

Säureangriff auf die Zähne

Peter Bützer

„Eine erfolgreiche Reduktion ist vielleicht die erfolgreichste Form aller wissenschaftlichen Erklärungen, die man sich vorstellen kann.“¹
Karl R. Popper, (1902-1994) britischer Erkenntnisphilosoph



Abbildung 1: Links: Kante eines Schneidezahns, rechts: Säureangriff (Karies) (50 x).

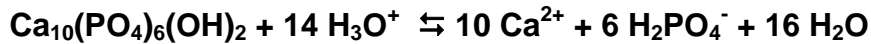
Inhalt

1	Einleitung/Theorie	2
2	Datenbasis	2
2.1	Aufgabenstellung.....	2
2.2	Durchführung.....	3
2.3	Beobachtungen/Messungen.....	3
2.4	Reaktionsgleichungen/Berechnungen.....	3
2.5	Folgerungen	4
3	Simulation.....	4
3.1	Simulationsdiagramm.....	4
3.2	Zeitdiagramm	5
3.3	Dokumentation (Gleichungen, Parameter)	5
3.4	Vergleich der Messwerte mit der Simulation	6
4	Interpretation	7
5	Beispiel: pH-Wert des Speichels	7

¹ Popper Karl R., Alles Leben ist Problemlösen, Piper 1995, 48

1 Einleitung/Theorie

Bakteriell-chemische Entkalkungs- und Auflösungsprozesse führen zum Verlust von Zahnhartsubstanzen. Diesen Prozess nennt man Karies. Die Oberfläche des Zahnes, ist stetig äusseren Einflüssen ausgesetzt. Säuren im Mundraum bewirken eine Entmineralisierung. Ein starkes Anwachsen bakterieller Beläge auf den Zähnen (Plaque) führt zu einer Zunahme der Konzentration von sauren Stoffwechselprodukten (H_3O^+) der Bakterien, welche zu einer Entkalkung der Zahnschicht führen. Die Mobilisierung von Hydroxylapatit ($\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$) durch Oxonium läuft nach folgender Reaktionsgleichung ab:



Hoher Konsum von Zuckern wirkt über den Abbau von Glucose zu Milchsäure oder Brenztraubensäure kariogen:



Die Bildung von Säure im Mund kann über die Messung des pH-Wertes verfolgt werden, entweder auf der Plaque (Oberflächenmessung) oder einfacher im Speichel.

Chemische Reaktion nach Einnahme von Zucker im Mund:

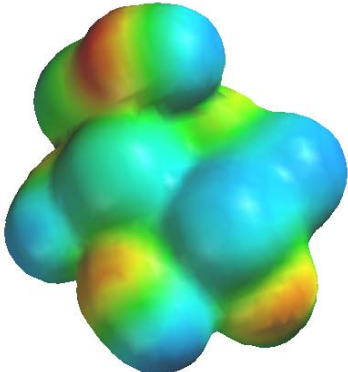
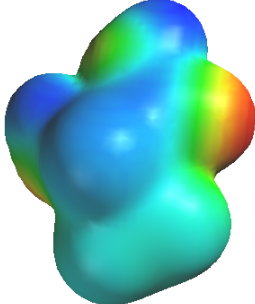
$\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6$ Glucose „das Futter der Bakterien“	\rightarrow Anaerobe, bakterielle Reaktion	$2 \text{C}_3\text{H}_6\text{O}_3$ Milchsäure
		

Abbildung 2: Vereinfachte Reaktionsgleichung und Formeln der Säurebildung.

Die gebildete Milchsäure verschwindet wieder aus dem Mund durch die Neuproduktion und das Verschlucken des Speichels.

2 Datenbasis

2.1 Aufgabenstellung

Die Bildung von Säure im Mund bei Einnahme von Glucose kann gemessen werden oder es können bekannte, gemessene Daten verwendet werden.

2.2 Durchführung

Wenn die pH-Werte gemessen werden, sollte man sich im Klaren sein, dass sehr grosse individuelle Unterschiede vorhanden sind.

2.3 Beobachtungen/Messungen

Die Messungen des Speichels sind ein Mass für die Säureproduktion der Bakterien, nach Einnahme von Zucker. Noch genauer sind die Messungen des pH-Wertes von Plaque auf der Oberfläche von Zähnen, wie sie nachfolgend dargestellt ist²:

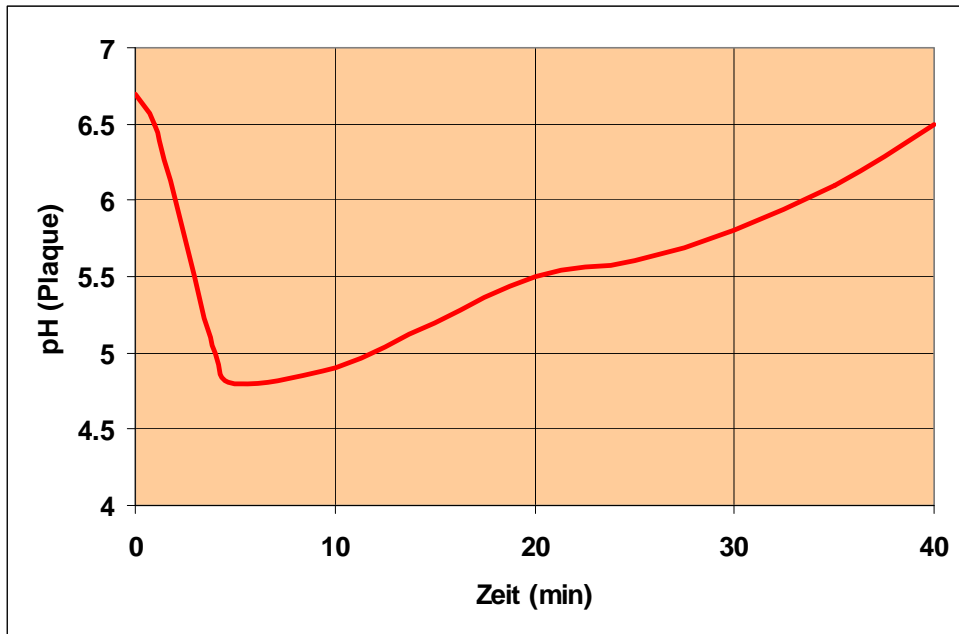


Abbildung 3: Messung des pH-Werts auf der Zahnoberfläche nach Einnahme einer Zuckerlösung.

Leider fehlen für die Simulation viele wichtige Daten, so z.B. die Bakterienkonzentration, die Wachstums- und Stoffwechselgeschwindigkeit der Bakterien, die Glucosekonzentration und das Auswaschen mit dem Speichel. Viele dieser Parameter sind individuell sehr verschieden, so die Dicke der Plaque-Schicht, die Konzentration der Besiedelung, die Zusammensetzung des Speichels und die Produktion so wie Ausscheidung mit dem Speichel.

2.4 Reaktionsgleichungen/Berechnungen

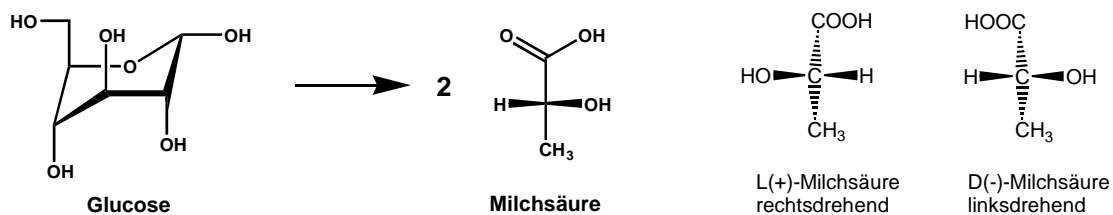


Abbildung 4: Formeln von Glucose und Milchsäure.

² Helling B, Plaque pH nach Zuckeraufnahme, GABA International AG, pers. Mitteilung, 27.03.03

Die Bakterien, vorwiegend Streptokokken, bilden vorwiegend L(+)-Milchsäure, (S)-Milchsäure nach der CIP-Nomenklatur) ($pK_s = 3.86$).

Berechnung des pH-Wertes aus der Milchsäurekonzentration:

$$[H_3O^+]^2 + [H_3O^+] \cdot K_s - c \cdot K_s = 0; \text{Bestimmungsgleichung für } [H_3O^+]$$

Korrektur, falls sich der pH-Wert nahe bei 7 befindet: $(c+10^{-7})$

$$[H_3O^+]^2 + [H_3O^+] \cdot K_s - (c+10^{-7}) \cdot K_s = 0; K_s = 10^{-pK_s}$$

$$[H_3O^+] = \frac{-10^{-pK_s} + \sqrt{4 \cdot (c+10^{-7}) \cdot 10^{-pK_s}}}{2}$$

$$pH = -\log[H_3O^+] = -\ln[H_3O^+]/\ln(10)$$

2.5 Folgerungen

Die Messung der pH-Werte ist eine gängige Methode, deren Interpretation aber sehr anspruchsvoll. Logarithmische Skalen sind intuitiv kaum erfassbar, eine Simulation kann für diese Fälle eine Alternative sein.

3 Simulation

3.1 Simulationsdiagramm³ (Simulations-Typ 4⁴)

Die Simulation besteht aus 3 Teilen:

1. Aktivität der Bakterien
2. Bildung von Säure (H_3O^+ , Oxonium)
3. Auswaschen der Säure

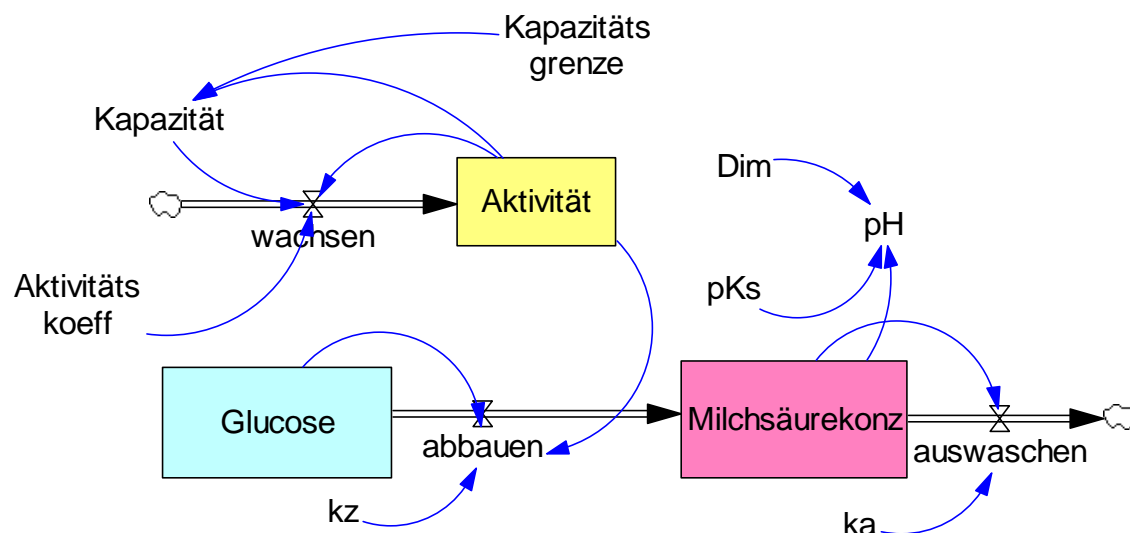


Abbildung 5: Simulationsdiagramm der mikrobiologischen Milchsäurebildung aus Glucose.

³ Simulations-Software: Vensim® PLE, Ventana Systems, Inc., <http://www.vensim.com/>

⁴ Bützer Peter, Roth Markus, Die Zeit im Griff, Systemdynamik in Chemie und Biochemie, verlag pestalozzianum, Zürich 2006, 57ff

3.2 Zeitdiagramm

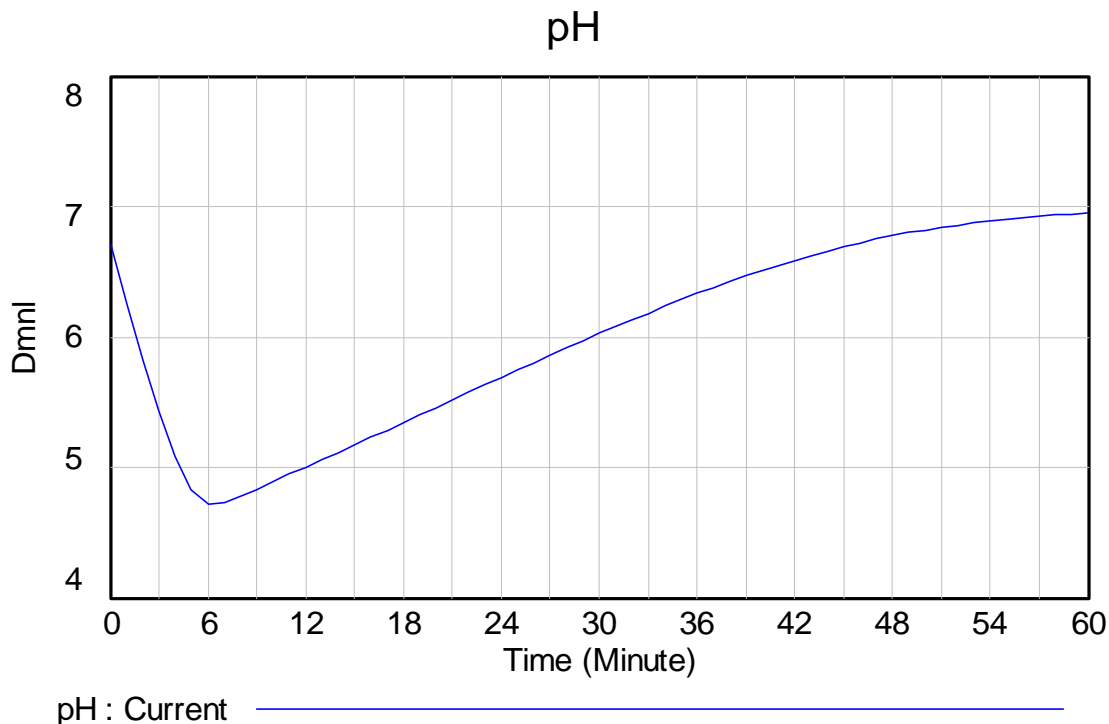


Abbildung 6: Zeitdiagramm der pH-Wert-Änderung, verursacht durch Milchsäurebildung.

3.3 Dokumentation (Gleichungen, Parameter)

- (01) $\text{abbauen} = k_z \cdot \text{Aktivität}^2 \cdot \text{Glucose}$
 Units: mol/l/Minute [0,?]
 Abbau durch Bakterien
- (02) $\text{Aktivität} = \text{INTEG}(\text{wachsen}, 2)$
 Units: Dmnl [0,?]
 Startwert: Auch im normalen Speichel hat es aktive Bakterien
- (03) $\text{Aktivitätskoeff} = 0.001$
 Units: 1/Minute [0,0.01]
 Annahme
- (04) $\text{auswaschen} = k_a \cdot \text{Milchsäurekonz}$
 Units: mol/(Minute*l) [0,?]
- (05) $\text{Dim} = 1$
 Units: l/mol
- (06) $\text{FINAL TIME} = 60$
 Units: Minute
 The final time for the simulation.
- (07) $\text{Glucose} = \text{INTEG}(-\text{abbauen}, 3e-005)$
 Units: mol/l [0,0.001]
- (08) $\text{INITIAL TIME} = 0$
 Units: Minute
 The initial time for the simulation.
- (09) $k_a = 0.14$
 Units: 1/Minute [0,1]
- (10) $\text{Kapazität} = \text{Kapazitätsgrenze} \cdot \text{Aktivität}$
 Units: Dmnl

- (11) Kapazitätsgrenze= 1000
Units: Dmnl [0,1000,10]
Annahme
- (12) kz= 0.002
Units: 1/Minute [0,0.1]
- (13) Milchsäurekonz= INTEG (abbauen-auswaschen, 1e-007)
Units: mol/l
- (14) $\text{pH} = -\text{LN}((-10^{(-\text{pKs})} + \text{SQRT}((10^{(-\text{pKs})})^2 + 4 * (\text{Milchsäurekonz} * \text{Dim} + 1e-007) * 10^{(-\text{pKs}))}) / 2) / \text{LN}(10)$
Units: Dmnl [0,?]
pH-Wert im Speichel
- (15) pKs= 3.86
Units: Dmnl [-3,10]
Säurekonstante
- (16) SAVEPER = 1
Units: Minute [0,?]
The frequency with which output is stored.
- (17) TIME STEP = 0.01
Units: Minute [0,?]
The time step for the simulation.
- (18) wachsen= Aktivitätskoeff*Aktivität*Kapazität
Units: Dmnl/Minute [0,?]
Bakterienvermehrung und Bakterienaktivität

3.4 Vergleich der Messwerte mit der Simulation

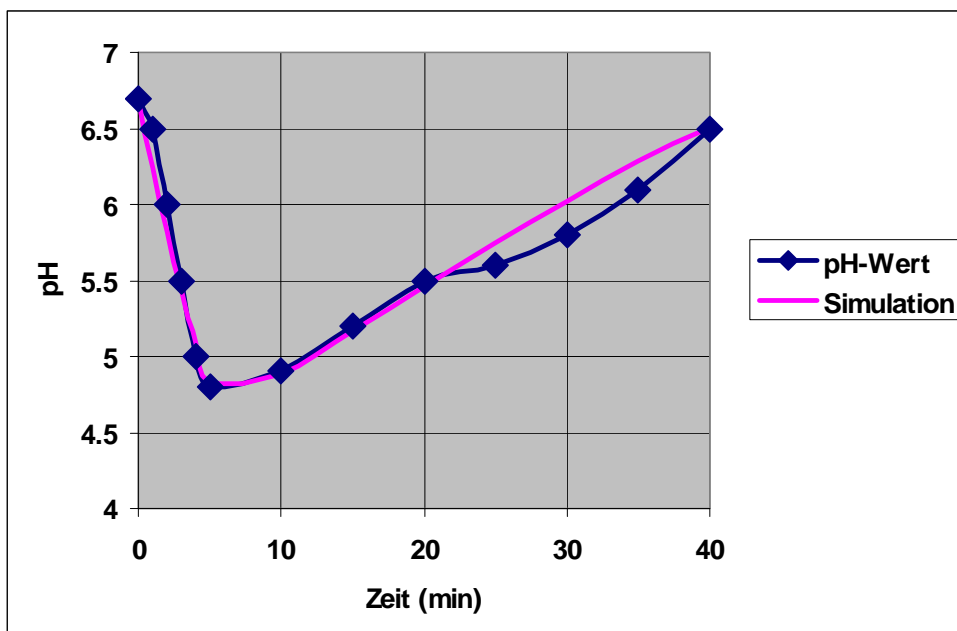


Abbildung 7: Vergleich von Messungen und Simulation des pH-Verlaufs auf der Zahnoberfläche nach Einnahme von Glucoselösung.

4 Interpretation

Der Kurvenverlauf stimmt in der Form recht gut mit den gemessenen Daten überein. Es scheint, dass das Modell: logistische Funktion der Bakterienaktivität, Bildung von Milchsäure aus Glucose und die Elimination mit dem Speichel eine gute mögliche Erklärung sein könnte.

Es ist interessant in der Simulation zu verfolgen, welchen Einfluss die verschiedenen Parameter auf den pH-Wert haben.

5 Beispiel: pH-Wert des Speichels

Statt den pH-Wert auf der Zahnoberfläche zu messen, kann der pH-Wert des eigenen Speichels über die Zeit verfolgt werden – das sind einfache Messungen⁵.

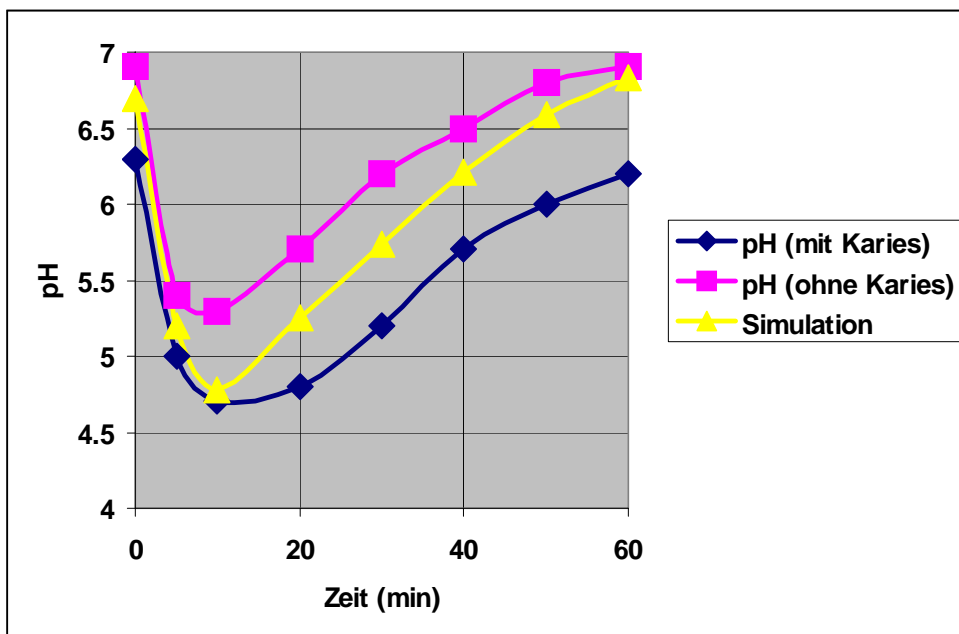


Abbildung 8: Typische, durchschnittliche pH-Verlaufskurven nach einem Essen.

Die beiden Kurven könnten durch Variation der Parameter noch genauer angeglichen werden. (Hier $k_a=0.1$)

⁵ Palmer E., Chew this over, Info Chem, No.51, May 1998, p. 3