

Simulación Teórica y Evaluación Experimental de Hidroxiapatita Sintetizada por Método Sol-Gel y Mecano-Síntesis

José Castañeda Vía* ^{a,b}, Carlos Landauro Sáenz ^{c,d}, Justiniano Quispe Marcatoma ^{c,d}, Corina Vera ^e, Lidia Yileng Tay ^b

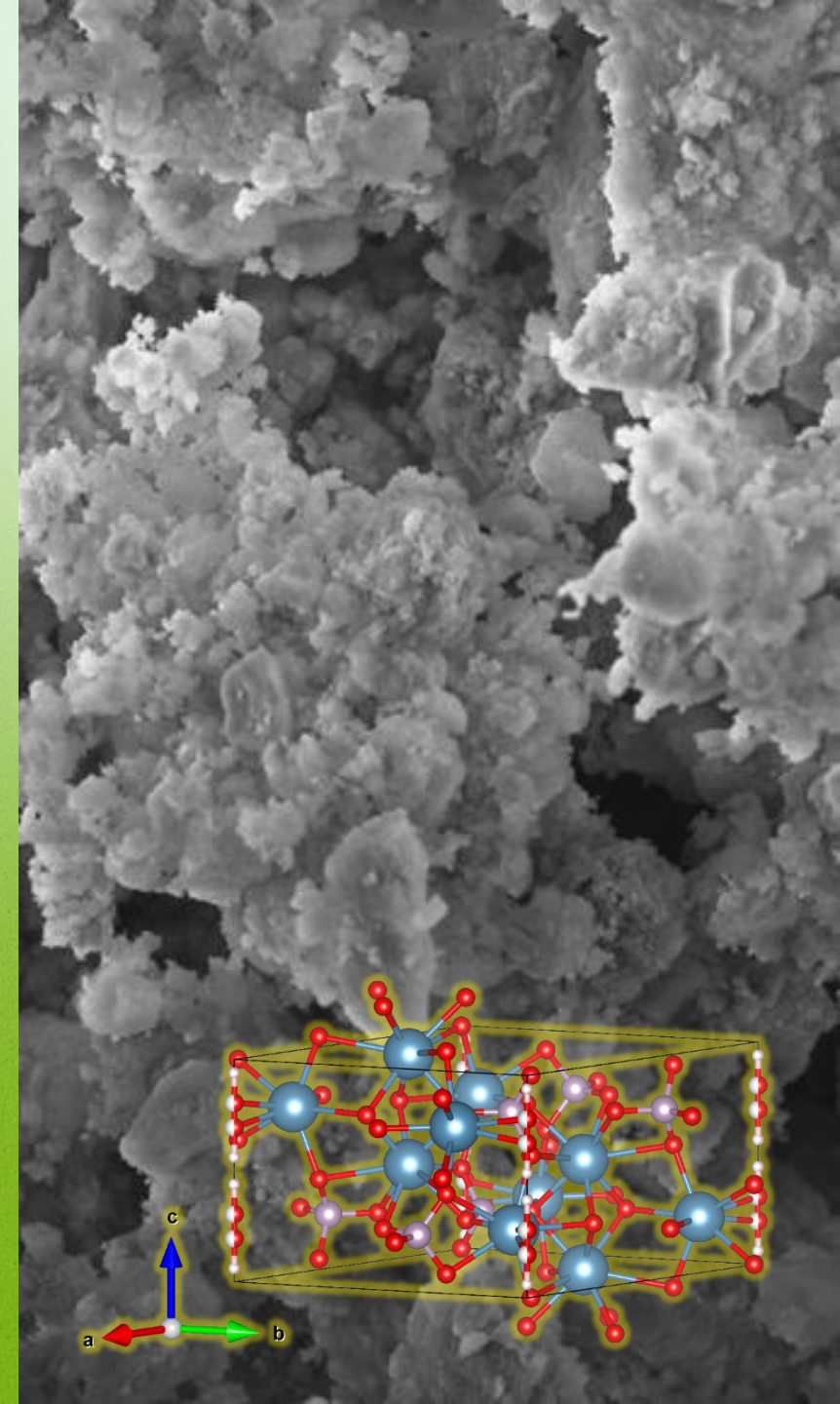
^a Escuela de Posgrado, Universidad Peruana Cayetano Heredia, Lima, Perú.

^b Laboratorio de Materiales Dentales, Universidad Peruana Cayetano Heredia, Lima, Perú.

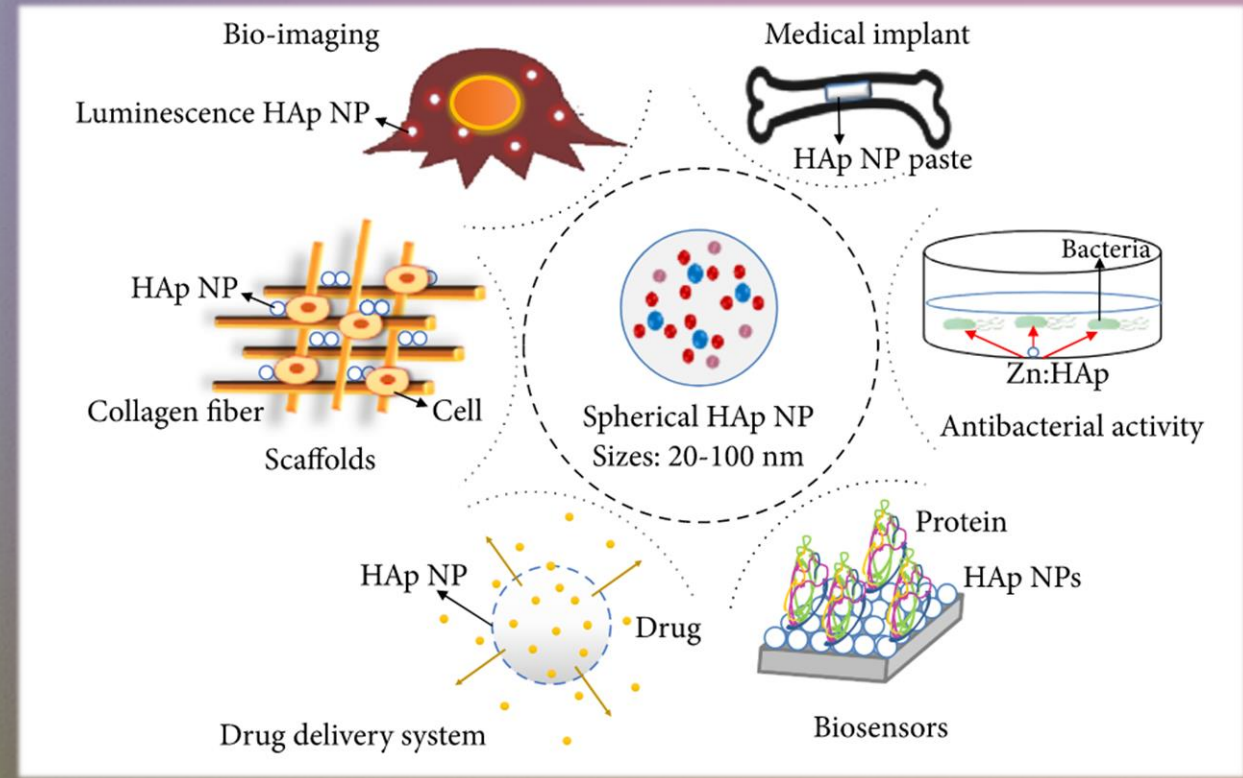
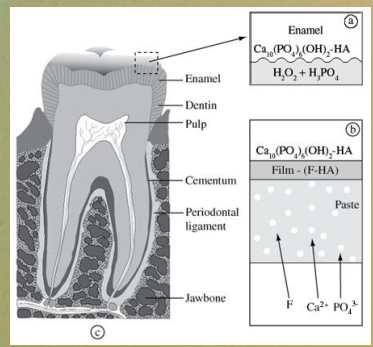
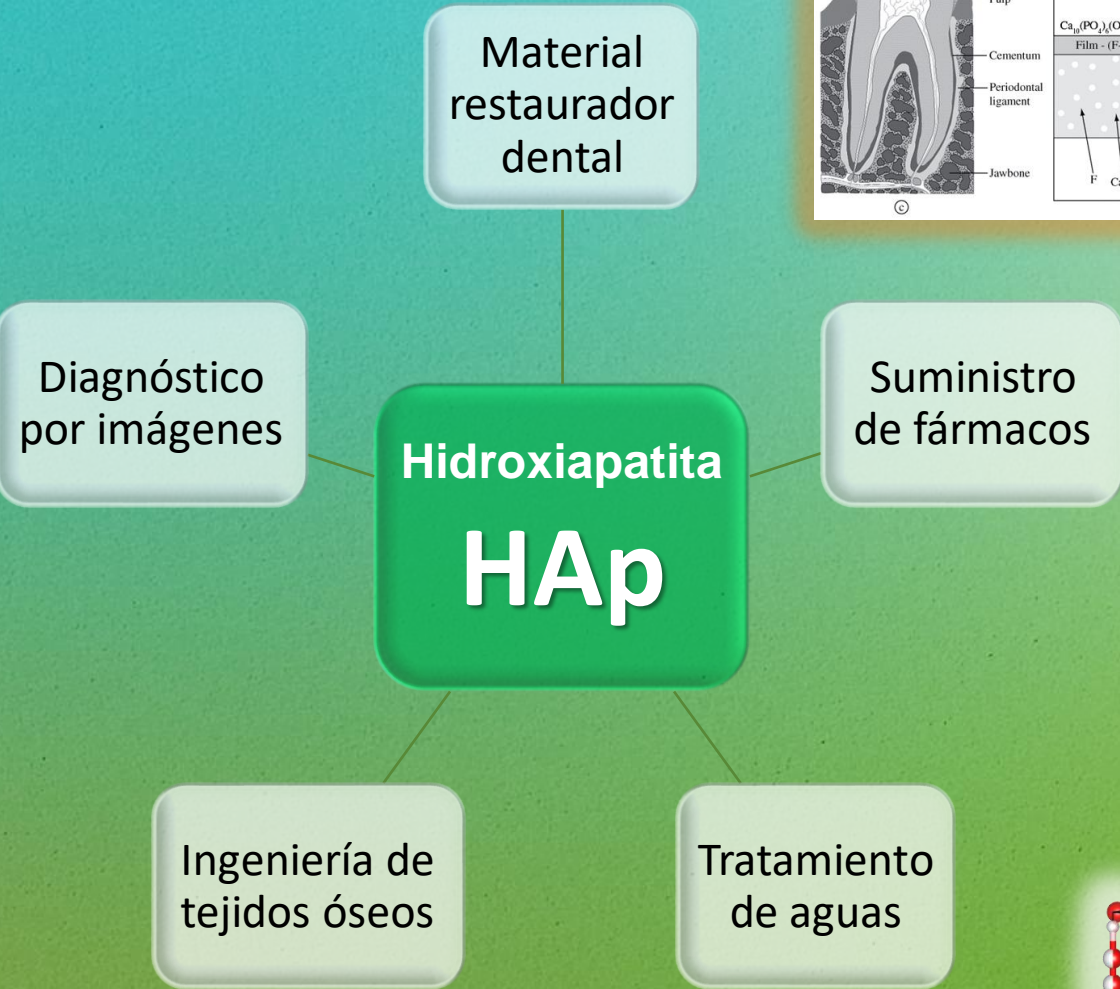
^c Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Mayor de San Marcos, Lima, Perú.

^d Centro de Investigaciones Tecnológicas, Biomédicas y Medioambientales, Callao, Perú.

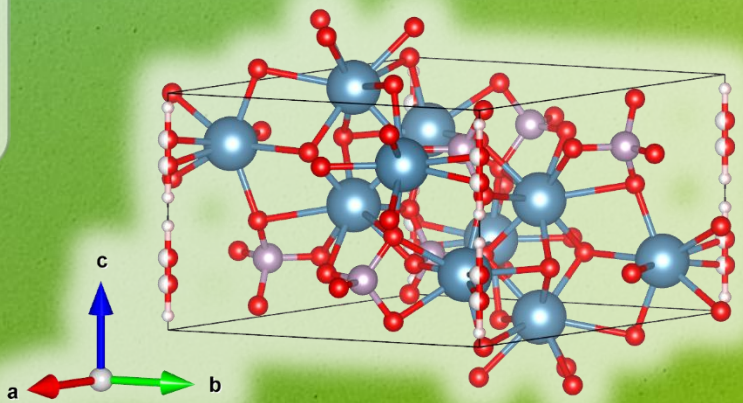
^e Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de San Agustín, Arequipa, Perú.



Introducción



T. Peñaflor et al. (2019).
<https://doi.org/10.1155/2019/6495239>

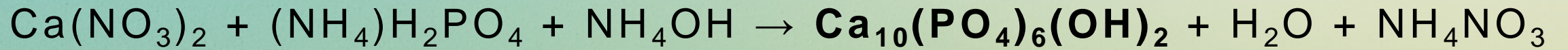


Rutas de síntesis

- ✓ Sencilla
- ✓ Bajo costo
- ✓ Mejoras al material

Metodología

Síntesis de hidroxiapatita por método Sol-gel



↑
Precursor de Ca^{+2}
Nitrato de calcio
(Sigma-Aldrich)

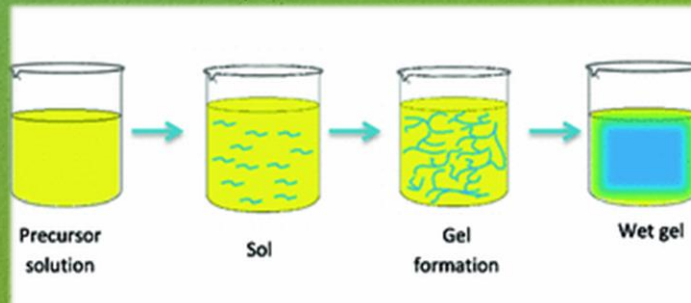
↑
Precursor de PO_4^{-3}
Fosfato de amonio
(Sigma-Aldrich)

↑
Regulador de pH
Hidróxido de amonio
(Sigma-Aldrich)

↑
HAp-SG



+
Tratamiento térmico
5 horas / 600 °C



Condiciones experimentales:

- Tiempo de envejecimiento: 48 horas
- Masa de muestra: 5 gramos

Metodología

Síntesis de hidroxiapatita por mecano-síntesis



Precursor de Ca⁺²

Carbonato de calcio
(**Cáscara de huevo**)

Precursor de PO₄⁻³

Fosfato de amonio
(Sigma-Aldrich)

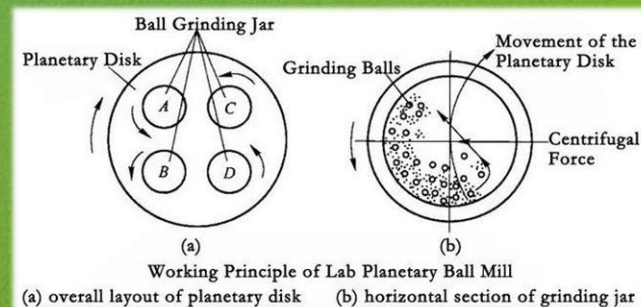
HAp-MQ

+



Tratamiento térmico

3 horas / 400 °C



Condiciones experimentales:

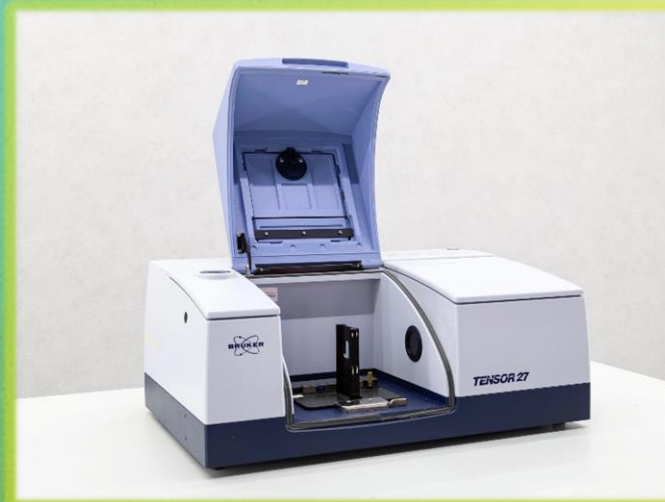
- Tiempo de molienda: 16 horas
- Masa de muestra: 10.5 gramos

Metodología

Evaluación de propiedades físico-químicas



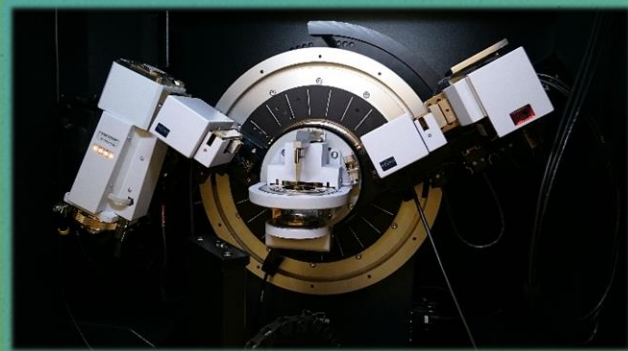
Single particle optical sizing (SPOS)



Fourier transform infrared spectroscopy (FTIR)



Confocal Raman
microscopy (CRM)



X-ray diffraction (XRD)



Scanning electron
microscopy (SEM)

Metodología

Cálculos numéricos

Problema cuántico para un sistema de mucho cuerpos (electrones y núcleos)



$$H|\Psi(R, r)\rangle = \xi_N|\Psi(R, r)\rangle$$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_i \frac{\nabla^2 \mathbf{R}_i}{M_i} - \frac{\hbar^2}{2} \sum_i \frac{\nabla^2 \mathbf{r}_i}{m_e} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i,j} \frac{e^2 Z_i}{|\mathbf{R}_i - \mathbf{r}_j|} + \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} - \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_{i \neq j} \frac{e^2 Z_i Z_j}{|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|}$$

- Energía cinética (núcleos, electrones)
- Energía potencial núcleo-electrón
- Energía potencial electrón-electrón
- Energía potencial núcleo-núcleo

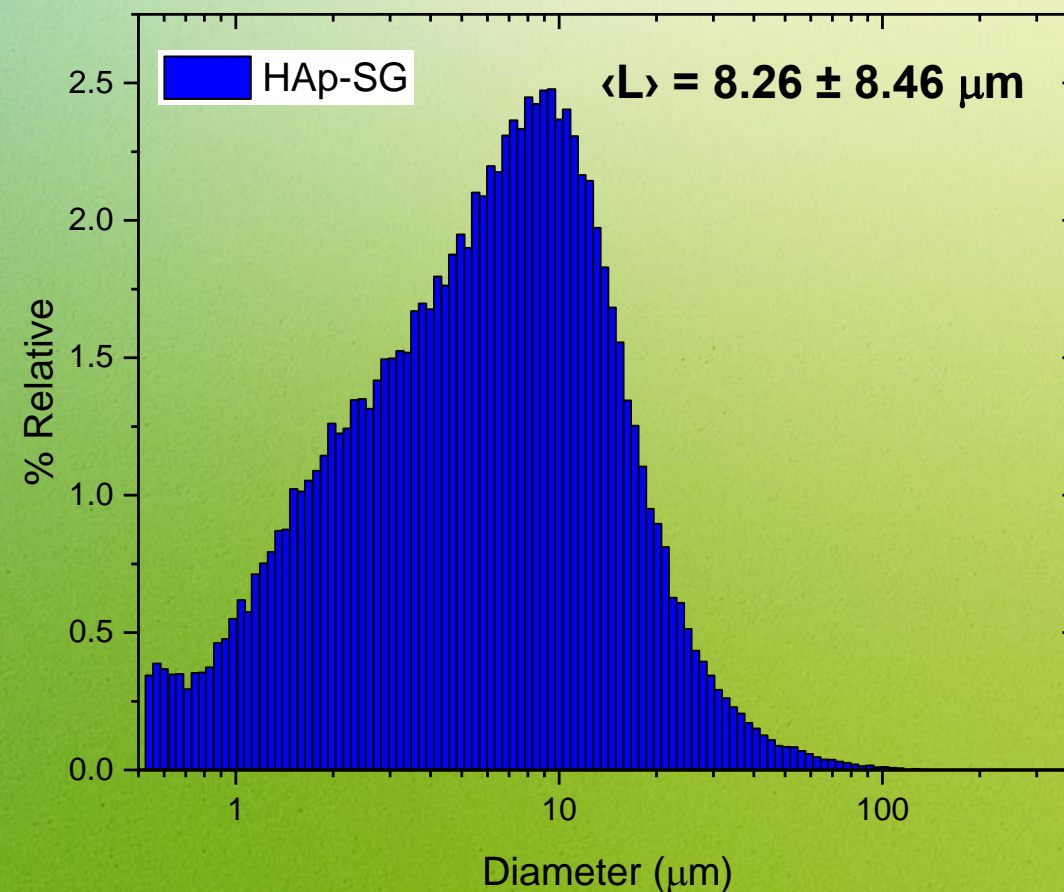
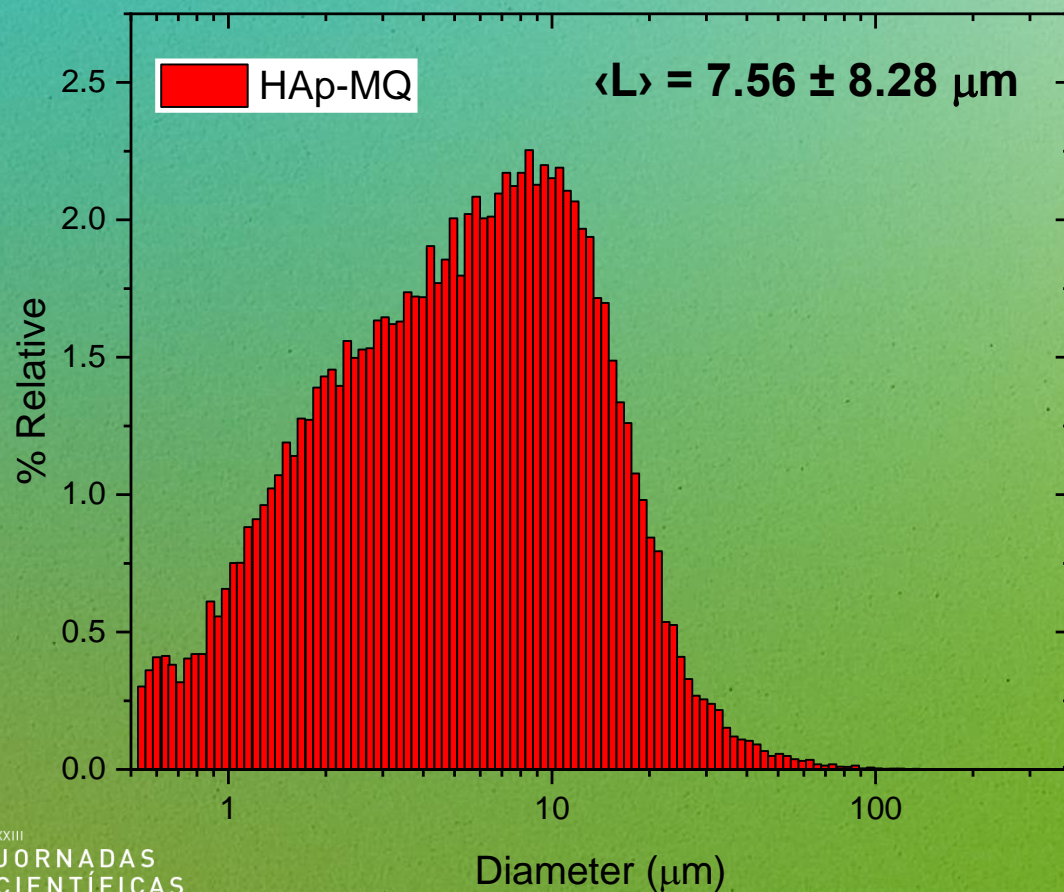


Cálculos ab-initio usando
DFT (Density Functional
Theory)

Resultados

Distribución de tamaños de partícula (SPOS)

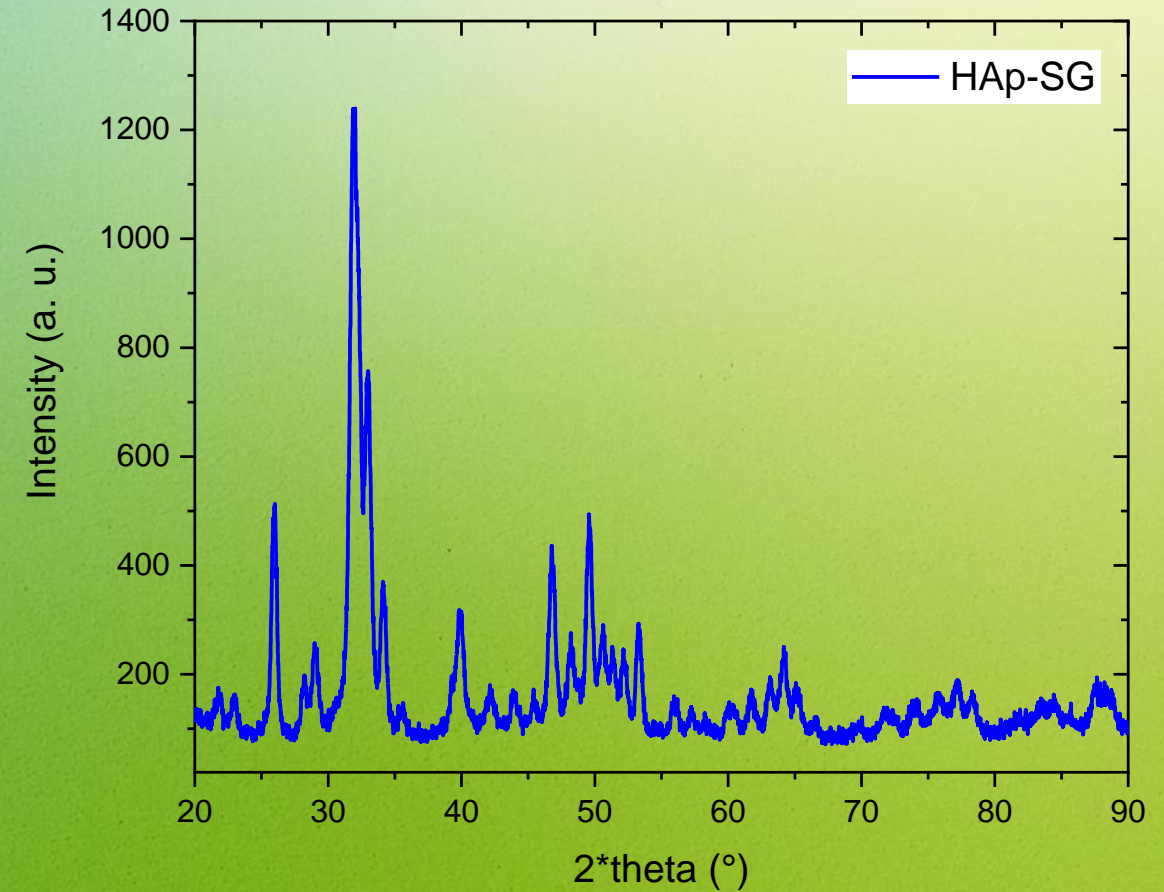
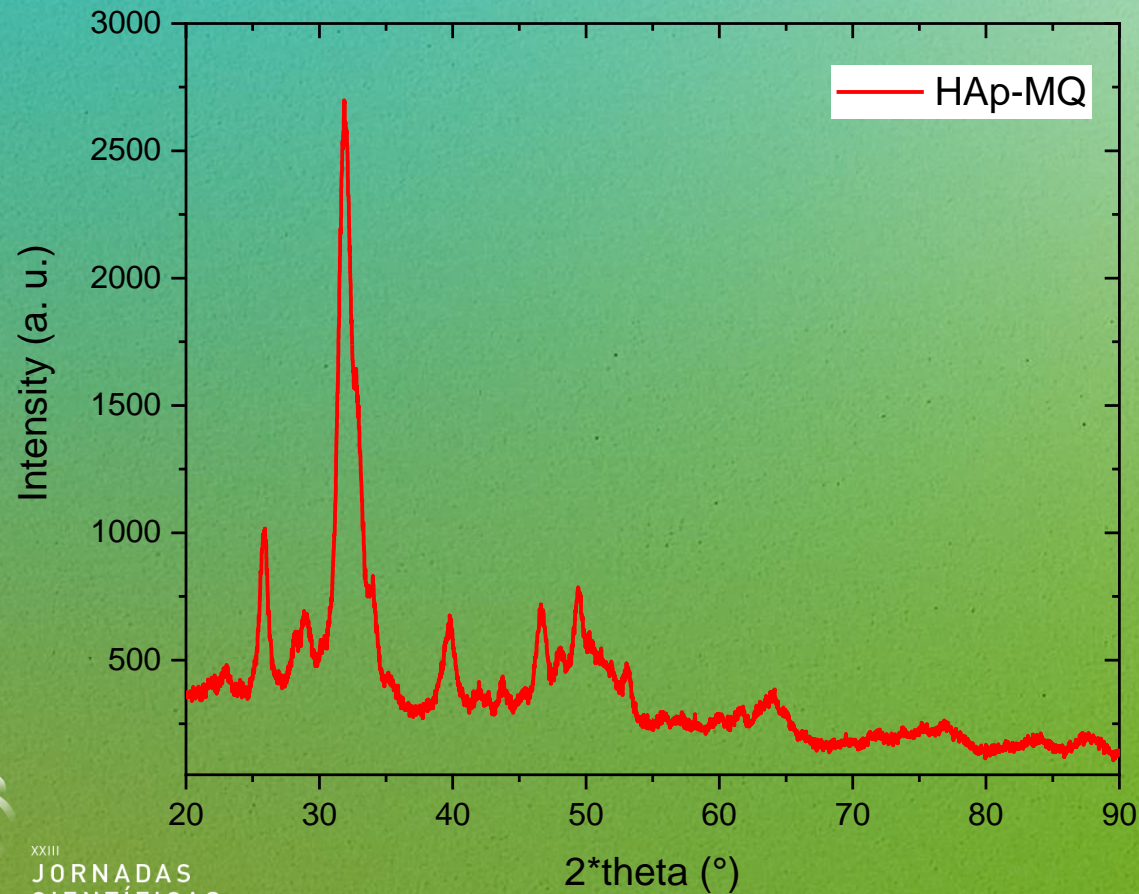
	$\langle L \rangle$	M
HAp-MQ	$7.56 \pm 8.28 \mu\text{m}$	$9.55 \pm 0.22 \mu\text{m}$
HAp-SG	$8.26 \pm 8.46 \mu\text{m}$	$9.63 \pm 0.17 \mu\text{m}$



Resultados

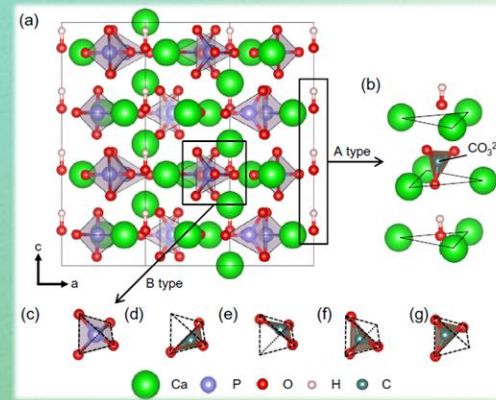
Difracción de rayos X (XRD)

	$a = b$	c	$\langle D \rangle$	X_c
HAp-MQ	9.448 Å	6.908 Å	10.9 nm	5.46 %
HAp-SG	9.430 Å	6.888 Å	21.3 nm	37.77 %

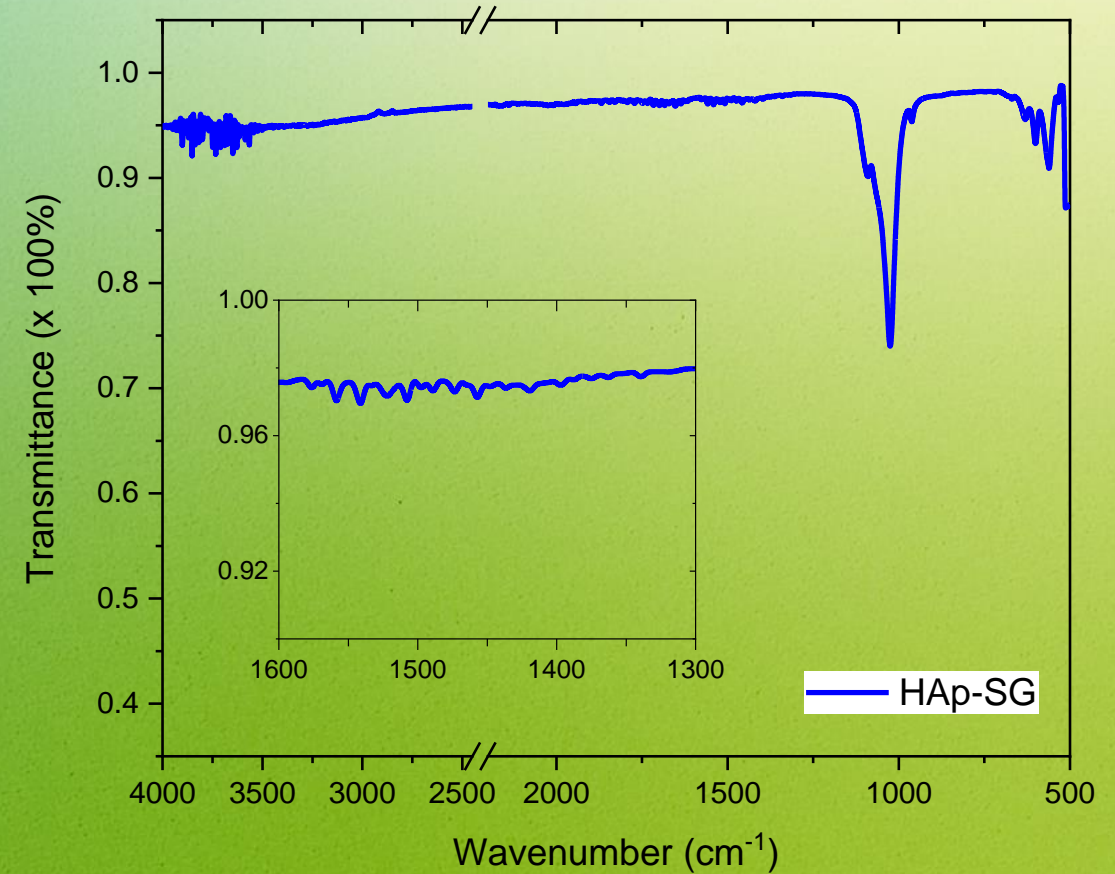
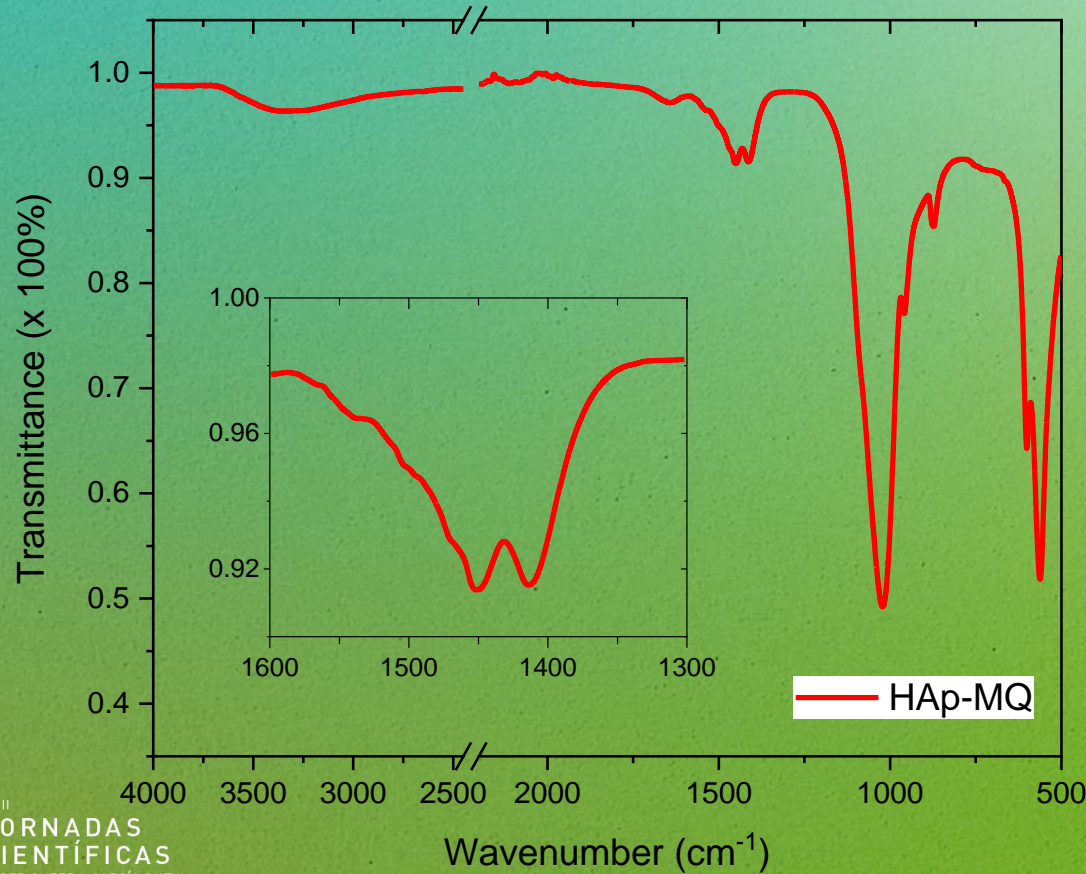


Resultados

Espectroscopía infrarroja (FTIR)

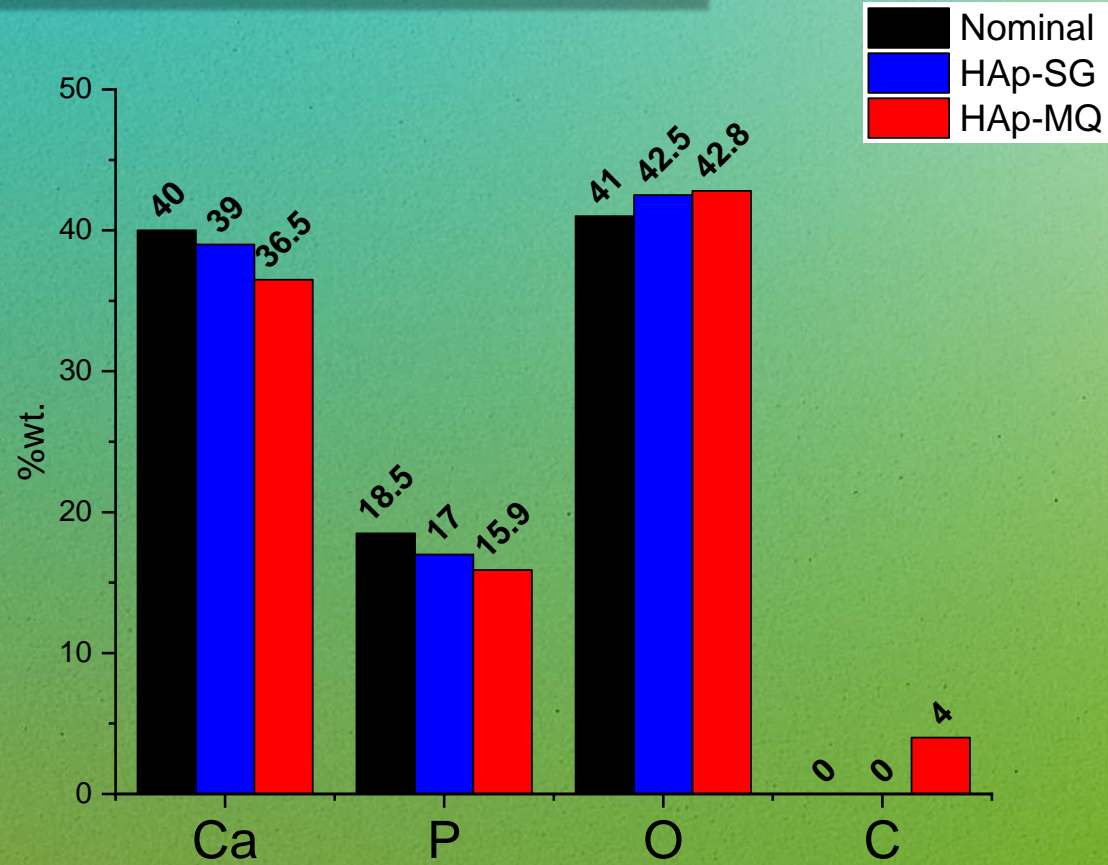


	% A-type	% B-type
HAp-MQ	42.6	57.4
HAp-SG	0	0

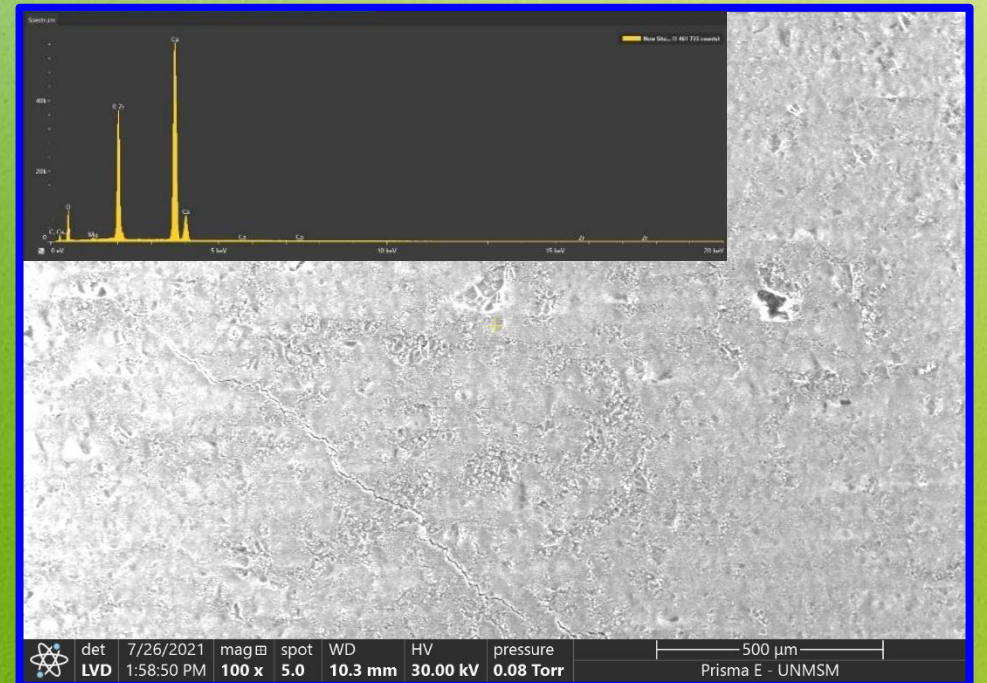
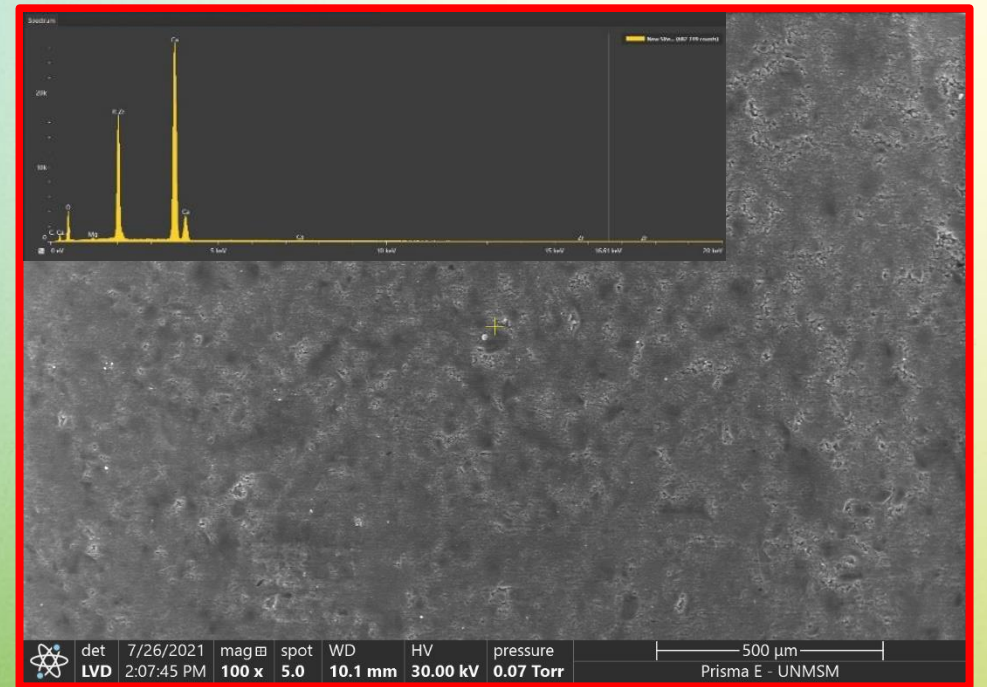


Resultados

Microscopía electrónica de barrido (SEM)

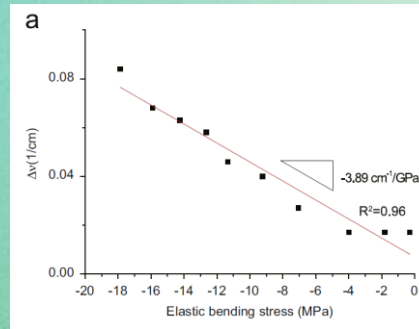


	%wt. C	%wt. CO ₃ ⁻²
HAp-MQ	4.0	20.0
HAp-SG	0	0



Resultados

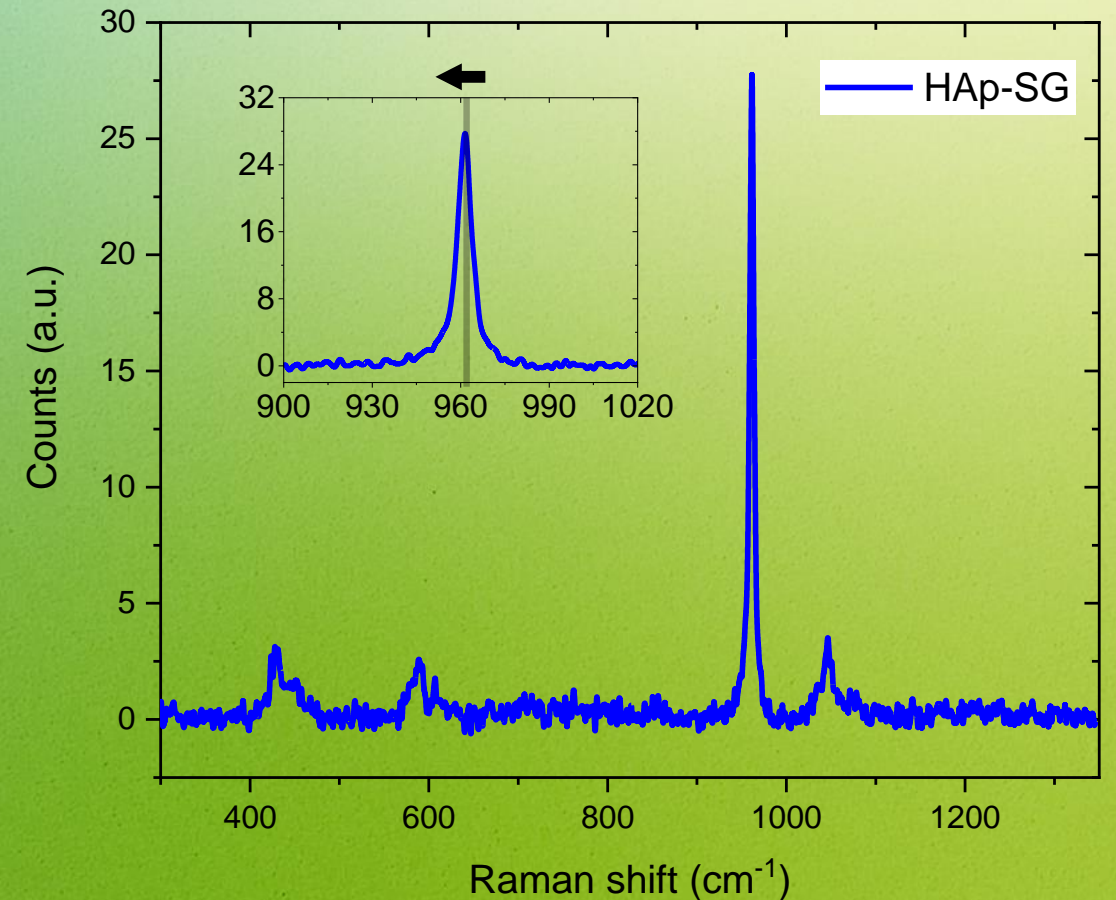
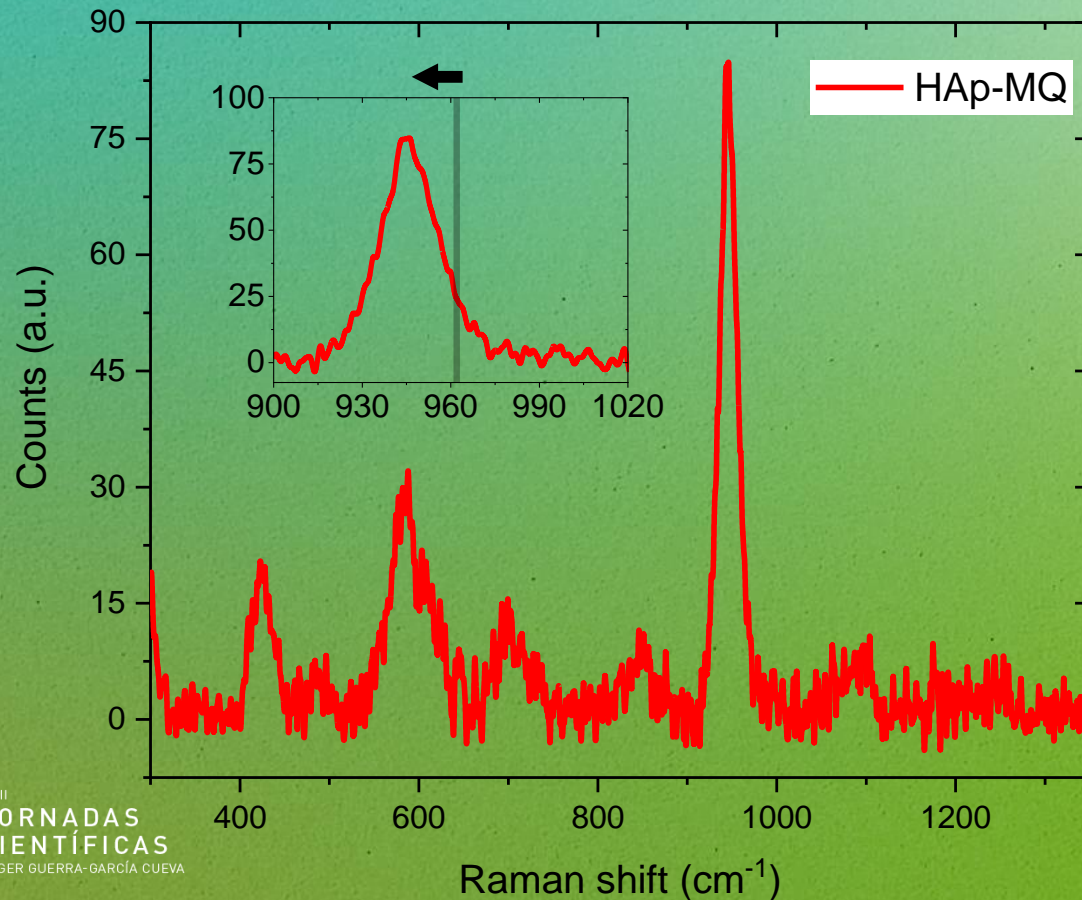
Microscopía Raman confocal (CRM)



A.R. Nimkerdphol et al. (2014).

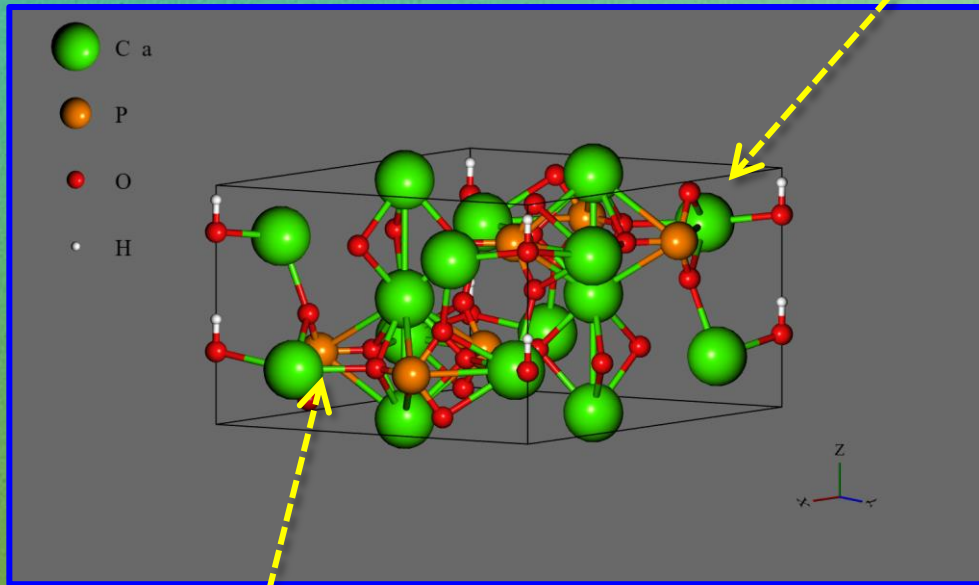
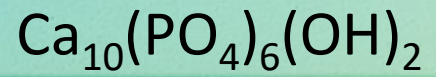
<http://dx.doi.org/10.1016/j.jmbbm.2014.04.007>

	ν_1 peak center	Violet-shift	Compressive residual stress
HAp-MQ	945.96 cm^{-1}	-16.04 cm^{-1}	62.40 GPa
HAp-SG	961.33 cm^{-1}	-0.67 cm^{-1}	2.61 GPa

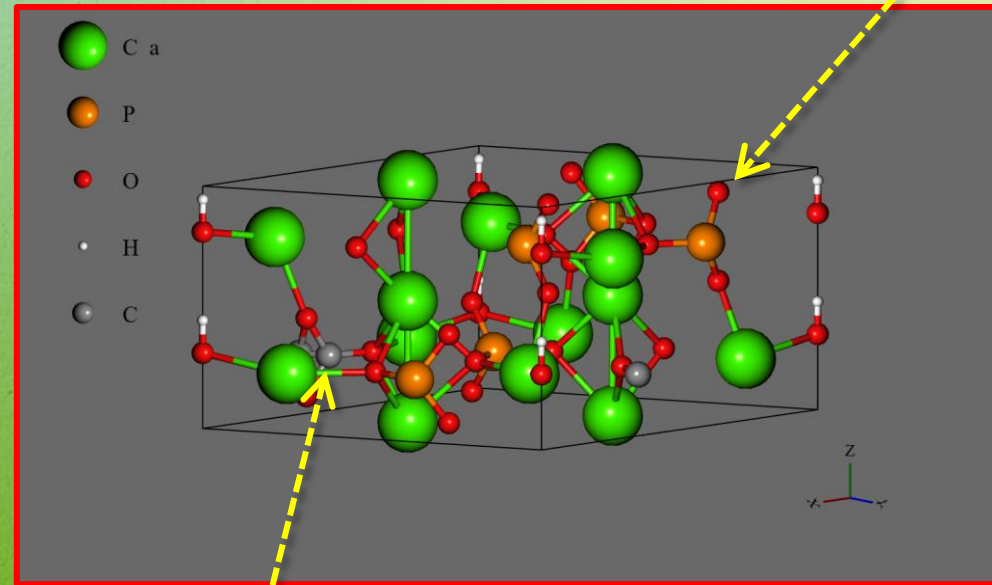
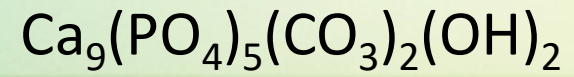


Resultados

Cálculos numéricos



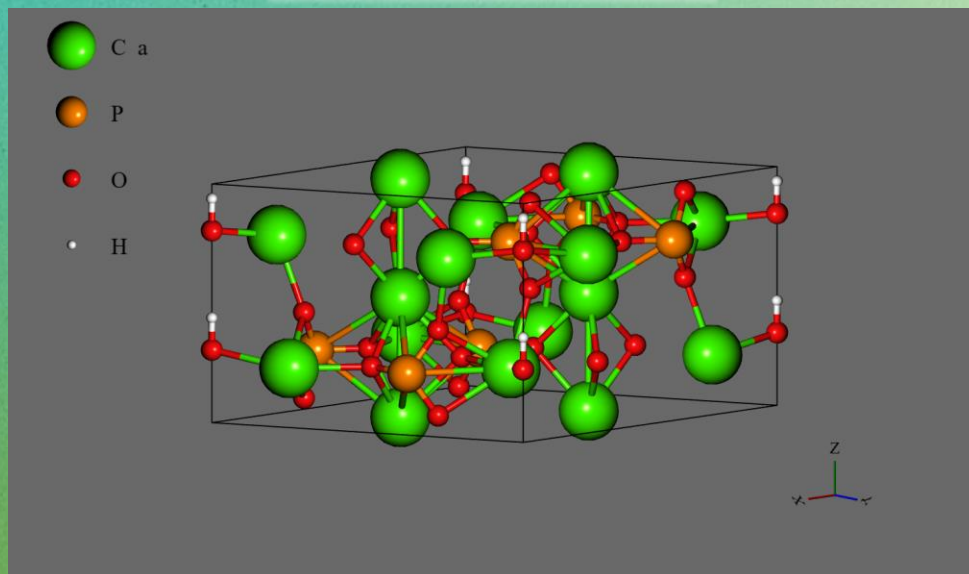
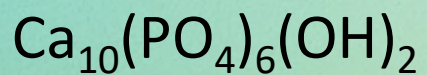
HAp-SG



HAp-MQ

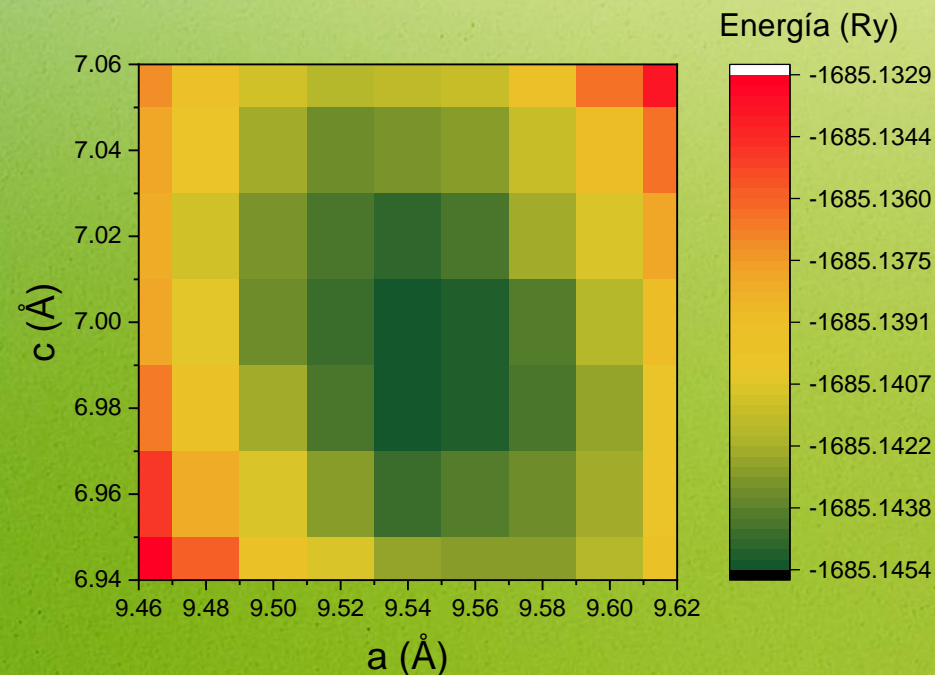
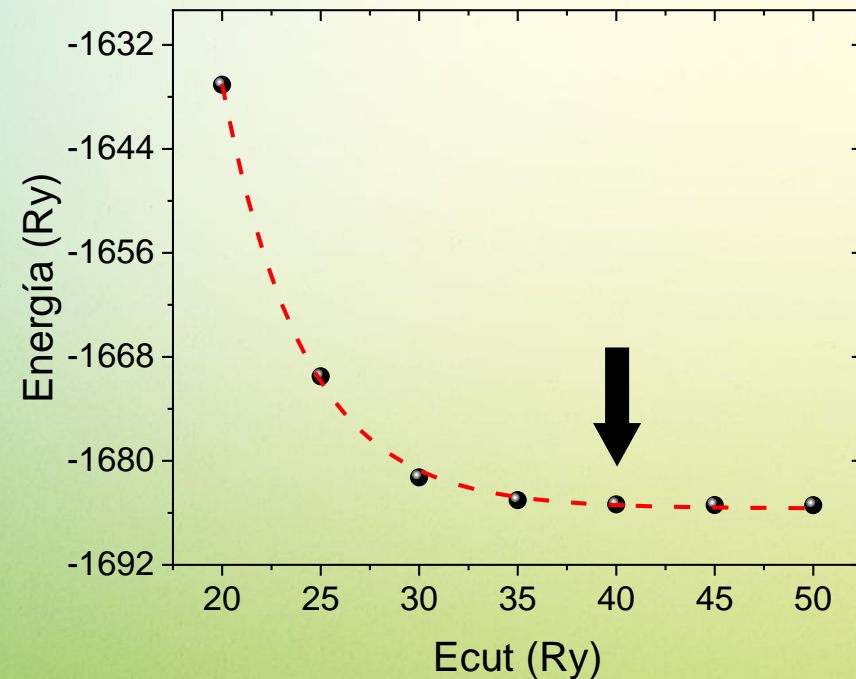
Resultados

Cálculos numéricos



HAp-SG

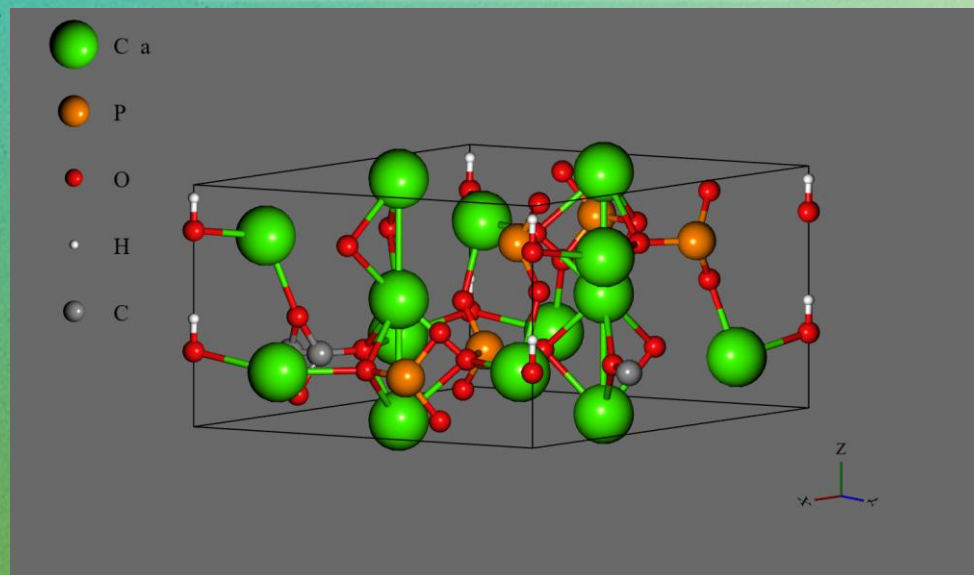
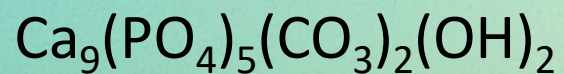
$a = b$ (Å)	9.547
c (Å)	6.994
V (Å ³)	552.05
c/a	0.733
F_t	0.014



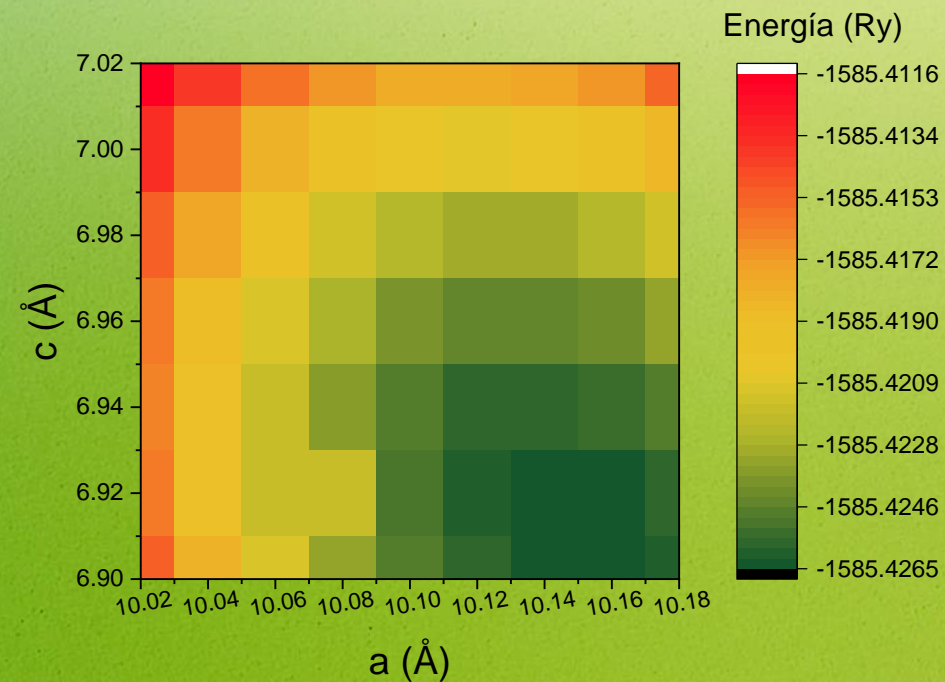
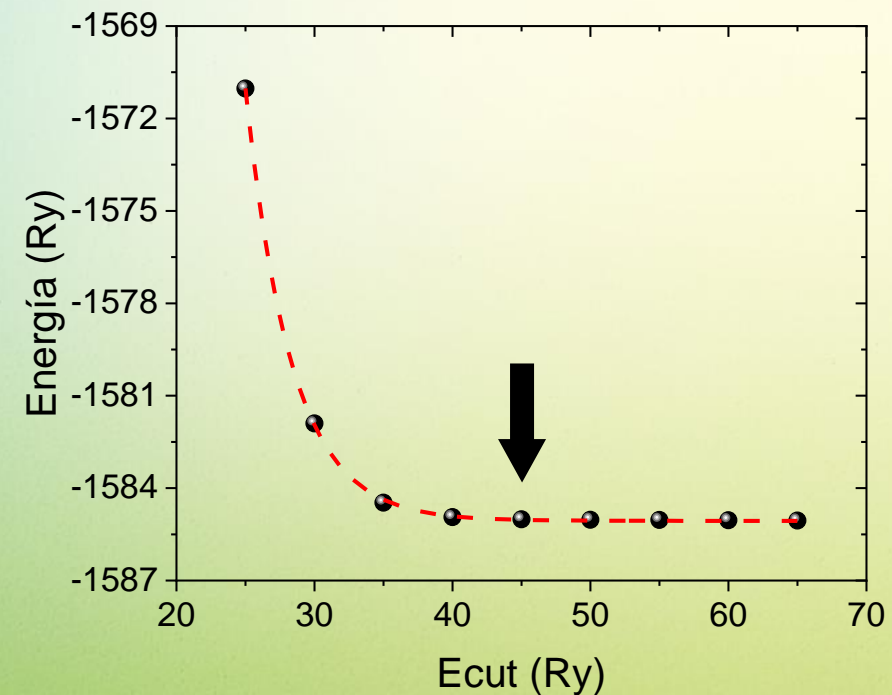
Resultados

Cálculos numéricos

HAp-MQ



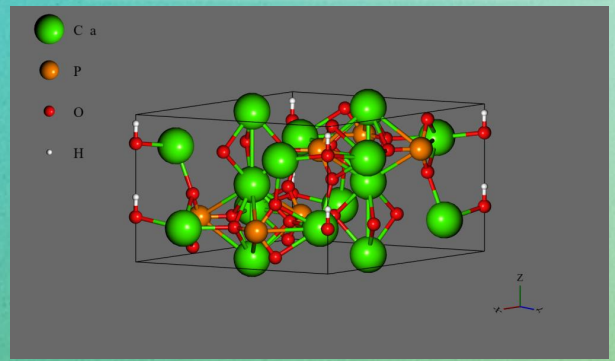
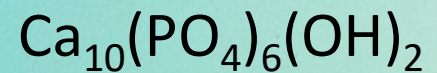
$a = b$ (Å)	10.149
c (Å)	6.907
V (Å ³)	616.12
c/a	0.681
F_t	5.627



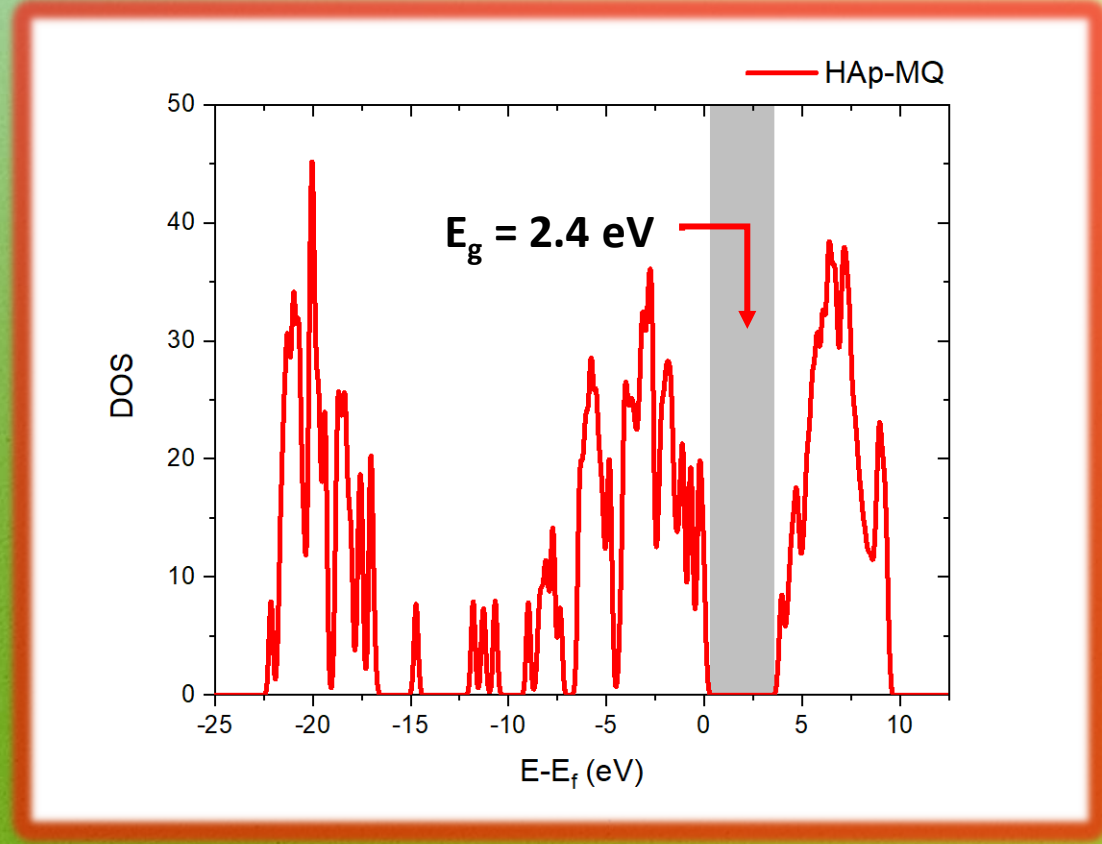
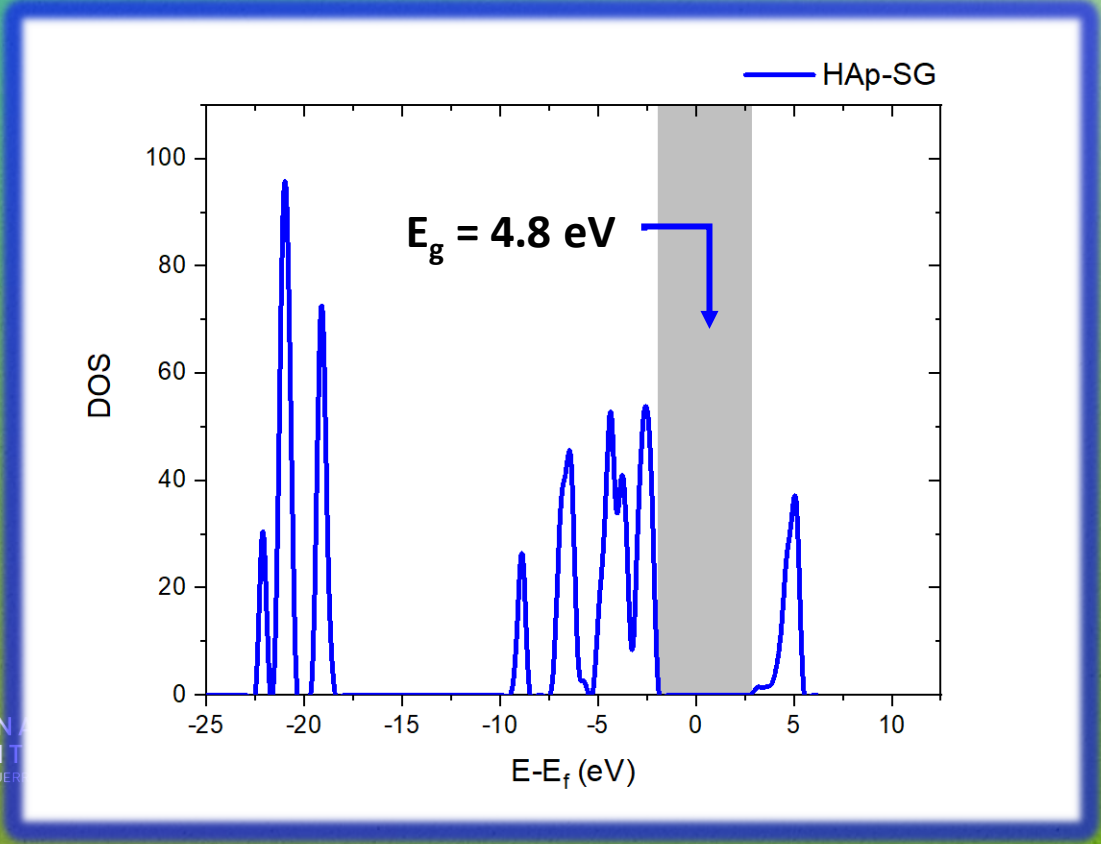
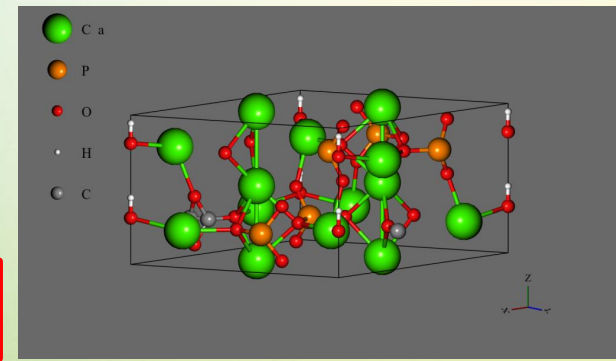
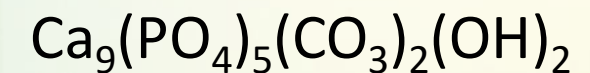
Resultados

Cálculos numéricos

HAp-SG



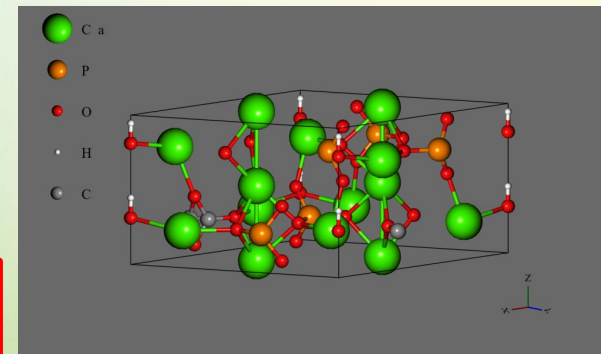
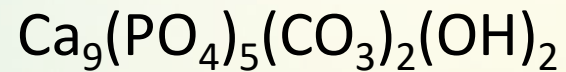
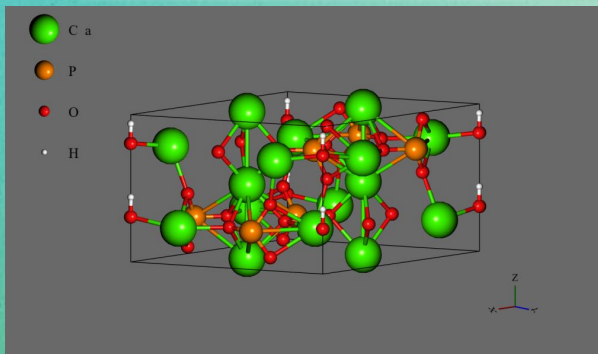
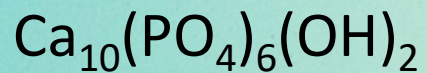
HAp-MQ



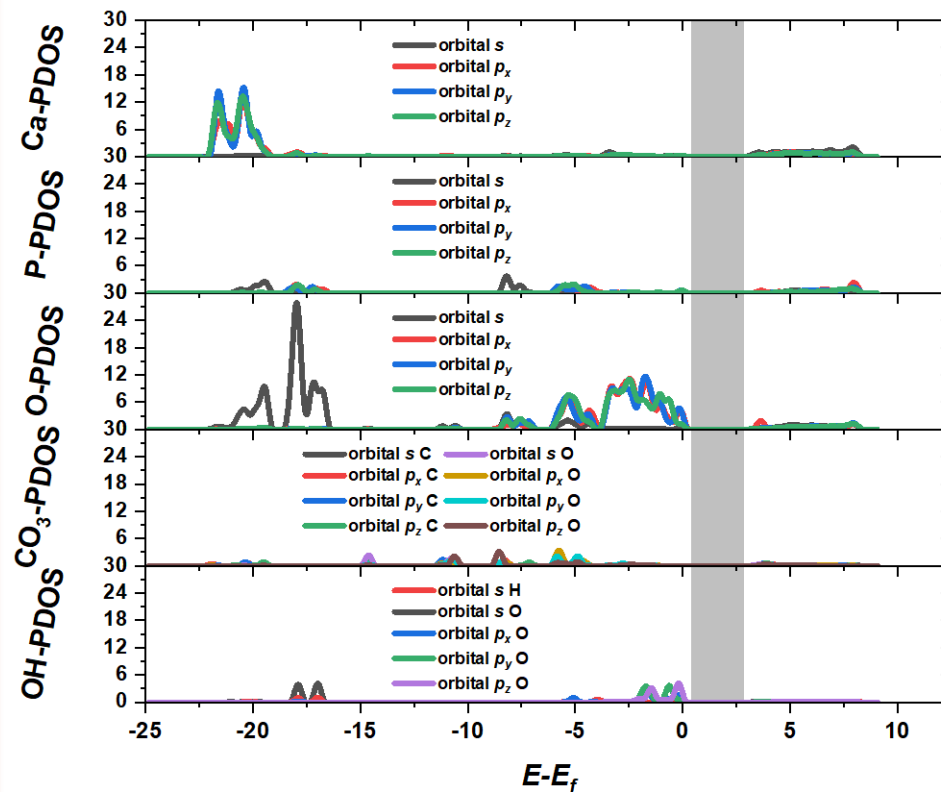
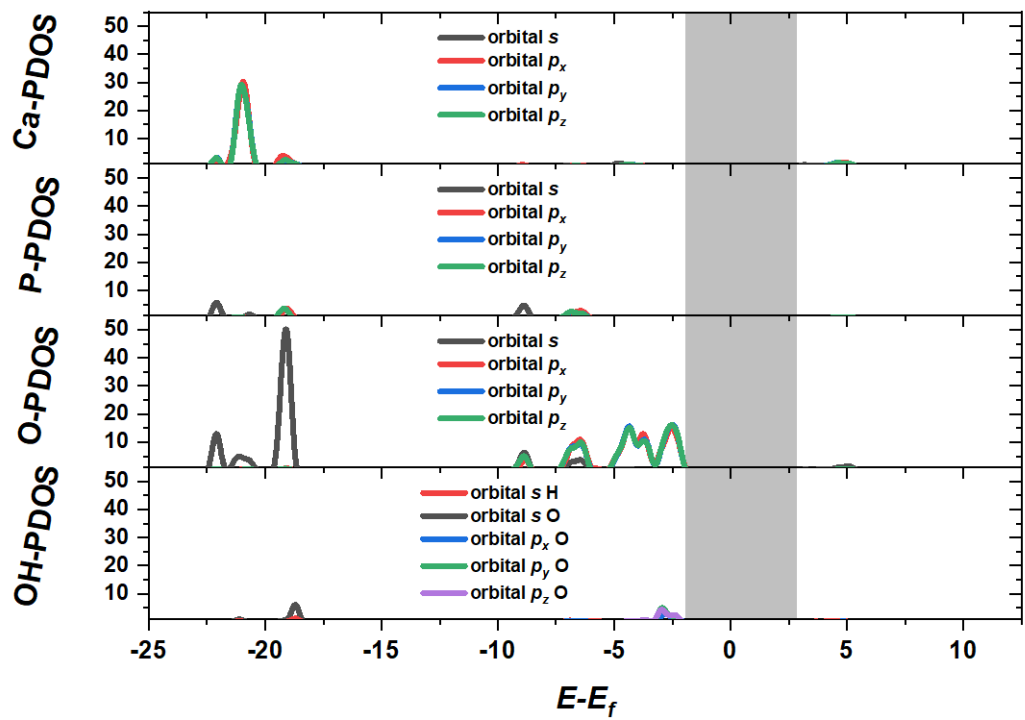
Resultados

Cálculos numéricos

HAp-SG



HAp-MQ



Conclusiones

1. Las dos vías de síntesis permitieron obtener hidroxiapatita de buena calidad estructural con potencial uso biomédico.
2. La hidroxiapatita obtenida por mecano-síntesis es más nanométrica que la obtenida por método sol-gel, además que cuenta con iones carbonato.
3. El uso de la cáscara de huevo representa una alternativa de bajo costo como insumo para la síntesis de hidroxiapatita, además de brindar propiedades mejoradas al material.
4. Los cálculos computacionales mostraron la influencia de los iones carbonatos en la naturaleza de la hidroxiapatita, como el aumento de las tensiones internas y la disminución en el gap de energía.





UNIVERSIDAD PERUANA
CAYETANO HEREDIA



UNIVERSIDAD NACIONAL MAYOR DE
SAN MARCOS
Universidad del Perú, DECANA DE AMÉRICA



Centro de Investigaciones
Tecnológicas, Biomédicas
y Medioambientales



UNSA
UNIVERSIDAD NACIONAL DE SAN AGUSTÍN DE AREQUIPA



PUCP

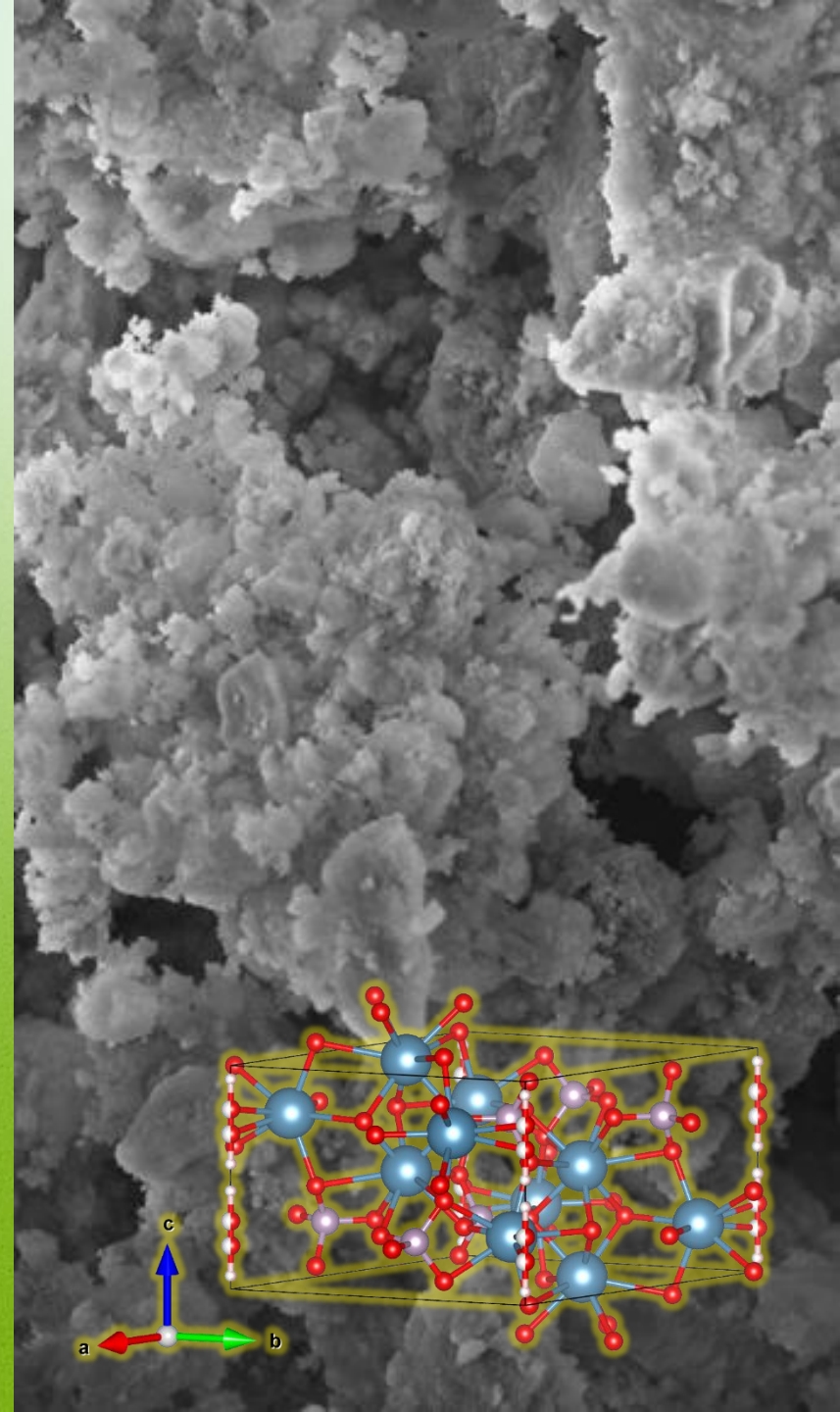
GRACIAS

“Mejoramiento y Ampliación de los Servicios del Sistema Nacional de Ciencia Tecnología e Innovación Tecnológica” 8682-PE, a través de la unidad ejecutora Fondecyt (contrato número 08-2018).

Proyecto
Concytec
Banco Mundial

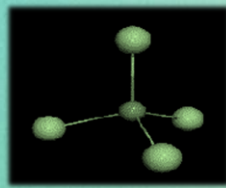


XXIII
JORNADAS
CIENTÍFICAS
ROGER GUERRA-GARCÍA CUEVA

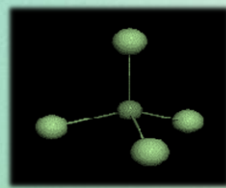


ANEXO

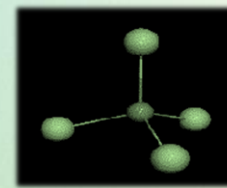
Cálculos numéricos



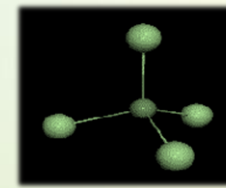
ν_1



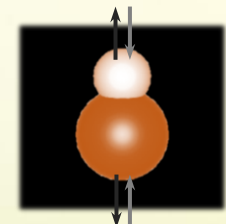
ν_2



ν_3

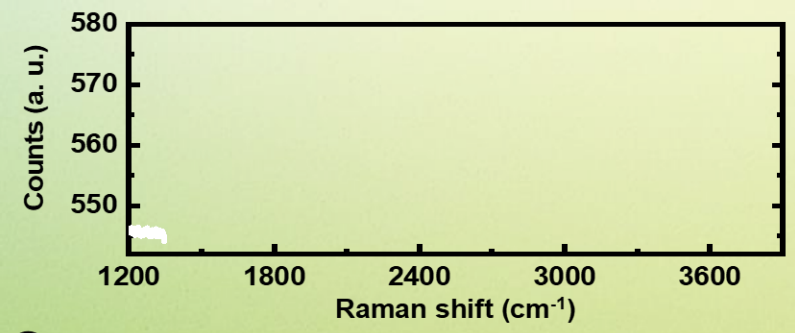
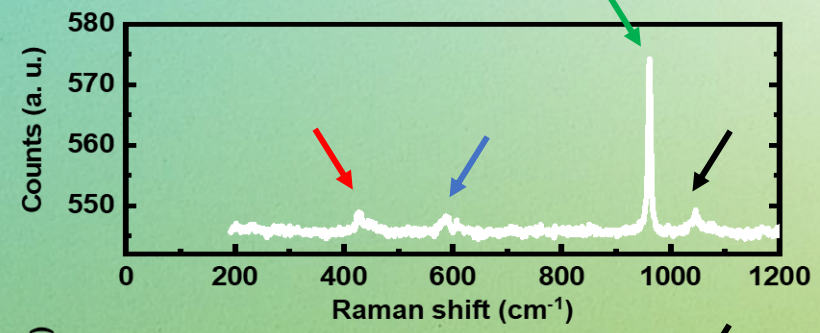


ν_4

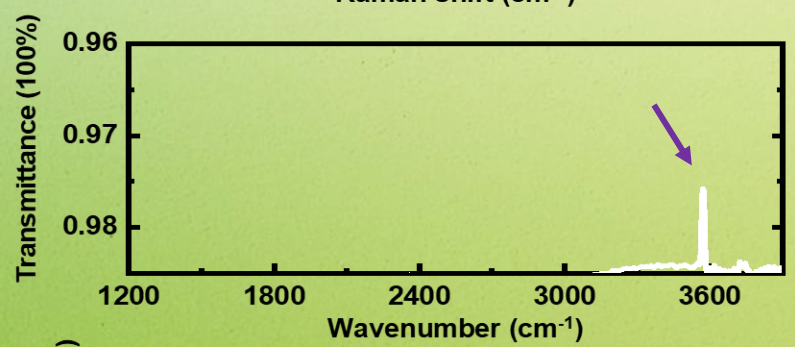
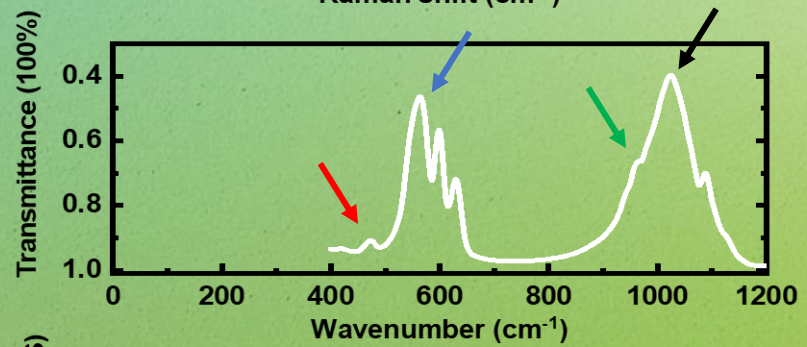


OH

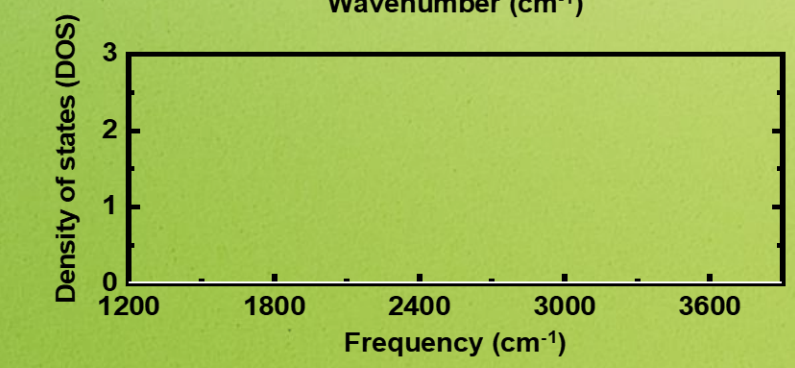
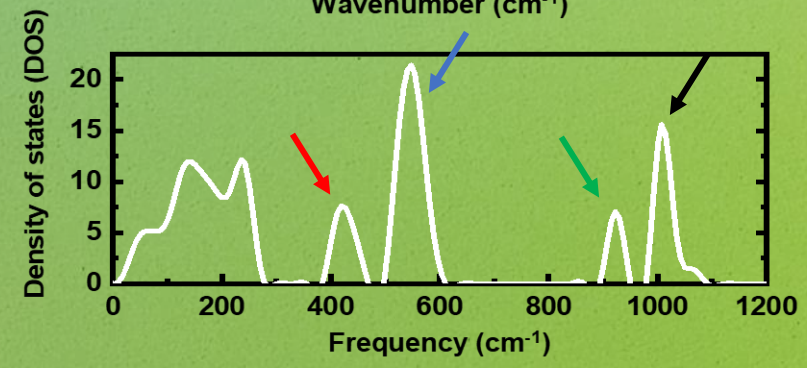
CRM



FTIR



PhDOS



HAp-SG