

20 Implementation der Bindungsmodelle

Für alle 5 Bindungsmodelle müssen in Presto-Kinetics ein (Standard-)Reaktor sowie Substanzen, Koeffizienten und Bibliotheksgrößen angelegt werden. Diese werden wir im folgenden auführen:

Bindungsmodell 1 Substanz C_gesamt, wird über eine Rezeptur vorgelegt, Masse 1 kg

Koeffizient $f_u = 0.45$

Bibliotheksgröße Cu, Ausgabevariable: $\text{result1} = \text{getkp}("f_u") * (\text{getco}("C_gesamt"))$

Bindungsmodell 2 Substanz C_gesamt, wird über eine Rezeptur vorgelegt, Masse 1 kg, Massenanteil 70%

Substanz Protein, wird über eine Rezeptur vorgelegt, Masse 1 kg, Massenanteil 30%

Substanz CP, ohne Vorlage

Koeffizient $k_{on} = 0.78$

Koeffizient $k_{off} = 1$

Bibliotheksgröße Kd, Prozedur: $\text{result1} = \text{getkp}("k_{off}) / \text{getkp}("k_{on})$

Bibliotheksgröße Cu, Ausgabevariable:

$\text{exp1} = \text{getco}("Protein") + \text{eval}("Kd", 0, 0) - \text{getco}("C_gesamt")$

$\text{exp1} = \text{exp1}^2 + 4 * \text{eval}("Kd", 0, 0) * \text{getco}("C_gesamt")$

$\text{exp1} = \text{sqrt}(\text{exp1})$

$\text{exp2} = \text{getco}("Protein") + \text{eval}("Kd", 0, 0) - \text{getco}("C_gesamt")$

$\text{expression} = \text{exp1} - \text{exp2}$

$\text{result1} = 0.5 * \text{expression}$

Bindungsmodell 3 Substanz C_ungebunden, wird über eine Rezeptur vorgelegt, Masse 1 kg, Massenanteil 70%

Substanz Protein, wird über eine Rezeptur vorgelegt, Masse 1 kg, Massenanteil 30%

Substanz CP

Koeffizient $k_2 = 0.78$

Koeffizient $k_3 = 1$

Reaktionsmodul Allg. Kinetik: $C_ungebunden \rightleftharpoons CP, k_2, k_3$

Bibliotheksgröße Cu, Ausgabevariable: result1 = getco("C_ungebunden")

Bindungsmodell 4 Substanz C_ungebunden, wird über eine Rezeptur vorgelegt, Masse 1 kg, Massenanteil 70%

Substanz Protein, wird über eine Rezeptur vorgelegt, Masse 1 kg, Massenanteil 30%

Substanz CP

Koeffizient $k_2 = 0.78$

Koeffizient $k_3 = 1$

Reaktionsmodul Allg. Kinetik: $C_ungebunden + Protein \rightleftharpoons CP, k_2, k_3$

Bibliotheksgröße Cu, Ausgabevariable: result1 = getco("C_ungebunden")

Bindungsmodell 5 Substanz C_ungebunden, wird über eine Rezeptur vorgelegt, Masse 1 kg, Massenanteil 70%

Substanz Protein, wird über eine Rezeptur vorgelegt, Masse 1 kg, Massenanteil 30%

Substanz CP

Substanz C_Abfallprodukt

Koeffizient $k_2 = 0.78$

Koeffizient $k_3 = 1$

Koeffizient $k_{Abfall} = 0.2$

Reaktionsmodul Allg. Kinetik: $C_ungebunden + Protein \rightleftharpoons CP, k_2, k_3$

Reaktionsmodul Allg. Kinetik: $C_ungebunden \rightleftharpoons C_Abfallprodukt, k_2, k_3$

Bibliotheksgröße Cu, Ausgabevariable: result1 = getco("C_ungebunden")

Messdaten Die gemeinsamen Messdaten liegen in einer Messdatendatei vor:

STRUKTUR

times Func:Cu

ENDE

abw 0.01

1e-2 4.5

2e-2	4.4
abw	0.02
6e-2	4.23
1e-1	4
abw	0.2
0.5	4.2
0.8	4.4
abw	0.05
1	4.5
5	4.58