Cinétique de liaison ligand récepteur

Dans le cas le plus simple : $A + B \leftrightarrow C$, l'équation différentielle générale du système peut se ramener à :

$$dC(t)/dt = ka\ (Ao - C(t))\ (Bo - C(t)) - kd\ C(t) \qquad (1)$$

Pratiquement toujours, cette équation (1) n'est résolue que dans l'hypothèse C(t) reste petit devant Ao (la concentration du récepteur) parce que le taux d'occupation est faible. C'est toujours le cas lorsque B (le ligand de concentration Bo) est en concentration traceuse.
Dans ce cas, l'équation (1) devient linéaire :

$$dC(t)/dt = ka\ Ao\ (Bo - C(t)) - kd\ C(t)$$

$$dC(t)/dt = ka\ Ao\ Bo - (ka\ Ao + kd)\ C(t)$$

et la solution est simple (en supposant C(0) = O) :

$$C(t) = ka\ Ao\ Bo\ (1 - \exp(- (ka\ Ao + kd)\ t) / (ka\ Ao + kd)$$

Soit :

$$C(t) = Ao\ Bo\ (1 - \exp(- (ka\ Ao + kd)\ t) / (Ao + Kd) \qquad (2)$$

Pourtant l'hypothèse simplificatrice n'est pas nécessaire pour arriver à une solution analytique car l'équation différentielle est une équation à variables séparées :

$$dC(t) / (ka\ (Ao - C(t))\ (Bo - C(t)) - kd\ C(t)) = dt$$

Le dénominateur peut se factoriser à l'aide des solutions de l'équation du second degré en C(t) :

$$ka\ C(t)^2 - (ka\ (Ao + Bo) + kd)\ C(t) + ka\ Ao\ Bo = 0$$

En posant D (discriminant) = $(ka\ (Ao + Bo) + kd)^2 - 4\ ka^2\ Ao\ Bo$, on a :

$$K_{1,2} = ((ka\ (Ao + Bo) + kd) \pm \text{racine}(D)) / 2\ ka$$

Et (1) s'écrit :

$$dC(t) / ka\ (C(t) - K_1)\ (C(t) - K_2) = dt$$

ou encore :

$$dC(t)\ (1/(C(t) - K_1) - 1/(C(t) - K_2)) = ka\ (K_1 - K_2)\ dt$$

qui s'intègre de façon triviale en :

$$Ln((C(t) - K_1)/(C(t) - K_2)) = ka\ (K_1 - K_2)\ t + u$$

On remarque que $ka\ (K_1 - K_2)$ = racine(D) et on écrit (pour fixer les idées) que C(0) = 0, d'où $u = Ln\ (K_1/K_2)$ et finalement la solution est :

$$C(t) = K_1\ K_2\ (1 - \exp(t\ \text{racine}(D)) / (K_2 - K_1 \exp(t\ \text{racine}\ (D))$$

ou encore (pour faire apparaître l'exponentielle décroissante :

$$C(t) = K_1\ K_2\ (1 - \exp(- t\ \text{racine}(D)) / (K_1 - K_2 \exp(- t\ \text{racine}\ (D)) \qquad (3)$$

On retrouve qu'à l'équilibre ($t \rightarrow \infty$) $C(\infty) = K_2$ (la solution K_1 ne convenant évidemment pas) et si l'on fait l'hypothèse qu'on est loin de la saturation (K_2 petit) on retrouve la solution simplifiée (2).

Curieusement, la solution générale (3) est très rarement utilisée.