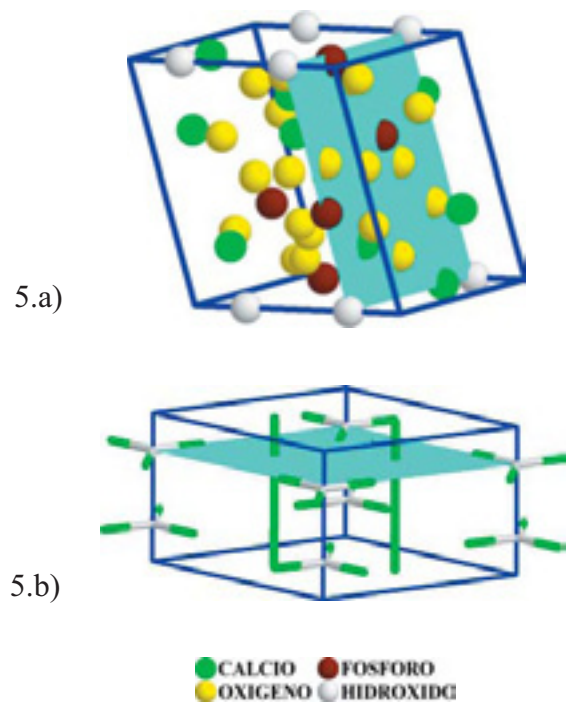


Fig. 5. La figura muestra: a) el plano de simetría de la hidroxiapatita en  $z=1/4$ , b) la intersección del plano de simetría con los enlaces covalentes Ca-OH y los Ca-Ca de la hidroxiapatita.

Se reporta un ángulo de 109.4° en la bibliografía,<sup>8</sup> con un error de 2.3° a 3.4°; el ángulo encontrado es de 108.025° lo cual da una diferencia de 1.375° (figura 6a), en la figura 6b además se muestra al fosfato con sus radios covalentes, presentando un ángulo de 108.025°.

### CONCLUSIONES

En la visualización cristalográfica de la hidroxiapatita se aprecia la distribución característica del grupo de las apatitas, esto es el acomodamiento hexagonal, el cual es una de las redes de Bravais.<sup>9</sup>

Los enlaces calcio-calcio, están en dirección paralela al eje Z y al enlace hidróxido-calcio; esta configuración le confiere al material una dureza muy alta, por los enlaces calcio-calcio, y amortiguamiento por los enlaces hidróxido-calcio. Estas características contribuyen a que la hidroxiapatita sea un material idóneo para implantes ortopédicos en huesos humanos.

En la bibliografía se reporta un plano especular en  $z = 1/4$  y  $z = 3/4$ ,<sup>8</sup> se muestra el de  $z = 1/4$  en la figura 5.

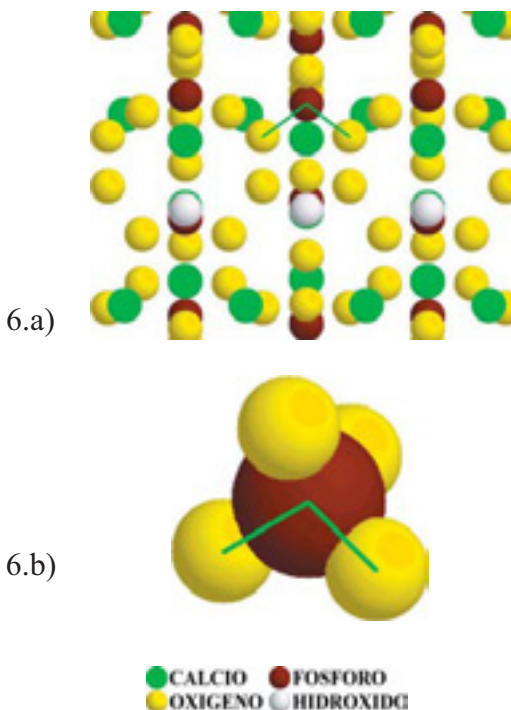


Fig. 6. La figura muestra: a) el ángulo que se forma entre el fosforo y el oxígeno en el fósforo b) la ampliación de a) usando los radios covalentes (ver tabla II).

## REFERENCIAS

1. Programa iberoamericano de ciencia y tecnología para el desarrollo (CYTED) (2000).
2. K. de Groot. Calcium phosphate coatings: Alternative to plasma spray. Bioceramics Volume 11. 11th International symposium on Ceramics in Medicine. New York, NY, USA. World Scientific Publishing Co. November 1998.
3. K. A. Hing, I. R. Gibson, L. Di-Silvio, S.M. Best, W. Bonfiel. Effect of variation in Ca:P ratio on cellular response of primary human osteoblast-like cells to hydroxyapatite- based ceramics. Bioceramics Volume 11. 11th International Symposium on Ceramics in Medicine. New York, NY, USA. World Scientific Publishing Co. November 1998.
4. Gengwei Jiang, Donglu Shi. Coating of Hydroxyapatite on Highly Porous  $Al_2O_3$  Substrate for Bone Substitutes. CCC 0021-9304/98/010077-05.
5. Juan Carlos Quintana Díaz. Experiencias clínicas con la coralina cubana en cirugía maxilofacial. Rev. Cubana Estomatol 1997; 34(2):76-79.
6. Neder, R.B. & Proffen, TH. J. Appl. Cryst. (1996), 29 727-735. Würzburg Univesität. Kristallographie Dienststelle.
7. Hughes, J.M., M. Cameron, and K.D. Crowley. Ordering of divalent cations in the apatite structure: Crystal structure refinements of natural Mn- and Sr-bearing apatite. American Mineralogist, 1991; 76:1857-1862.
8. L. Calderín, M.J. Stott. A. Rubio. Electronic and crystallographic structure of apatites. Physical Review, 2003; B 67, 134106.
9. C. Kittel, Física del Estado Sólido, 3ª edición, Ed. Reverté, 1998.

**Ingenierías**  
en línea

A TEXTO COMPLETO  
DESDE EL NÚMERO 1

CONSULTA EN:  
<http://ingenierias.unal.mx>