L ligandos

solvatación ε_s

pegado ε_b

$$Z = \sum_{E} \Omega(E)\, e^{-\beta E} = \Omega_1\, e^{-\beta(\varepsilon_b + (L-1)\varepsilon_s)}$$

$$+ \Omega_2\, e^{-\beta(L\varepsilon_s)}$$

$$\Omega_1 = \binom{\Omega}{L-1} = \frac{\Omega!}{(L-1)!\,(\Omega-L+1)!} \qquad \Omega_2 = \binom{\Omega}{L} = \frac{\Omega!}{L!\,(\Omega-L)!}$$

$$\frac{\Omega!}{(\Omega-L)!} = \frac{\Omega(\Omega-1)(\Omega-2)\cdots \overset{(\Omega-L+1)}{\uparrow}\cancel{(\Omega-L)}\cancel{(\Omega-(L+1))}\cdots}{\cancel{(\Omega-L)}\cancel{(\Omega-L-1)}\cancel{(\Omega-L-2)}\cdots}$$

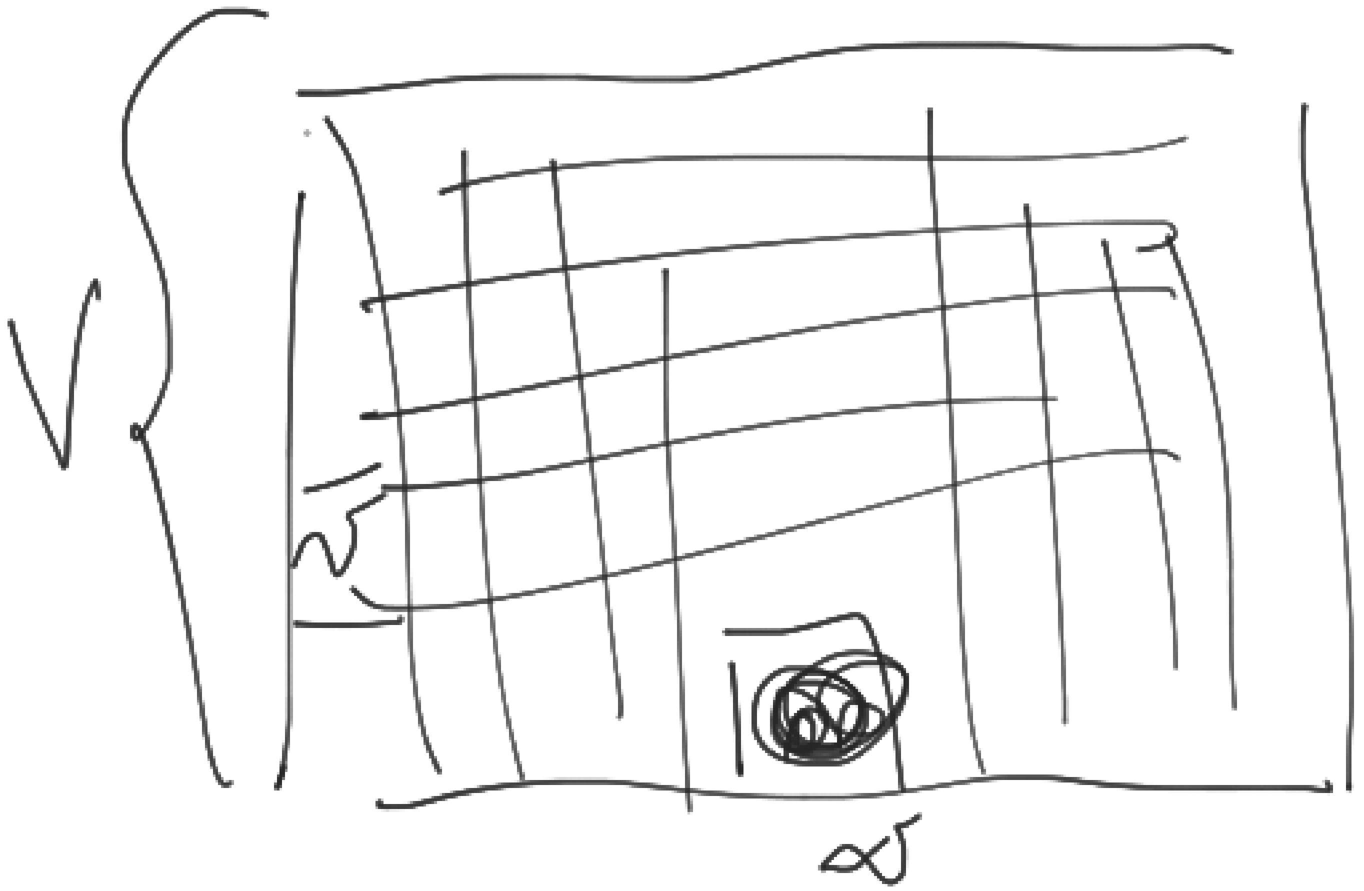
$$= \underbrace{(\Omega-0)\ \cdots\cdots\ (\Omega-(L-1))}_{L \text{ términos}}$$

$$\cong \underbrace{\Omega\ \cdots\cdots\ \Omega}_{L \text{ vem}} = \Omega^L$$

Tengo un sitio de la madera o receptor que puede estar en 2 estados
- libre
- ocupado

$P(t)$ = prob de que esté libre al tiempo t

Durante Δt, si está libre puede pasar a estar ocupado con una prob $\alpha \Delta t$ que depende del # de la madera



Tengo $\frac{V}{v}$ lugares donde meter moléculas de ligando. Si tengo L moléculas de ligando y $L \ll \frac{V}{v}$ → en c/volumen v hay 0 o 1 ligando

Prob de tener 1 ligando en el volumen v donde esté el receptor

$$\frac{v}{V} L$$

Paso del estado de receptor libre al ocupado con una prob que es:

$$\frac{v}{V} L \cdot \alpha \Delta t$$

↳ prob de que se pegue el ligando dado que está en v

En 1 Δt $\quad$ libre $\xrightarrow{\alpha \frac{v}{V} L \Delta t}$ ocupado

En 1 Δt $\quad$ libre $\xleftarrow{\alpha' \Delta t}$ ocupado

$P(t+\Delta t) = P(t) \cdot$ prob de no soltar la molécula

$+ (1 - P(t)) \cdot$ prob de pegar la molécula

$$= P(t) \cdot (1 - \alpha' \Delta t) + (1 - P(t)) \alpha \frac{v}{V} L \Delta t$$

$$\frac{P(t+\Delta t) - P(t)}{\Delta t} = -\alpha' P(t) + \alpha \frac{v}{V} L (1 - P(t))$$

$$\frac{dP}{dt} = -\underbrace{\alpha'}_{=k'} P + \overbrace{\frac{v}{V} L}^{=c} \alpha (1 - P)$$

$$v\alpha = k$$

$$\text{lidn} \underset{k'}{\overset{kc}{\rightleftharpoons}} \text{owpad}$$

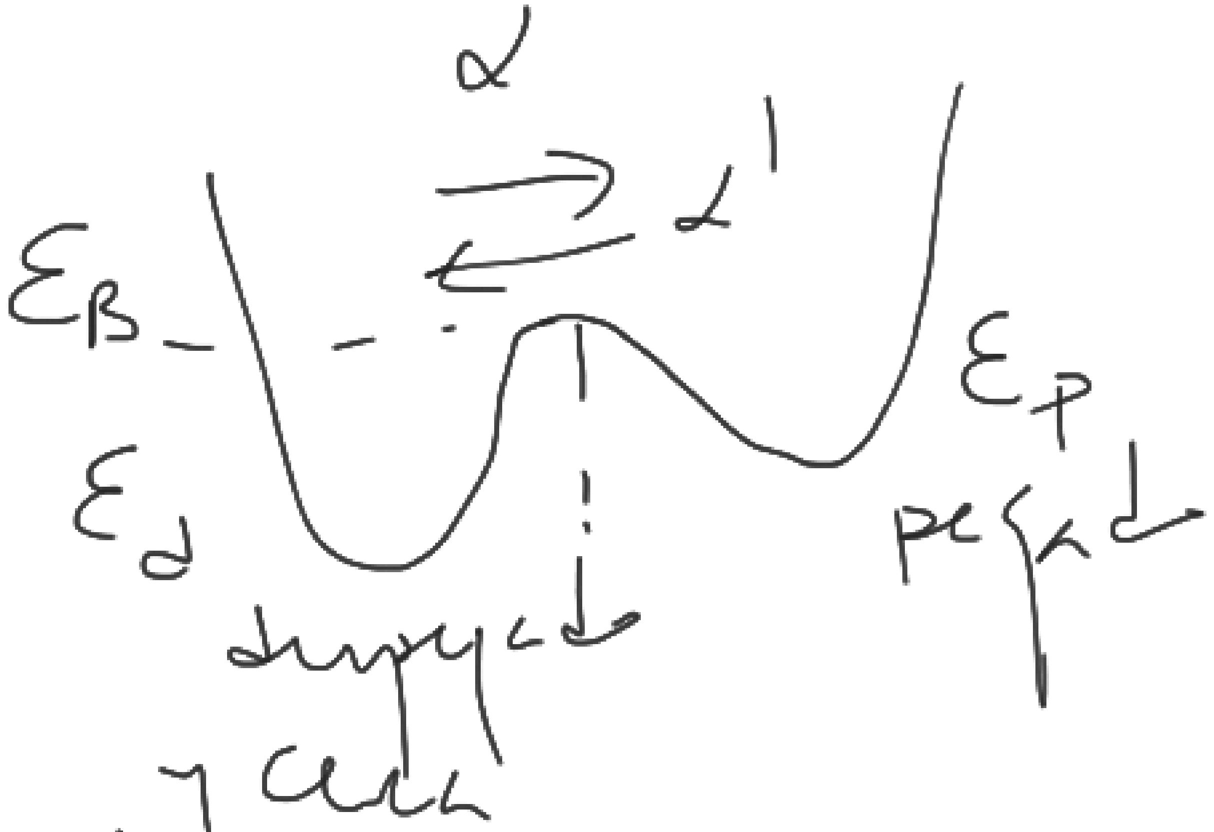
Equilibrium $\frac{dP}{dt} = 0 \Rightarrow \frac{vL}{V}\alpha = \left(\alpha' + \frac{vL}{V}\alpha\right) P$

$$P = \frac{vL\alpha / V}{\alpha' + \frac{vL\alpha}{V}} \qquad P_{bound} = \frac{L^{v_{box}} / \Omega v_{box} e^{-\beta\Delta\varepsilon}}{1 + \frac{L v_{box}}{\Omega v_{box}} e^{-\beta\Delta\varepsilon}}$$

$$\Omega v_{box} = V$$

$$P = \frac{\nu \alpha c/\alpha'}{\frac{\nu \alpha c}{\alpha'} + \frac{\alpha}{\alpha'}} \; ; \quad P = \frac{V_{box} c e^{-\beta \Delta \varepsilon_c}}{V_{box} c e^{-\beta \Delta \varepsilon_c} + 1}$$

$$\frac{\alpha}{\alpha'} = e^{-\beta \Delta \varepsilon_c}$$



$$\alpha = \alpha_0 e^{-\beta(\varepsilon_B - \varepsilon_d)} \; ; \quad \alpha' = \alpha'_0 e^{-\beta(\varepsilon_B - \varepsilon_P)}$$

$$\frac{\alpha}{\alpha'} = \frac{\alpha_0}{\alpha'_0} e^{-\beta(\varepsilon_P - \varepsilon_d)} \; ; \quad V_{box} = \nu \frac{\alpha_0}{\alpha'_0}$$

las P moléculas pegadas a sitios no específicos $\rightarrow$ $\mathcal{E} = P\,\mathcal{E}_{pd}^{NS}$

(P-1) moléculas pegadas a no específicos y 1 a 1 específico

$$\mathcal{E} = (P-1)\,\mathcal{E}_{pd}^{NS} + \mathcal{E}_{pd}^{S}$$

$$Z = \underbrace{\#\text{conf con } P \text{ en sitios no específicos}}_{\binom{N_{NS}}{P}}\; e^{-\beta P \mathcal{E}_{pd}^{NS}} + \underbrace{\#\text{conf con } (P-1) \text{ en sitios no específicos}}_{\binom{N_{NS}}{P-1}}\; e^{-\beta\left[(P-1)\mathcal{E}_{pd}^{NS} + \mathcal{E}_{pd}^{S}\right]}$$

$$\underbrace{\binom{N_{NS}}{p} e^{-\beta p \varepsilon_{pd}^{NS}}}_{Z_{NS}(p,\, N_{NS})} + \underbrace{\binom{N_{NS}}{p-1} e^{-\beta\left[(p-1)\varepsilon_{pd}^{NS} + \varepsilon_{pd}^{S}\right]}}_{\underbrace{\binom{N_{NS}}{p-1} e^{-\beta (p-1)\varepsilon_{pd}^{NS}}}_{Z_{NS}(p-1,\, N_{NS})} e^{-\beta \varepsilon_{pd}^{S}}}$$