

Modélisation d'apatites biomimétiques analogues au minéral osseux

A. Mirland^a, S. Sarda^a, C. Drouet^a, C. Lacaze-Dufaure^{a*}

a. CIRIMAT, Université de Toulouse, UMR CNRS/INPT/UT3 5085, Toulouse, France

* email : Corinne.Dufaure@ensiacet.fr

Les apatites nanocristallines biomimétiques sont des phosphates de calcium lacunaires et éventuellement substitués, présentant globalement la structure cristallographique apatitique mais un état de surface particulier impliquant une couche ionique hydratée amorphe (non apatitique). Ces composés sont analogues à la partie minérale des os. Que ce soit dans la compréhension des phénomènes liés au minéral osseux, de diagénèse osseuses (*postmortem*), ou encore d'analogues de synthèse pour la fabrication de biomatériaux, les cristaux d'apatite mettent en jeu une grande réactivité de surface par le biais d'échanges ioniques et d'adsorption de (bio)molécules organiques variées.

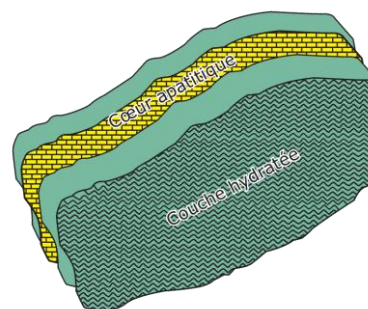


Figure 1 : Nanocristal d'apatite

Des études expérimentales ont permis de déterminer des informations pertinentes relatives à la structure et à la composition chimique des apatites biomimétiques (ou osseuses) : le cœur des nanocristaux est apatitique et non-stœchiométrique alors que la couche de surface est non-apatitique et se rapproche d'une section structurale du phosphate octocalcique (OCP). Cependant, afin d'aider à la compréhension de la réactivité de ces composés, et ainsi mieux appréhender les phénomènes de biominéralisations (normales ou pathologiques), ou encore d'aider au développement des substituts osseux à visée thérapeutique, il est désormais nécessaire d'adjoindre aux études expérimentales une approche de modélisation à l'échelle moléculaire/atomique.

Nous présentons dans ce travail les premiers résultats de nos expérimentations numériques (calculs DFT avec approche périodique). Un modèle des nanocristaux d'apatite biomimétique a été construit en deux étapes : dans un premier temps, la structure du cœur apatitique sous-stœchiométrique a été modélisée, puis dans un second temps un modèle numérique de la couche hydratée non-apatitique de surface a été développé en se basant sur des données expérimentales « de référence ». L'adsorption de molécules bioactives d'intérêt thérapeutique sur notre modèle a par la suite été explorée.

Le développement de méthodes numériques appliquées à ces problématiques devrait permettre de progresser significativement dans la connaissance des apatites nanocristallines, naturelles ou de synthèse, et leur réactivité, que ce soit dans un but fondamental ou appliqué.

[1] C. Drouet, D. Grossin, C. Combes, S. Sarda, S. Cazalbou, C. Rey Techniques de l'Ingénieur, (2018) art.#IN227 v1, 20p.