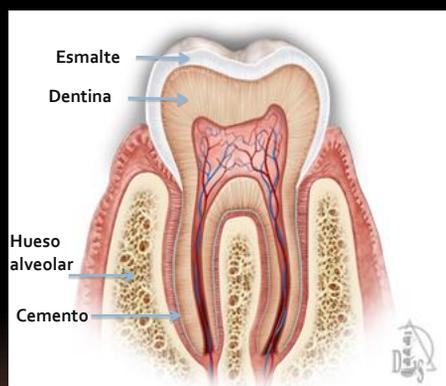


ESTRUCTURA Y PROPIEDADES FISICOQUÍMICAS DEL DIENTE.

Tejidos dentales mineralizados.



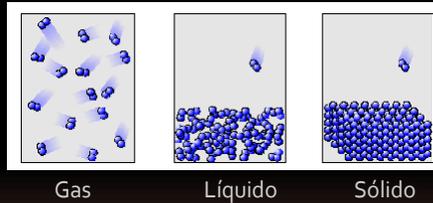
Naturaleza Físicoquímica



Estado Sólido

Estados de agregación de la materia.

Fuerzas intermoleculares de diferente tipo y magnitud producen diferentes estados de agregación.

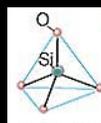
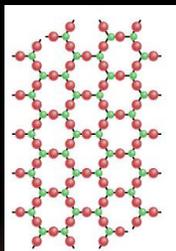


Tipos de sólidos

Sólido Cristalino

Poseen un ordenamiento altamente regular de sus componentes.

Quarzo (SiO_2)

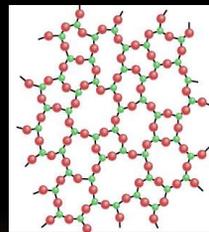


SiO_2

Sólido Amorfo

Carecen de un ordenamiento sistemático en su estructura.

Sílice (SiO_2)



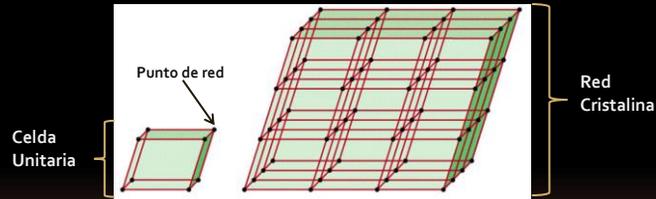
Sólidos Cristalinos

Estructura Cristalina

Es la disposición periódica y ordenada en el espacio 3D de los constituyentes atómicos de un sólido en estado cristalino.

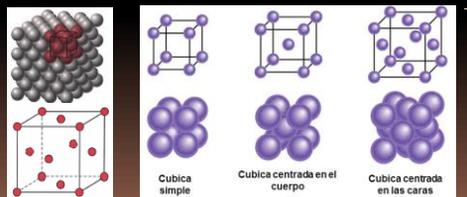
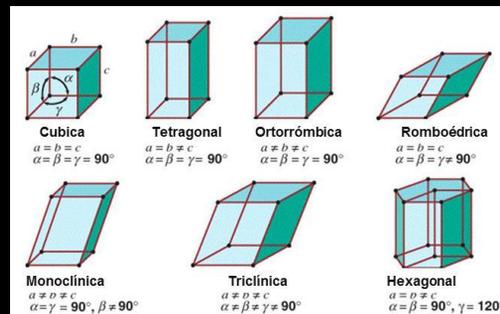
Celda Unitaria

Unidad repetitiva *más pequeña* de un sólido cristalino.



Puntos de Red: Átomos
Moléculas
Iones

7 Celdas Unitarias



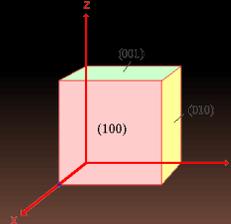
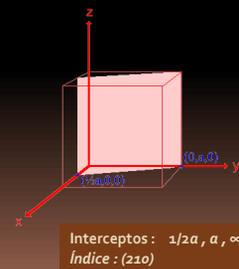
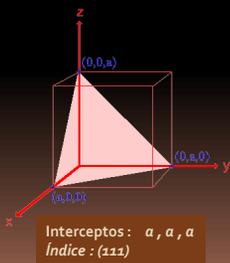
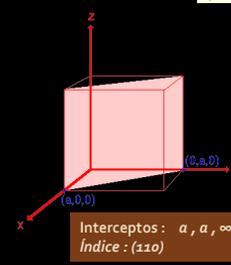
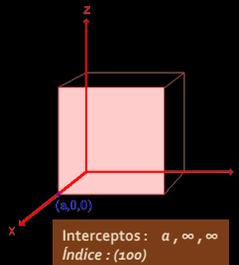
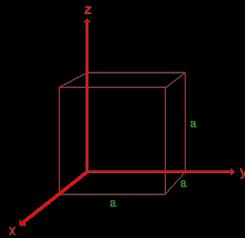
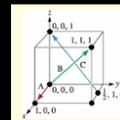
3 tipos de celdas cúbicas

Redes de Bravais

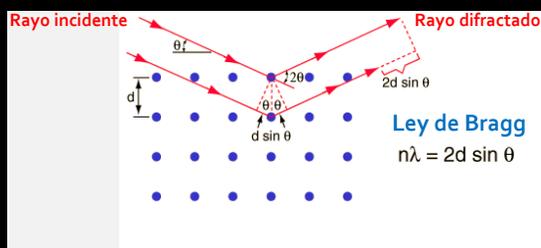
14 arreglos distintos de puntos de red

Bravais lattice	Parameters	Simple (P)	Volume centered (I)	Base centered (C)	Face centered (F)
Triclinic	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$ $\alpha_{12} \neq \alpha_{23} \neq \alpha_{31}$				
Monoclinic	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$ $\alpha_{23} = \alpha_{31} = 90^\circ$ $\alpha_{12} \neq 90^\circ$				
Orthorhombic	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$ $\alpha_{12} = \alpha_{23} = \alpha_{31} = 90^\circ$				
Tetragonal	$a_1 = a_2 \neq a_3$ $\alpha_{12} = \alpha_{23} = \alpha_{31} = 90^\circ$				
Trigonal	$a_1 = a_2 = a_3$ $\alpha_{12} = \alpha_{23} = \alpha_{31} < 120^\circ$				
Cubic	$a_1 = a_2 = a_3$ $\alpha_{12} = \alpha_{23} = \alpha_{31} = 90^\circ$				
Hexagonal	$a_1 = a_2 \neq a_3$ $\alpha_{12} = 120^\circ$ $\alpha_{23} = \alpha_{31} = 90^\circ$				

Sólidos Cristalinos Índices de Miller

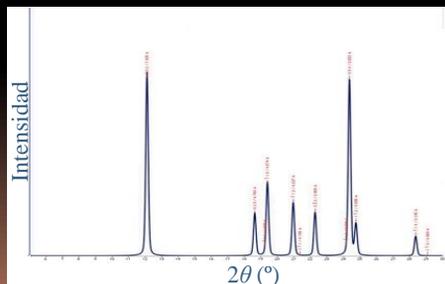


Análisis de Difracción de rayos X



Patrón de difracción de rayos X

d(A)	d^2 (\AA^2)	hkl	2θ ($^\circ$)
3.371	1100	0 1 2	23.83
2.478	15	1 0 0	23.25
2.002	7	1 1 0	24.44
2.244	14	1 1 1	20.12
3.133	2	2 0 2	42.34
1.8664	21	0 2 0	44.75
2.68808	21	1 1 0	24.27
1.4448	10	2 2 2	33.71
1.5419	3	1 0 0	33.18
2.5157	4	2 1 0	41.20
1.5013	5	0 0 0	61.75
1.6366	1	1 2 3	49.89
1.3386	5	2 0 0	39.28
1.3796	2	2 2 0	27.70
1.2841	1	1 1 0	73.59
1.2771	3	1 0 0	74.15
1.2695	1	2 1 7	74.75
1.24508	2	1 0 0	76.54
1.24348	2	1 3 1	76.54
1.2276	5	0 1 2	77.73
1.1952	2	1 2 0	89.64
1.1893	1	1 3 0	82.42



- Cada uno de los peaks de difracción corresponde a un determinado plano del cristal.
- El patrón de DRX es único para cada fase cristalina.

Propiedades de los sólidos en estado cristalino

Periodicidad: de la que deriva la: **homogeneidad, anisotropía y simetría.**

- **Homogeneidad:** constancia de la composición química y estado de fase a través de todo el volumen del material cristalino.
- **Anisotropía:** si alguna propiedad del material cristalino, es dependiente de la orientación en la que se mide, el material es anisótropo para esa propiedad. Si la propiedad es independiente de la orientación, se dice que el material es isótropo para esa propiedad. Los materiales cristalinos siempre son anisótropos para alguna propiedad.
- **Simetría:** es la propiedad que hace que un objeto no se distinga de su posición original después de haberle aplicado una transformación.

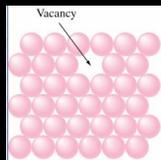
En general un sólido cristalino a nivel macroscópico será homogéneo continuo, anisótropo (para alguna propiedad) y simétrico.

Defectos cristalinos.

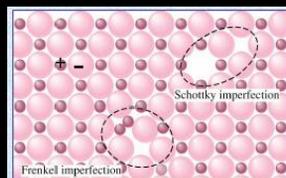
Imperfecciones que afectan a la distribución ordenada y geométrica de los constituyentes atómicos.

➤ Defectos puntuales

1. Vacancia: posición atómica de la estructura sin ocupar.



Imperfecciones de Frenkel y Schottky

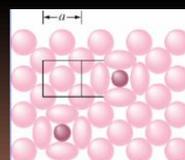


Formación de defectos: $\Delta G < 0$ ($\Delta H > 0$, $\Delta S > 0$).

2. Sustitución: un ión del cristal es sustituido por otro de igual carga y similar tamaño. (impurezas).



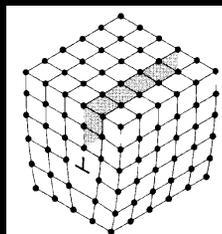
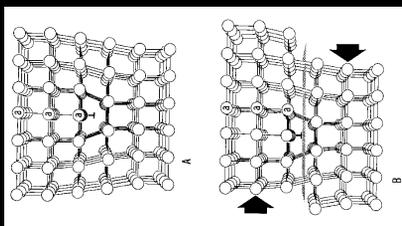
3. Intersticial: espacio de la estructura ocupado por un átomo que no le corresponde.



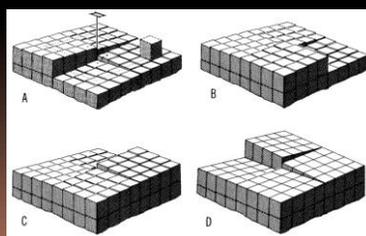
Defectos cristalinos.

➤ Defectos lineales

Dislocación de filo: se inserta un plano entre dos planos normales.



Dislocación helicoidal
distorsiones debido a fuerzas de cizalla.



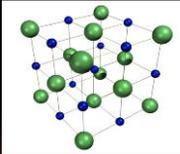
Tipos de sólidos cristalinos

Iónicos

Covalentes

Metálicos

1. Cristales Iónicos: cuando se disuelven en solución se disocian en sus iones componentes conduciendo la electricidad. Ej. NaCl



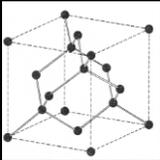

Propiedades:

- Dureza y densidad moderada
- Puntos de fusión y ebullición elevados.
- Conductividad eléctrica y térmica muy baja.
- Elevada simetría.

2. Cristales Covalentes: la malla cristalina está conformada por átomos o moléculas unidas mediante enlaces covalentes. Ej. Diamante.

Propiedades:

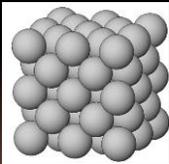
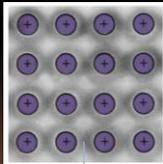
- Insolubilidad
- Alta estabilidad
- No forman iones en solución,
- Puntos de fusión y de ebullición muy elevados




3. Cristales Metálicos: Los puntos de red están ocupados por átomos metálicos. Ej. Plata.

Propiedades:

- Plasticidad
- Tenacidad
- Ductilidad
- Conductividad y maleabilidad.
- Baja dureza
- Bajos puntos de fusión.

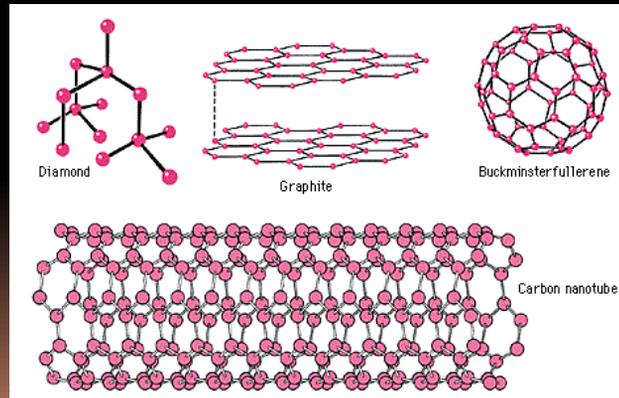



Electrones móviles

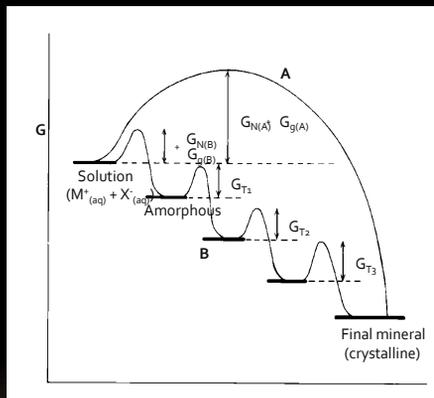
Polimorfismo.

Es la habilidad de una sustancia por existir en más de una forma cristalina.
Puede cristalizar en más de una estructura cristalina.

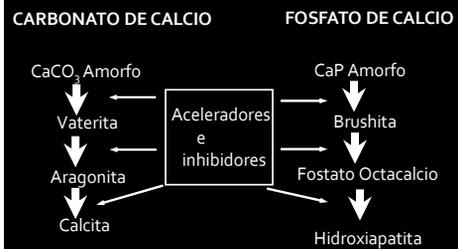
Polimorfos de carbono



Polimorfismo y transformaciones de fase



Tienden a estabilizarse en la forma cristalina termodinámicamente más estable.



Tejidos dentales mineralizados

Esmalte:

- Protege la superficie apical del diente
- Sustancia más dura y mineralizada del organismo
- No está vivo, pero sufre cambios físico-químicos dinámicos
- Producido por los ameloblastos.

Dentina:

- Constituye el volumen principal del diente
- Menor dureza y mineralización que el esmalte: Base elástica
- Matriz mineralizada + túbulos dentinarios (procesos odontoblásticos)
- Íntimamente relacionada con la pulpa (complejo dentino-pulpar).

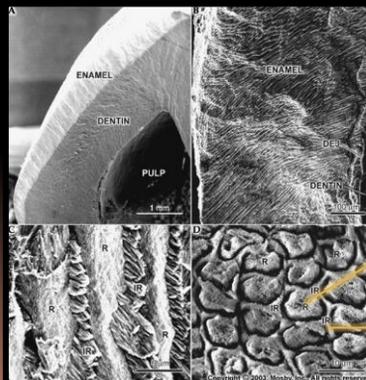
Cemento:

- Protege la superficie radicular del diente.
- Composición química y propiedades muy similares a las del hueso.

Estructura cristalina del tejido dental



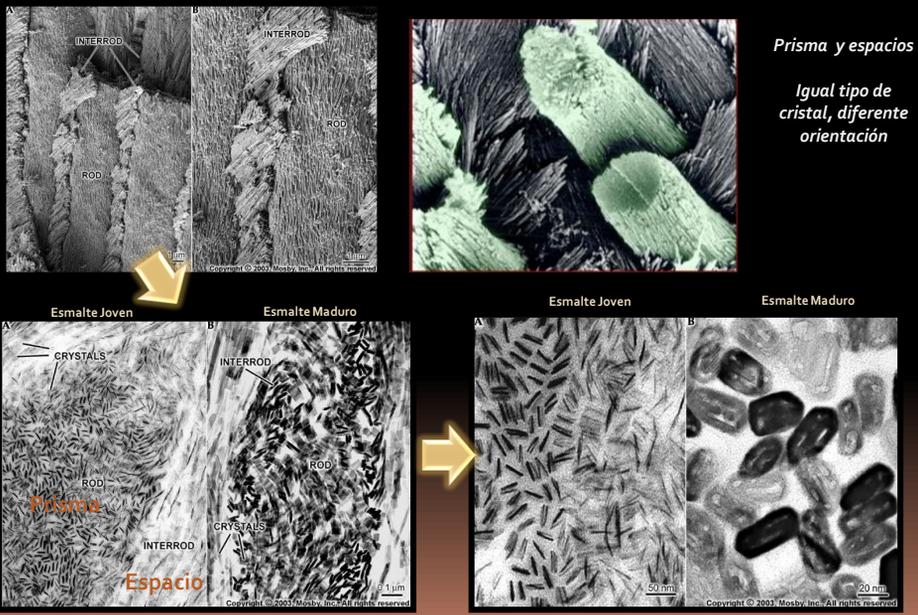
Microscopía electrónica de barrido (SEM) y de transmisión (TEM)



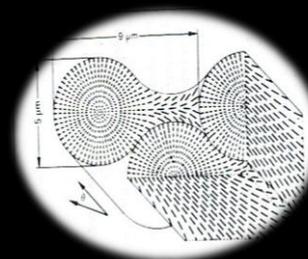
Prismas (R)

Espacio interprismático (IR)

Estructura cristalina del tejido dental



Estructura cristalina del tejido dental



Orientación de los cristales

¿Cuál es la naturaleza de los cristales que forman el tejido dentario?

Cristales de Hidroxiapatita

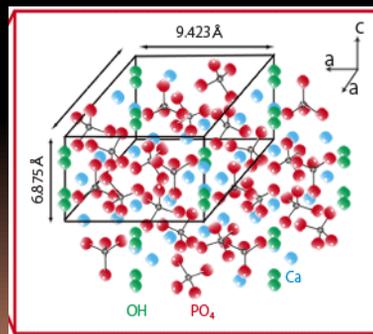
Apatitas

Fosfatos de calcio de fórmula general: $\text{Ca}_{10}(\text{X})_2(\text{PO}_4)_6$

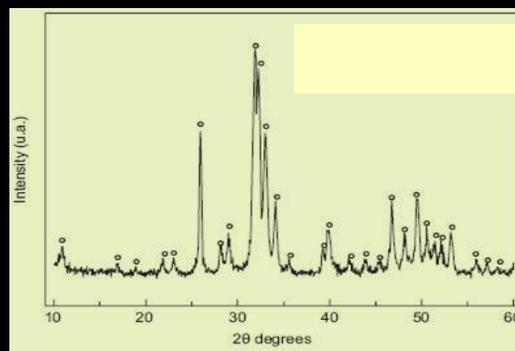
Donde X = OH⁻ Hidroxiapatita $\text{Ca}_{10}(\text{OH})_2(\text{PO}_4)_6$ X = F⁻ Flúorapatita $\text{Ca}_{10}(\text{F})_2(\text{PO}_4)_6$

Hidroxiapatita carbonatada $\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_{6-x}(\text{OH})_{2-y}(\text{CO}_3)_{x+y}$

Celda unitaria (OHAp)



Patrón DRX de Hidroxiapatita



Sistema Cristalino : Hexagonal
 Grupo Espacial: P6₃/m
 Parámetros de red: a= 0.9432 nm, c =0.6881 nm.

Formación de tejidos duros: Principio de Biomineralización

La mineralización inducida biológicamente involucra la precipitación de fases minerales mediante reacción entre iones y productos metabólicos generado por la células del tejido.

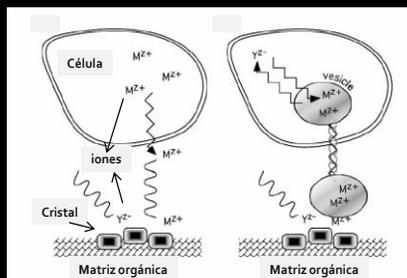
Los biominerales son aglomeraciones de cristales separados por una matriz orgánica.



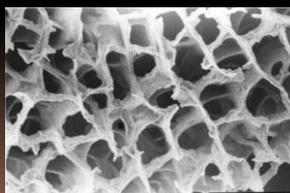
Biomineralización principios

Etapas Proceso de
cristalización:
Nucleación y Crecimiento

Nucleación fuera de la célula



Biomineralización
Intercelular en una
estructura de coral

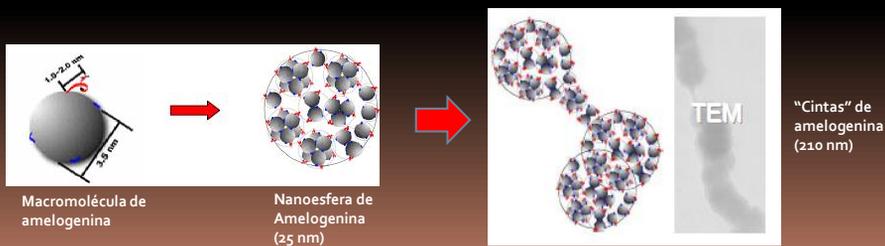


Biomíneralización de estructuras dentarias

Las células ameloblastos secretan amelogenina, proteína que modula la deposición de los cristales de hidroxipatita (esmalte). Similar proceso ocurre con los odontoblastos (dentina) y osteoblastos (hueso)

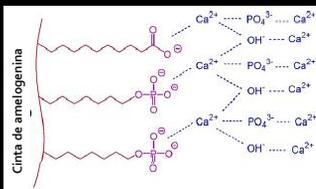
Amelogenina (5-22kDa)

- ✓ Proteína extracelular del esmalte.
- ✓ Naturaleza hidrofóbica e hidrofílica.
- ✓ Posee una serina fosforilada.
- ✓ Propiedades tipo lectinas
- ✓ Capacidad par "autoensamblarse" en la forma de nanoesferas.

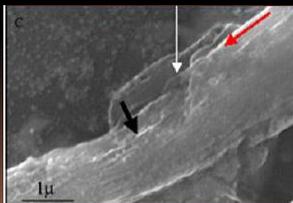


Biomíneralización del esmalte mediado por amelogenina

Mineralización de hidroxipatita sobre la superficie de amelogenina

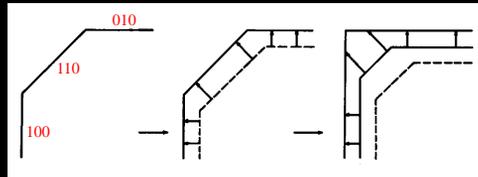


Forma, tamaño y orientación del cristal puede ser afectado por la matriz proteica, así como por la saturación y flujo de iones en el medio.



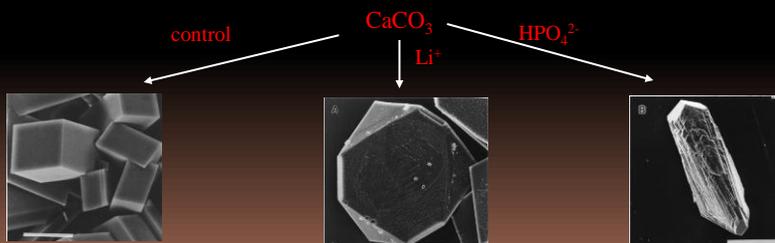
Apatita mineralizada sobre amelogenina

Control de la morfología del cristal



El tiempo de cristalización puede modificar la morfología final.

Efecto de la composición química



Composición de los tejidos dentales mineralizados

Tejido	Densidad	Inorgánico		Orgánico		Agua	
		% Peso	%Vol.	%Peso	%Vol.	%Peso	%Vol.
Esmalte	2.9 - 3.0	95	87	1	2	3.0	11.0
Dentina	2.05 - 2.35	70	47	20	33	10	21
Cemento	2.02 - 2.05						
Hueso	2.1 - 2.2	65	36	24	26	15	28

Composición de los tejidos dentales mineralizados

Componente	Esmalte	Dentina	Hueso
Agua	8	5	4
Mineral	95	75	70
Orgánico	0.6	20	22
Colágeno	0.35	18	18.6
Otras proteínas: Glucoproteínas, sialoproteínas, amelogenina, enamelina, osteocalcina, otras	0.2	0.2	1
Otras biomoléculas: Lípidos, citrato, lacto, Sulfato de Condroitina	0.05	1.8	2.4
Densidad	3.05	2.15	2.03

Elementos e iones mayoritarios del esmalte

Ion	Esmalte	Hidroxiapatita	Fluorapatita
Ca	33.6 - 39.4	39.9	39.7
P	16.1 - 18.0	18.5	18.4
CO ₃	1.95 - 3.66		
Mg	0.25 - 0.56		
Na	0.25 - 0.90		
K	0.05 - 0.30		
Cl	0.19		
F	0.006 - 0.3		
Ca/P	1.48 - 1.67	1.67	1.67

Constituyentes menores del esmalte

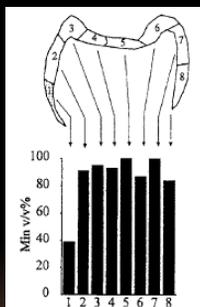
Constituyente	ppm
F	50 - 5000
Fe	8 - 218
Zn	152 - 227
Sr	50 - 400
Cu	10 - 100
Mn	0 - 18
Ag	0 - 10

Elementos traza del esmalte

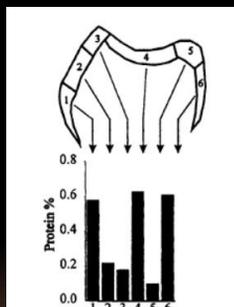
Componente	Esmalte (ppm)	Dentina (ppm)	Componente	Esmalte (ppm)	Dentina (ppm)
Al	5-700	10-100	Y	0.01 - 0.2	
Sb	0.02-0.34	0.7	Li	0.23 - 3.40	
S	130 - 530		Mn	0.08 - 20.0	0.6 - 1000
Ba	0.08 - 500	10 - 130	Mo	0.7 - 39.0	1 - 10
B	0.5 - 39	1 - 10	Ni	10 - 100	10 - 100
Br	0.03 - 35	114	Au	0.02 - 0.10	0.07
Cd	0.03 - 10		Ag	0.005 - 1.3	2.2
Co	<0.1 - 100	1 - 100	Rb	0.2 - 10	1 - 10
Cu	0.1 - 130	0.2 - 100	Se	0.1 - 10	10 - 100
Cr	<0.1 - 100	1 - 100	Ti	<0.1 - 100	10 - 100
Sn	0.03 - 0.9		V	0.01 - 0.03	1 - 10
Sr	26 - 1000	90 - 1000	Zn	60 - 1800	10 - 1000
Fe	0.08 - 200	90 - 1000	Zr	<0.02 - 0.6	

Distribución de componentes en el esmalte

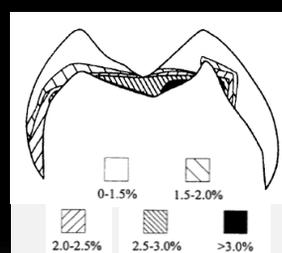
Porcentaje **mineral** (%v/v) en diferentes zonas del esmalte



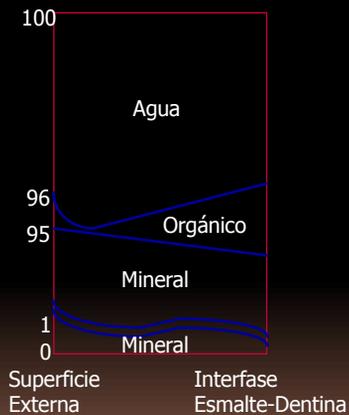
Distribución de **proteínas** (%m/m)



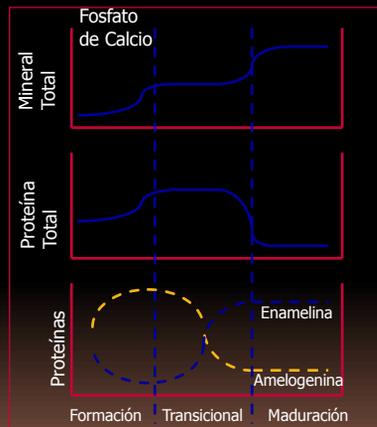
Distribución de **carbonato** (% m/m)



Distribución de componentes en el esmalte



Etapas de Maduración del Esmalte



Propiedades Mecánicas

	<i>Densidad (g/cm³)</i>	<i>E (GPa)</i>	<i>Esfuerzo Compresión (MPa)</i>	<i>Resistencia Tracción (MPa)</i>	<i>Coefficiente de expansión térmica (1/C)</i>
<i>Esmalte</i>	<i>2.2</i>	<i>48</i>	<i>241</i>	<i>10 (ish)</i>	<i>11.4x10⁻⁶</i>
<i>Dentina</i>	<i>1.9</i>	<i>13.8</i>	<i>138</i>	<i>35-52</i>	<i>8.3x10⁻⁶</i>

E: Módulo de Young.

Sustituciones en OHAp por Fluoruro

Fluorapatita
38 000 ppm de
Fluoruro

Sustitución OH^- / F^-
100%

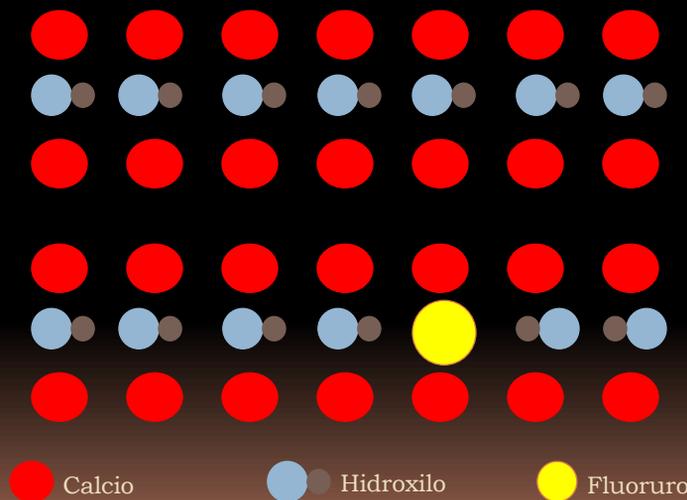
Esmalte Superficial (10 mcm)
2000 - 4000 ppm de
Fluoruro

Sustitución OH^- / F^-
max. 10%

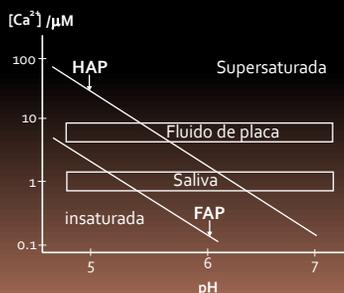


Triángulo de Calcio

Efecto del Ión Fluoruro sobre los Iones Hidroxilos



Efecto del ión fluoruro sobre el cristal de hidroxiapatita



Efecto del ión carbonato sobre el cristal de hidroxiapatita

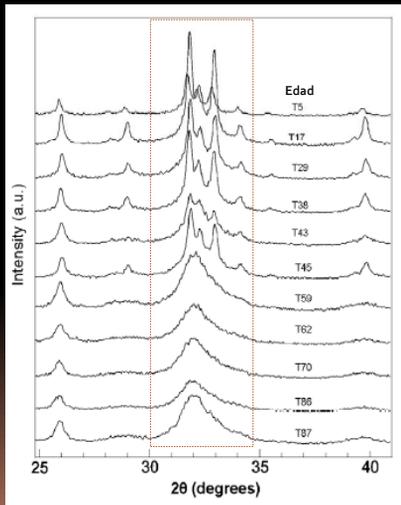


- Celda Unitaria Expandida
- Presencia de Impurezas Sustitucionales y Vacancias y/o Impurezas Intersticiales.
- Disminución de la Cristalinidad
- Disminución de la Dureza
- Apatita menos Estable (Carbonato Lábil)
- Apatita más Soluble

Apatita	Kps
Hidroxiapatita	2×10^{-115}
Carboxiapatita	9×10^{-105}
Fluorapatita	1×10^{-119}
Esmalte	$5 \times 10^{-105} - 4 \times 10^{-115}$

Estructura cristalina y química de hidroxiapatita del esmalte en función de la edad.

Análisis DRX



Análisis espectroscopia IR

