

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

99-132

P14-99-132

Г.Батдэмбэрэл, Д.Сангаа*, Д.Чултэм

ГОМОЛОГИЯ СТРУКТУРЫ
КОСТНОГО МИНЕРАЛА
ПОЗВОНОЧНЫХ ЖИВОТНЫХ

Направлено в журнал «Nukleonika»

*Монгольский национальный университет,
г.Улаанбаатар

1999

1. Введение

Настоящая работа посвящена сравнительному исследованию микроскопической структуры минерального компонента костей позвоночных животных (крупного рогатого скота, овцы и динозавра). Домашние животные, кости которых исследовались, обитали на территории Монголии, а динозавры, остатки которых были найдены в пустыне Гоби, по-видимому, обитали в пределах обширного региона азиатского континента, на территории современной Монголии, Узбекистана, Казахстана и Китая. Возрасты этих костей различаются астрономическим масштабом от 50 до 250 миллионов лет, что вызывает интерес с точки зрения истории естествознания, в частности, биологической эволюции. Поскольку возможность сравнительного исследования различия молекулярной структуры этих организмов сильно ограничена, наши исследования имели целью выяснить вопрос о наличии или отсутствии гомологии кристаллической структуры костей различных видов животных.

В различных областях науки, химии, биологии, физики и математики, в понятие гомологии вкладывается разный смысл, но во всех случаях под гомологией подразумевается существование общих признаков, характеризующих индивидуальных представителей различных групп. Сложное понятие гомологии соответствует реальной структуре, а понятие симметрии соответствует идеальной структуре, а в данной работе понятие гомологии отождествляем с идентичностью кристаллической сингонии у различных объектов. В данной работе для определения пространственных групп структуры исследуемых минералов использован дифракционный метод анализа.

2. Эксперимент и результаты

Эксперимент проведен на нейтронном дифрактометре ДН-2, установленном на пучке реактора ИБР-2 ОИЯИ (Дубна). Нейтронный пучок на образец формируется изогнутым зеркальным нейтроноводом. Расстояние между замедлителем и образцом $L = 24$ м. Средний поток на образце составлял 10^{17} н/см² с. Рассеянные нейтроны регистрировались под углом $\theta_0 = 87.5$ градусов однокоординатным гелиевым (³He) детектором, соединенным с времяпролетной электроникой. Угловая градуировка произведена с помощью образца NaCl, имеющего известную структуру. Разрешение дифрактометра $\Delta d/d \sim 1\%$ при $d_{hkl} = 2$ Å.

Каждый порошковый образец помещался в цилиндрическом контейнере диаметром 7 мм из алюминиевой фольги толщиной 5 мкм. Образцы костей крупного рогатого скота и овцы подвергались химической термообработке для изоляции органического компонента. В случае кости динозавра не было

необходимости химической обработки из-за полного разложения органического компонента за большие геологические времена. Образец содержал только минеральный компонент.

Дифракционные спектры нейтронов в зависимости от длины волны накапливаются в электронной памяти. Все дифракционные пики в спектрах были идентифицированы в рамках тригональной структуры (пр. гр. $R\bar{6}_3/m$). Ни одного сколько-нибудь заметного дифракционного пика от других фаз найдено не было. Обработка данных производилась по методу Ритвельда [1] с использованием программы MRIA [2]. Когерентные длины рассеяния брались из [3]: 0.48, 0.513, 0.580, -0.374 , 0.566 и 0.957 фм, соответственно для Ca, P, O, H, F и Cl. Уточнение структурных параметров проводилось для 195 дифракционных пиков по структурной модели $(Ca_5[PO_4]_3(OH, F, Cl))$, на базе данных "American Mineralogist Crystal Structure Database" [4]. Дифракционные спектры, полученные в результате обработки, приведены на рисунках. 1, 2, 3. Структурные данные собраны в таблице 1.

3. Обсуждение результатов

- Полученные в нейтронографическом эксперименте данные показывают, что в современных костях крупного рогатого скота и овцы доминирует фаза $Ca_5[PO_4]_3(OH, F, Cl)$, имеющая низкую кристаллическую сингонию (пр. гр. $R\bar{6}_3/m$). Это совпадает с результатами нейтронографического [5] и рентгенографического [6] исследования кости динозавра. Таким образом, проведенный эксперимент показал, что кристаллические фазы как современных, так и древних ископаемых костей позвоночных животных имеют однотипную структуру (гомологию). Обнаружение гомологии структуры костного минерала у разных животных на уровне кристаллической решетки представляет собой важный вклад в решение фундаментальных научных проблем эволюции видов животных.

- Кроме того, данный результат может иметь прикладное значение, в частности, он может оказаться весьма полезным при решении некоторых медико – биологических проблем, связанных с позвоночными животными и человеком:

- а). Из аналогии (гомологии) структуры фазы костного минерала различных позвоночных следует, что накопление радиоактивных элементов: Sr, Ra, Th, U, Pu в костях человека [7], может быть изучено путем измерения этих элементов в организме других животных, обитающих в соответствующей местности. Это позволило бы избежать сложной медицинской и юридической проблемы препарирования кости человека для исследовательских целей.

- б). Известно, что биоактивная керамика: гидроксиапатит, нанесенный на подложку из титана, является перспективным материалом для ортопедии и стоматологии. Однако из недавних работ [8, 9] следует, что физико-механические

Таблица 1.

x/a , y/b , z/c - координаты атомов, B - тепловой фактор, n - заселенность, V - объем решетки, a , c - параметры решетки

A. Кость крупного рогатого скота, пр. гр. P6₃/m (176).									
Атом	Позиции	x/a	y/b	z/c	B	n	V	$a, \text{Å}$	$c, \text{Å}$
Ca1	4(f)	0.667	0.333	0.032	0.304	0.222	539.2	9.51	6.90
Ca2	6(h)	-0.006	0.237	0.250	0.908	0.250			
P1	6(h)	0.369	0.394	0.250	0.331	0.270			
O1	6(h)	0.479	0.323	0.250	0.251	0.189			
O2	6(h)	0.470	0.590	0.250	0.003	0.473			
O3	12(i)	0.259	0.328	0.063	0.438	0.210			
O4	2(b)	0.000	0.000	0.250	0.107	0.290			
H	2(b)	0.000	0.000	0.250	0.151	0.710			
F	2(b)	0.000	0.000	0.250	0.381	0.140			
Cl	2(b)	0.000	0.000	0.420	0.001	0.020			

Критерии достоверности: $R_p = 2.17$, $R_w = 2.60$, $R_e = 2.35$, $\chi^2 = 1.18$

B. Кость овцы, пр. гр. P6₃/m (176).									
Атом	Позиции	x/a	y/b	z/c	B	n	V	$a, \text{Å}$	$c, \text{Å}$
Ca1	4(f)	0.667	0.333	0.022	0.303	0.235	524.7	9.37	6.88
Ca2	6(h)	-0.006	0.257	0.250	0.708	0.263			
P1	6(h)	0.369	0.399	0.250	0.002	0.294			
O1	6(h)	0.486	0.327	0.250	0.257	0.276			
O2	6(h)	0.459	0.588	0.250	0.003	0.482			
O3	12(i)	0.240	0.320	0.064	0.009	0.240			
O4	2(b)	0.000	0.000	0.250	0.003	0.310			
H	2(b)	0.000	0.000	0.250	0.186	0.690			
F	2(b)	0.000	0.000	0.250	0.301	0.140			
Cl	2(b)	0.000	0.000	0.422	0.767	0.060			

Критерии достоверности: $R_p = 2.16$, $R_w = 2.74$, $R_e = 2.60$, $\chi^2 = 1.07$

B. Кость динозавра, пр. гр. P6₃/m (176).									
Атом	Позиции	x/a	y/b	z/c	B	n	V	$a, \text{Å}$	$c, \text{Å}$
Ca1	4(f)	0.667	0.333	0.001	0.404	0.155	526.9	9.37	6.91
Ca2	6(h)	0.974	0.198	0.250	0.508	0.150			
P1	6(h)	0.376	0.415	0.250	0.001	0.199			
O1	6(h)	0.479	0.323	0.250	0.251	0.289			
O2	6(h)	0.466	0.589	0.250	0.689	0.384			
O3	12(i)	0.259	0.348	0.064	0.236	0.590			
O4	2(b)	0.000	0.000	0.250	0.163	0.431			
H	2(b)	0.000	0.000	0.250	0.858	0.569			
F	2(b)	0.000	0.000	0.250	0.825	0.137			
Cl	2(b)	0.000	0.000	0.428	0.734	0.139			

Критерии достоверности: $R_p = 2.20$, $R_w = 2.02$, $R_e = 2.18$, $\chi^2 = 1.81$

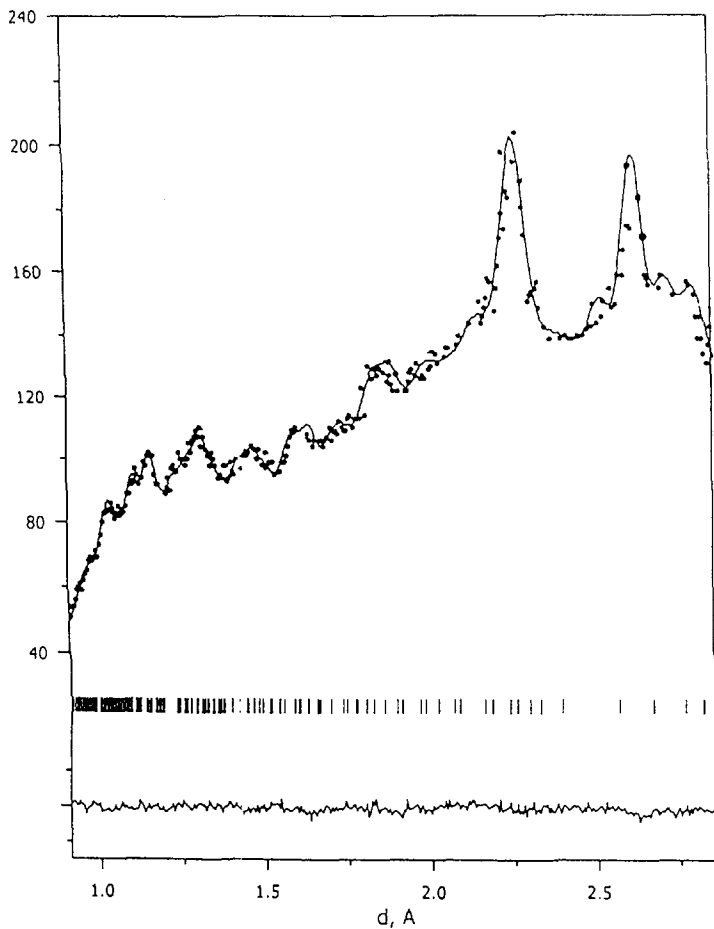


Рис.1. Дифракционный спектр позвоночной кости *крупного рогатого скота*.
 (Фаза: $\text{Ca}_5[\text{PO}_4]_3 \cdot (\text{OH}, \text{F}, \text{Cl})$). Точки — исходный спектр, линия — расчет,
 внизу - их разность и расчетные положения пиков

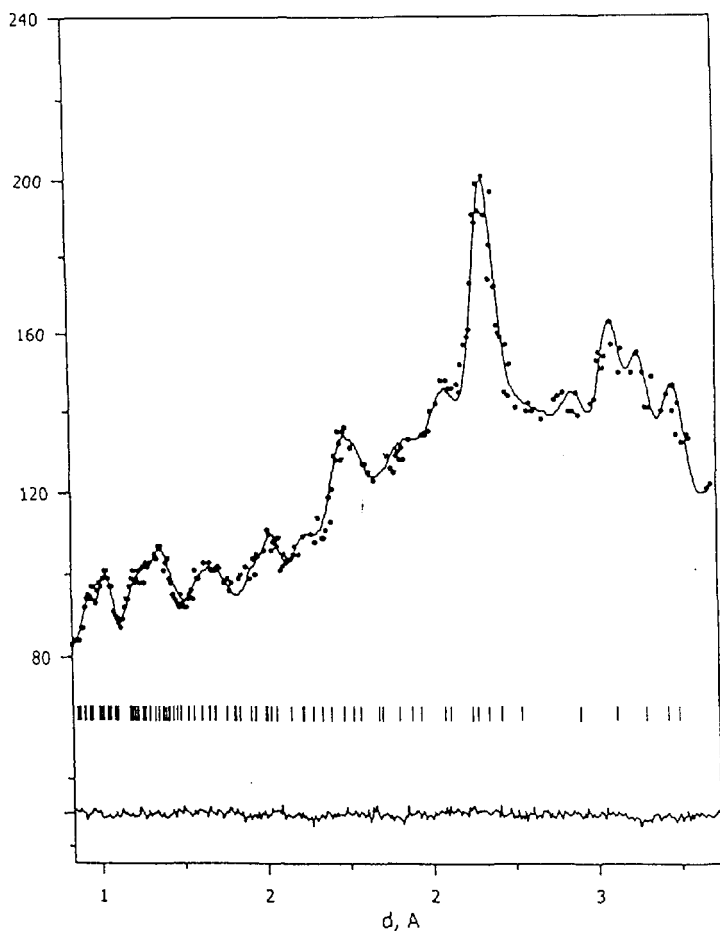


Рис.2. Дифракционный спектр плечевой кости *овцы*.
 (Фаза: $\text{Ca}_5[\text{PO}_4]_3(\text{OH}, \text{F}, \text{Cl})$).
 Точки — исходный спектр, линия — расчет,
 внизу - их разность и расчетные положения пиков

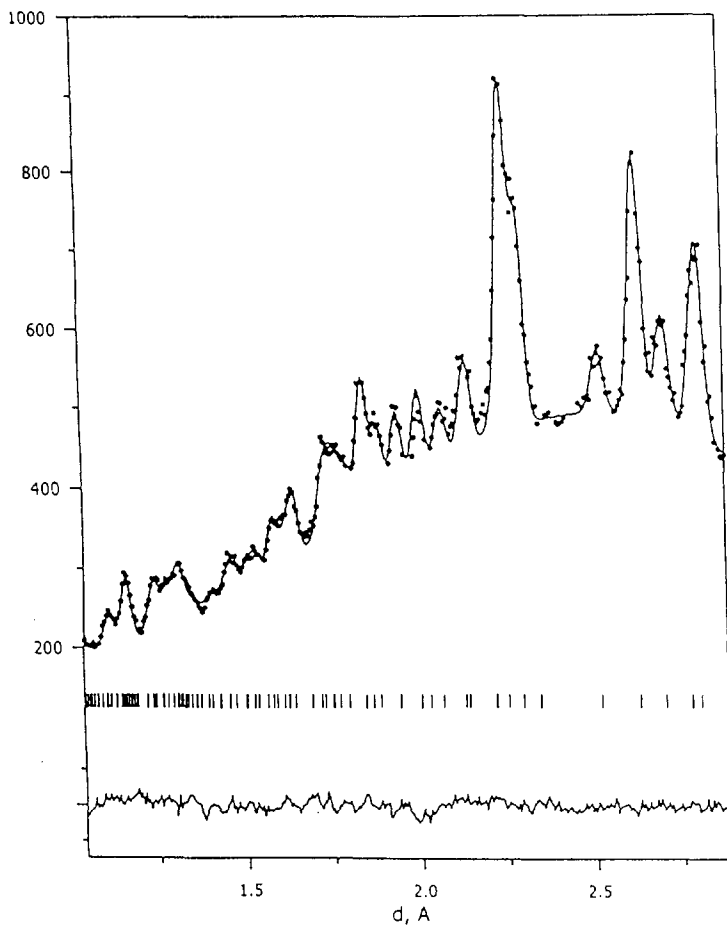


Рис.3. Дифракционный спектр реберной кости *динозавра*.
 (Фаза: $\text{Ca}_5[\text{PO}_4]_3(\text{OH}, \text{F}, \text{Cl})$).
 Точки — исходный спектр, линия — расчет,
 внизу - их разность и расчетные положения пиков

свойства и биологическая совместимость новых фаз, образующихся на границе раздела металл – гидроксипатит недостаточно изучены.

При решении подобных задач метод рассеяния нейтронов может быть успешно применен.

4. Благодарности

Авторы выражают благодарность А.И. Бескровному, С. А. Кутузову и А.Х. Исламову за помощь в проведении нейтронных экспериментов и полезное обсуждение результатов измерения, а также профессору Е.А. Красавину и сотрудникам ОРРИ ОИЯИ за ценные советы по медико-биологическим проблемам.

Литература

1. Rietveld H.M. // Acta Cryst. 1967. v.22. p.151.
2. V.B. Zlokazov, V.V. Chernyshov, MRIA - a program for full profile analysis of powder neutron - diffraction time-of-flight (direct and fourier) spectra. jintr, p.10-90-315, Dubna, 1990.
3. V.F.Sears, Neutron News, vol.3, No.3, 1992.
4. <http://www.geo.arizona.edu/xtal/cgi/mgate>: Hughes J.M., Cameron M., Crowley K.D. American Mineralogist 74 (1989) 870-876.
5. Г. Батдэмбэрэл, Д. Сангаа, Д. Чултэм., Исследование структуры ископаемого костного минерала с помощью рассеяния нейтронов. ОИЯИ, Р14-99-131, Дубна, 1999.
6. Д. Чултэм, Д. Сангаа, А.А. Кацнельсон., Рентгенографические исследование костей динозавра. МУИС, ЭШБ, N3(99) 1988, Монголия.
7. L.Tandon, G.V.Iyenger and R.M.Parr, A Review of Radiologically Important Trace Elements in Human Bones. Appl. Radiat.Isot. Vol.49, No. 8, pp. 903-910, 1998.
8. Н.А. Шевченко, В.И. Итин, А.А. Тухфатуллин, М.Л. Меликян, М.З. Миргазизов Взаимодействия гидроксипатита с никелидом титана и титаном. Письмо в ЖТ, 1998, том 24, №24. стр. 41-44.
9. С.М. Lopatin, T.L. Alford, V.B. Pizziconi, M. Kuan, T. Laursen. Ion – beam densification of hydroxyapatite thin films. Nuclear Instruments and Methods In Physics Research B 145 (1998) 522 – 531.

Рукопись поступила в издательский отдел
28 апреля 1999 года.