



SIMULATION DER PH-GEPUFFERTEN BIODEGRADATION

Aufgabenstellung

Biodegradierbare Polymere spielen in der Medizin für beispielsweise Implantate, Nahtmaterial oder Stützstrukturen eine wichtige Rolle, da durch ihren Einsatz unter anderem Zweitoperationen zur Entfernung der Fremdkörper aus dem Körper vermieden werden. Bei der Verwendung von reinen Polymeren führt deren Zersetzung zu einem starken Abfall des pH-Werts in der Umgebung des Polymers, was Schwierigkeiten für eine komplikationsfreie Heilung bedeutet und durch den Zusatz von chemischen pH-Puffern vermieden werden soll. Modellierung und Simulation der ablaufenden Prozesse ist ein vielversprechendes Werkzeug, um die große Anzahl an notwendigen Experimenten zu reduzieren und somit Tierversuche zu minimieren.

Vorgehensweise

Die Zersetzung der Polymere wird durch ein System von Ratengleichungen beschrieben, in dem für jede Molekülgröße, welche die Polymere bei ihrer Zersetzung durchlaufen, die zeitliche Entwicklung ihrer Konzentration angegeben wird. Im Verlauf der Degradation steigt die Konzentration der Moleküle mit geringer Größe, die eine größere Beweglichkeit haben und in die Umgebung diffundieren. Durch Abspalten von positiv geladenem Wasserstoff bewirken diese kurzkettigen Moleküle ein Abfallen des pH-Niveaus. Das Binden des positiv geladenen Wasserstoffs in den pH-Puffer-Molekülen erfolgt auf einer kleinen Zeitskala. Daher wird zu jedem Zeitpunkt der Degradation der Gleichgewichtszustand der Pufferreaktion berechnet.

Ergebnis

Das Ergebnis gibt den pH-Wert als räumlich zweidimensional verteilte Größe für eine Polymerfaser mit pH-Puffer-Anteil und ihre Umgebung in Abhängigkeit der Zeit an. Das Simulationstool steht zur Verfügung, um den Einfluss von Konzentration und Verteilung des pH-Puffers in der Faser auf den pH-Wert in der Umgebung der Faser zu untersuchen.

Anwendungsfelder

In dem vom Exploratory Research Space der RWTH Aachen University geförderten Projekt (pH)aser werden pH-neutral degradierbare Stützstrukturen für kardiovaskuläre Gefäße (Stents) untersucht. Weitere Anwendungsgebiete sind die Optimierung von Implantaten, Nahtmaterial oder Stützstrukturen bei Tissue Engineering Verfahren.

Ansprechpartner

Dipl.-Phys. Lisa Bürgermeister
 Telefon +49 241 8906-610
 lisa.buergermeister@ilt.fraunhofer.de

Prof. Wolfgang Schulz
 Telefon +49 241 8906-204
 wolfgang.schulz@ilt.fraunhofer.de

- 3 Verteilung des pH-Werts in der Faser und ihrer Umgebung nach 60 Tagen Degradation.
- 4 PH-Wert in der Umgebung der Faser im Zeitverlauf.