

# Übung 9

Ausgabe 30.04.2018

Abgabe 07.05.2018

## 1 Die biologische Reaktionsdiffusionsgleichung

Die Diffusion von Molekülen innerhalb von und aus Zellen und Geweben ist ein wichtiges Merkmal des Lebens und eigentlich auch eine Voraussetzung dafür. Bisher haben wir die Diffusion von Molekülen an Gradienten behandelt, ohne den Ursprung dieser Gradienten zu berücksichtigen. Stellen Sie sich jetzt eine Zelle vor, in der ein Molekül  $X$  mit einer Rate  $Q_p$  produziert wird. Molekül  $X$  kann durch die Membran zur Aussen-seite der Zelle diffundieren, wo  $X$  nicht produziert wird. Dies ist eine häufige Situation in der Biologie, aber die räumliche und zeitliche Entwicklung dieses Systems kann nicht beschrieben werden, ohne Berücksichtigung der Geschwindigkeit und Position der Produktion des Moleküls. In dieser Übung wollen wir einen Formalismus ableiten, in dem nicht nur der Massentransport einer Substanz berücksichtigt wird, sondern auch deren Produktionsrate und Abbaurates/Verbrauchsrate. Ein solcher Formalismus kann durch die Reaktionsdiffusionsgleichung beschrieben werden.

Ausgehend vom 1. Fickschen Gesetz (siehe Skript, Gl. II.2),

$$\Phi_x(x) = -D \frac{\partial c(x, t)}{\partial x}, \quad (1)$$

können wir die Zeitabhängigkeit der Konzentration durch Anwendung der Kontinuitätsgleichung ableiten

$$\frac{\partial c(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial \Phi_x(x, t)}{\partial x} + [Q_p(c, x, t) - Q_d(c, x, t)]. \quad (2)$$

Beachten Sie, die Erhaltung der Konzentration in Gl. (2) berücksichtigt nun die Raten, zu denen produziert und verbraucht wird. Die Letzteren können im Allgemeinen von der Konzentration, Ort und Zeit  $(c, x, t)$  abhängen.

Einsetzen der Gl.(1) in (2) ergibt (vergleichen mit Gl. II.4 im Skript) die Reaktionsdiffusionsgleichung

$$\frac{\partial c(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c(x, t)}{\partial x^2} + [Q_p(c, x, t) - Q_d(c, x, t)], \quad (3)$$

welche beschreibt, wie sich die Konzentration des Moleküls aufgrund seiner Diffusion und seiner Produktions-/Verbrauchsrate zeitlich entwickelt.

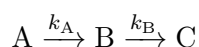
## Kalziumionen diffundieren in Zellen

Eine Reihe früherer experimenteller und theoretischer Studien wurde durchgeführt, um den Effekt der Pufferung der Kalziumkonzentration in lokalisierten Bereichen von Zellen zu untersuchen (siehe Wagner und Keizer, 1994). Die Konzentration von freien  $\text{Ca}^{+2}$  Ionen in Zellen wird durch Puffer gesteuert, die das  $\text{Ca}^{+2}$  binden. Einige dieser Puffermoleküle sind kleine Proteine, die diffundieren können, während andere relativ unbeweglich sind. Hier nehmen wir an, dass alle unbeweglich sind.

1. Schreiben Sie die Reaktionsgleichung für die Bindung von  $\text{Ca}^{+2}$  an einen Puffer.
2. Schreiben Sie die Reaktionsdiffusionsgleichung der entsprechenden Substanzen. (*Beachten Sie, dass in diesem Fall die Produktions-/Verbrauchs-rate für  $\text{Ca}^{+2}$  sowohl zeit- als auch raum-abhängig ist.*)
3. Leiten Sie die Differentialgleichung her, die die Gesamtkalzium- und Pufferkonzentrationen beschreibt. Hat die Zeitabhängigkeit der Puffer Sinn?
4. Was macht der immobile Puffer zur effektiven Diffusion von  $\text{Ca}^{+2}$  im Vergleich zu seiner normalen freien Diffusion?

## 2 Folgereaktion

Betrachten Sie folgendes sequenzielles Reaktionsschema:



A, B und C bezeichnen das Edukt, Intermediat und Produkt.  $k_A$  und  $k_B$  sind die Geschwindigkeitskonstanten für die monomolekularen Reaktionen von A zu B bzw. von B zu C. Am Anfang ist nur Edukt A vorhanden.

1. Stellen Sie die differentiellen Geschwindigkeitsgesetze für A, B und C auf.
2. Berechnen Sie die Zeitabhängigkeit der Konzentration von C mittels der Näherung des stationären Zustandes für Stoff B.
3. Was ist der geschwindigkeitsbestimmende Schritt für die Produktbildung, wenn  $k_A$  viel grösser als  $k_B$  ist? Skizzieren Sie den Verlauf der Konzentrationen  $[\text{A}]$ ,  $[\text{B}]$  und  $[\text{C}]$  mit der Zeit.
4. Was ist der geschwindigkeitsbestimmende Schritt für die Produktbildung, wenn  $k_A$  viel kleiner als  $k_B$  ist? Skizzieren Sie den Verlauf der Konzentrationen  $[\text{A}]$ ,  $[\text{B}]$  und  $[\text{C}]$  mit der Zeit.

### 3 Parallelreaktion

In saurer Lösung reagiert Benzylpenicillin zu drei unterschiedlichen Produkten  $P_1$ ,  $P_2$  und  $P_3$ . Die Geschwindigkeitskonstanten für diese Konkurrenzreaktionen sind gegeben als  $k_1 = 3.7 \cdot 10^{-3} \text{s}^{-1}$ ,  $k_2 = 5.3 \cdot 10^{-3} \text{s}^{-1}$  und  $k_3 = 8.1 \cdot 10^{-4} \text{s}^{-1}$ . Zum Zeitpunkt  $t = 0 \text{ s}$  ist die Konzentration von Benzylpenicillin  $2.35 \cdot 10^{-2} \text{ mol/l}$ . Es finden keine Rückreaktionen statt.

1. Wie hoch ist die Konzentration von Benzylpenicillin, wenn seit Beginn der Reaktion (i) 20 Minuten und (ii) 30 Sekunden vergangen sind?
2. Berechnen Sie die Konzentrationen von  $P_1$ ,  $P_2$  und  $P_3$  für  $t \rightarrow \infty$ .