

Estudo da Substituição Parcial do Cálcio por Magnésio e Cobalto na Estequiometria da Hidroxiapatita.

*Fábio Marques de Oliveira (IC)¹, Mariana Moreno Azevedo (IC)¹, Andrea Machado Costa (PG)¹, Elena Mavropoulos Oliveira Tude (PQ)¹, Alexandre Malta Rossi (PQ)¹ (fabiomarques.quimica@gmail.com).

1 - Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas – CBPF.

Palavras Chave: cobalto, magnésio, hidroxiapatita, espectroscopia de absorção atômica.

Introdução

A hidroxiapatita, $\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$, é a maior constituinte mineral dos tecidos calcificados, porém sua composição no osso não é bem definida, podendo apresentar também íons Na^+ , Mg^{2+} , CO_3^{2-} , citratos e em menor quantidade K^+ , Cl^- , F^- .

A estrutura da HA permite substituições isomorfas catiônicas e aniônicas com grande facilidade. O Ca^{2+} é substituído por metais tais como Pb^{2+} , Cd^{2+} , Cu^{2+} , Zn^{2+} , Co^{2+} , Fe^{2+} , Mg^{2+} ; os grupos fosfatos por grupos carbonatos e vanadatos, as hidroxilas por carbonatos, flúor e cloro. As substituições iônicas alteram as dimensões da rede e dos cristais, a textura superficial, a estabilidade térmica, a solubilidade, a reatividade química e o comportamento do material no meio biológico.

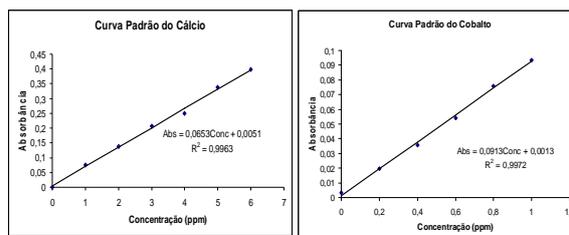
A produção de hidroxiapatitas dopadas com metais poderia ser utilizada aliando diferentes objetivos: i) liberação controlado de elemento traço de interesse terapêutico; ii) estimulação do processo de formação óssea e iii) controle do processo inflamatório.

Resultados e Discussão

As amostras foram sintetizadas de forma que se obtivesse ao término uma amostra com 1% do Cálcio substituído. Após a abertura, as amostras foram analisadas no espectrofotômetro de absorção atômica Shimadzu, modelo 6800, utilizando o gás acetileno como combustível e o ar como oxidante. O resultado dessa análise pode ser visto na tabela 1, bem como as respectivas curvas de calibração. Onde (T) refere-se a valores teóricos e (E) à valores experimentais.

Tabela 1: valores teóricos e experimentais das concentrações de Ca, Co e MG nas amostras de HA, CoHA e MgHA.

Amostra	%Ca (T)	%Ca (E)	Erro Ca (%)	% Metal (T)	% Metal (E)	Erro Metal (%)
HA	40	38,786	0,2785	-	-	-
CoHA	39	38,740	1,8950	1	0,9160	1,5828
MgHA	39	37,095	0,2266	1	0,3262	2,0641



Figuras 1 e 2: Curvas Padrões para Cálcio e Cobalto.

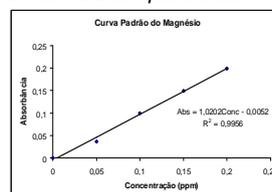


Figura 3: Curva padrão para o Magnésio.

A modelagem computacional² para substituição do Cálcio por Magnésio no sítio do Ca(1) mostra uma distorção da rede cristalina pela substituição do cálcio por magnésio.

Conclusões

A partir da técnica analítica de Absorção Atômica empregada foi possível quantificar com precisão de ppm o teor do metal substituído na estrutura da hidroxiapatita, bem como seu teor de cálcio. Os resultados obtidos experimentalmente para o cobalto muito se assemelham com o valor teórico. O mesmo não é observado para o magnésio e pode-se concluir que esse fato deve-se a distorção que o mesmo provoca na rede cristalina alterando a energia de ligação do metal com o complexo após a substituição.

Agradecimentos

Ao CNPq pela ajuda financeira; Ao Laboratório de Materiais Biocerâmicos do CBPF.

- MANSUR, H. S. ORÉFICE, R. L.; PEREIRA, M. M. **Biomateriais: fundamentos e aplicações**. 1ª edição. Rio de Janeiro: Cultura Médica, 2006. 538 p. ISBN 85-7006-374-1.
- GUTOWSKA, Isabela et al. **The role of bivalent metals in hydroxyapatite structures as revealed by molecular modeling with the HyperChem software**. Polônia: 2005. Disponível em: www.interscience.wiley.com