

Physikochemische Untersuchung des Quellverhaltens von enzymbasierten Hydrogelen für bessere Systemmodelle

Motivation:

Funktionalisierte und enzymbasierte Hydrogele können in piezoresistiven Sensoren zum Nachweis zahlreicher anorganischer und organischer Analyten verwendet werden. Die Synthese des Hydrogels, die freie Quellung und die Quellung des eingeschlossenen Hydrogels im piezoresistiven Sensor sind Prozesse, die bezüglich spezifischer Parameter analysiert und optimiert werden müssen, um das Ansprechverhalten des Sensors zu optimieren. Wesentliche Parameter sind dabei die Maschenweite, die für das Quellverhalten und die Diffusion des Analyten entscheidend ist, die Netzwerkbesetzung durch Enzyme, die Enzymkinetik und der Quelldruck des Hydrogels. Durch eine geeignete Verknüpfung experimenteller physikochemischer Arbeiten mit den für die Modellierung der Hydrogele und die Simulation des Quellprozesses benötigten Parametern kann eine Verbindungsstelle der Wissenschaftsgebiete Chemie und Ingenieurwissenschaften geschaffen werden. Zudem ergibt sich aus den Ergebnissen der Arbeiten die Möglichkeit, in Zukunft die Anzahl der benötigten Experimente bei der Entwicklung neuer Hydrogele deutlich zu reduzieren.

Stand der Forschung und eigene Vorarbeiten:

Es gibt zahlreiche Untersuchungen zu enzymbasierten Hydrogelen und hydrogelbasierten Sensoren, deren Syntheseparameter und Fertigungstechniken willkürlich gewählt wurden. Um ein optimales Ansprechverhalten des Sensors zu erreichen, sind deshalb umfangreiche Parameterstudien erforderlich, die aber lediglich eine empirische Optimierung des spezifischen Sensors zur Folge haben und kaum allgemeingültige Aussagen zulassen. Letztere werden jedoch für die Modellierung und Simulation von Hydrogelen und hydrogelbasierten Sensoren benötigt. In bisherigen Arbeiten des Graduiertenkollegs wurden mit Glucoseoxidase und Urease funktionalisierte Hydrogele hergestellt und in piezoresistiven Sensoren untersucht.

Wissenschaftliche Fragestellung und Projektziele:

Die Untersuchung des Quellverhaltens von Hydrogelen soll in Abhängigkeit von rechnerisch und experimentell plausibel vorgegebenen Syntheseparametern erfolgen. Dazu werden zunächst Hydrogele mit vorgegebener Maschenweite und optimaler Enzymkonzentration (aus Michaelis-Menten-Theorie, Extinktionsmessungen) synthetisiert. Die anschließende Untersuchung der Diffusivität der Hydrogele unter Anwendung der Diffusionsgesetze sowie freie Quellmessungen lassen Rückschlüsse auf den Diffusionskoeffizienten und die optimale Maschenweite für den Transport des Analyten zu. Der Vergleich des freien Quellverhaltens mit dem Quellverhalten im piezoresistiven Sensor führt zur Beurteilung der Beeinflussung des Quellverhaltens durch den Sensoraufbau. Das Ziel der Arbeit stellt die Ermittlung vorgegebener Parameter für die Modellierung der Hydrogele und die Simulation des Quellverhaltens mittels physikochemischer Experimentalmethoden dar.

Literatur:

- D. Caccavo, S. Cascone, G. Lamberti, A.A. Barba, *Chem. Soc. Rev.* 47 (2018) 2357-2373
- U. Schmidt, C. Jorsch, M. Guenther, G. Gerlach, *J. Sens. Sens. Syst.* 5 (2016) 409-417
- J. Erfkamp, M. Guenther, G. Gerlach, *Sensors* 19 (2019) 971