



Idrogel anionico: comportamento al variare del pH

Francesco Barra¹

Abstract

Gli idrogel possono essere definiti come reticoli polimerici tridimensionali e idrofili capaci di assorbire ingenti quantità di acqua o fluidi biologici e modificare le proprie caratteristiche chimico-fisiche a seconda della quantità di acqua assorbita e della presenza di stimoli esterni. Gli idrogel polielettrolitici, grazie ai gruppi funzionali ionizzabili presenti lungo la catena presentano particolare interesse per quanto riguarda il variare del comportamento con il pH dell'ambiente in cui sono posti. Grazie alle loro caratteristiche uniche, sono oggetto di continua ricerca sia nel campo scientifico che in quello industriale. L'attenzione è particolarmente concentrata sulla modellazione e simulazione, che permettono di ottimizzare le loro prestazioni e prevederne il comportamento al variare delle condizioni esterne. Questo lavoro mira a studiare il comportamento dinamico e il conseguente stato stazionario del processo di *swelling* di un idrogel anionico commerciale di forma sferica (Orbeez™). In particolare si mira ad investigare un ampio range di pH e a confrontare i risultati sperimentali con quelli ottenuti da un modello matematico simulante la condizione di stato stazionario di tali sistemi. I risultati sperimentali, ottenuti al variare del tempo, hanno fornito la cinetica del processo. I risultati sperimentali allo stato stazionario (dopo 70 ore di *swelling*) hanno, invece, confermato l'andamento tipico degli idrogel anionici al variare del pH. Attraverso la parte di simulazione, invece, si è riusciti ad utilizzare il modello di letteratura per descrivere i dati sperimentali andando ad ottimizzare un unico parametro (il modulo elastico). L'ottimizzazione ha prodotto un buon confronto del modello con i dati sperimentali, andandone a confermare la validità.

¹ Relatori: Prof. Ing. Gaetano Lamberti, Dott. Ing. Diego Caccavo, Ing. Raffaella De Piano

Bibliografia

1. Caccavo, D., et al., *Swellable hydrogel-based systems for controlled drug delivery*. Smart drug delivery system, 2016: p. 237-303.
2. Caccavo, D., et al., *Modeling the mechanics and the transport phenomena in hydrogels*, in *Computer Aided Chemical Engineering*. 2018, Elsevier. p. 357-383.
3. Peppas, N.A. and A.R. Khare, *Preparation, structure and diffusional behavior of hydrogels in controlled release*. Advanced drug delivery reviews, 1993. **11**(1-2): p. 1-35.
4. Cascone, S. and G. Lamberti, *Hydrogel-based commercial products for biomedical applications: A review*. International journal of pharmaceutics, 2020. **573**: p. 118803.
5. Lamberti, G. and R. De Piano, *Modellazione del comportamento di idrogel polielettrolitici*. Chemical structure of Poly(methyl methacrylate). https://www.sigmaaldrich.com/IT/it/product/aldrich/445746?gclid=CjwKCAjww7KmBhAyEiwA5-PUShRiKOUlJjNr5QoXLvg6UvaVWFrFGAPak-8MXgFAfK9A06rO9CmpDRoCl8QQAvD_BwE&gclid=aw.ds.
6. https://www.sigmaaldrich.com/IT/it/product/aldrich/323667?gclid=CjwKCAjww7KmBhAyEiwA5-PUSu0ZQlGM2cXEgc-llyWuxlupY6BLEC8gv8RUpy5yjby1qiTJ2me0xoC69wQAvD_BwE&gclid=aw.ds.
7. *Chemical structure of poly(acrylic acid)*. <https://www.docenti.unina.it/webdocenti-be/allegati/materiale-didattico/642368>.
8. Masteikova, R., Z. Chalupova, and Z. Sklusalova, *Stimuli-sensitive hydrogels in controlled and sustained drug delivery*. Medicina, 2003. **39**(2): p. 19-24.
9. Vasheghani-Farahani, E., et al., *Swelling of ionic gels in electrolyte solutions*. Industrial & engineering chemistry research, 1990. **29**(4): p. 554-560.
10. Bayat, M.R. and M. Baghani, *A review on swelling theories of pH-sensitive hydrogels*. Journal of Intelligent Material Systems and Structures, 2021. **32**(18-19): p. 2349-2365.
11. Tadmor, R., et al., *Debye length and double-layer forces in polyelectrolyte solutions*. Macromolecules, 2002. **35**(6): p. 2380-2388.
12. Mantha, S., et al., *Smart hydrogels in tissue engineering and regenerative medicine*. Materials, 2019. **12**(20): p. 3323.
13. Caccavo, D., et al., *Modeling the drug release from hydrogel-based matrices*. Molecular Pharmaceutics, 2015. **12**(2): p. 474-483.
14. Chaturvedi, K., et al., *Polymeric hydrogels for oral insulin delivery*. Journal of controlled release, 2013. **165**(2): p. 129-138.
15. Qu, B. and Y. Luo, *Chitosan-based hydrogel beads: Preparations, modifications and applications in food and agriculture sectors—A review*. International journal of biological macromolecules, 2020. **152**: p. 437-448.
16. Caccavo, D., *An overview on the mathematical modeling of hydrogels' behavior for drug delivery systems*. International journal of pharmaceutics, 2019. **560**: p. 175-190.
17. Caccavo, D. and G. Lamberti, *PoroViscoElastic model to describe hydrogels' behavior*. Materials Science and Engineering: C, 2017. **76**: p. 102-113.
18. Caccavo, D., et al., *Hydrogels: experimental characterization and mathematical modelling of their mechanical and diffusive behaviour*. Chemical Society Reviews, 2018. **47**(7): p. 2357-2373.
19. De Piano, R., et al., *Hydrogel: Ph Role on Polyelectrolyte Behaviour in Aqueous Media*. Chemical Engineering Transactions, 2023. **100**: p. 397-402.
20. De, S.K., et al., *Equilibrium swelling and kinetics of pH-responsive hydrogels: Models, experiments, and simulations*. Journal of Microelectromechanical systems, 2002. **11**(5): p. 544-555.
21. Baker, J.P., H.W. Blanch, and J.M. Prausnitz, *Swelling properties of acrylamide-based ampholytic hydrogels: comparison of experiment with theory*. Polymer, 1995. **36**(5): p. 1061-1069.
22. Aktaş, D.K., G.A. Evingür, and Ö. Pekcan, *A fluorescence study on swelling of hydrogels (PAAm) at various cross-linker contents*. Advances in Polymer Technology: Journal of the Polymer Processing Institute, 2009. **28**(4): p. 215-223.
23. Orbeez Available from: https://orbeezone.com/en_us.
24. Orbeez instruction manual. Available from: https://blog.mrmeyer.com/wp-content/uploads/110121_2hi.jpg.
25. *Chemical structure of sodium polyacrylate*. https://www.sigmaaldrich.com/IT/it/search/sodium-polyacrylate?focus=products&page=1&perpage=30&sort=relevance&term=sodium%20polyacrylate&type=product_name.
26. pH meter information. Available from: <https://hanna.it/informazioni-di-base-sul-ph>.
27. pH meter. Available from: <https://www.sinergica-soluzioni.it/piaccametro-da-laboratorio-ph-60-violab.html>.

29. Cozzi, R., P. Protti, and T. Ruaro, *Elementi di analisi chimica strumentale*. 1998: Zanichelli.
30. *Conductivity meter*. Available from: <https://ita.labbox.com/producto/conduittimetro-da-banco-modello-cond51/>.
31. Safronov, A.P., et al., *Flory-Huggins parameters for weakly crosslinked hydrogels of poly (acrylic acid) and poly (methacrylic acid) with various degrees of ionization*. *Polymer Science Series A*, 2015. **57**: p. 33-42.
32. Eichenbaum, G.M., et al., *pH and ion-triggered volume response of anionic hydrogel microspheres*. *Macromolecules*, 1998. **31**(15): p. 5084-5093.
33. Holzapfel, G.A., *Nonlinear solid mechanics: a continuum approach for engineering science*. 2002, Kluwer Academic Publishers Dordrecht.
34. Liu, Z., W. Toh, and T.Y. Ng, *Advances in mechanics of soft materials: A review of large deformation behavior of hydrogels*. *International Journal of Applied Mechanics*, 2015. **7**(05): p. 1530001.