# Cálculo de $h_{ext}$ para el dímero de Adair

Procederemos a determinar la expresión para $h_{ext}$ a partir de las constantes microscópicas, para un dímero de Adair simétrico.

Recordemos que la fracción de saturación en tales condiciones tiene la expresión:

$$Y = \frac{K_1'[L] + K_1'K_2'[L]^2}{1 + 2K_1'[L] + K_1'K_2'[L]^2}$$

También, recordemos que $h_{ext}$ es el valor extremo (máximo o mínimo) del número de Hill ($h$), que se define como la pendiente del gráfico de Hill:

$$h \equiv \frac{d\left(\ln\left(\frac{Y}{1-Y}\right)\right)}{d(\ln([L]))}$$

Dado que $h$ es una función de [L], encontraremos $h_{ext}$ para el valor de [L] donde $\frac{dh}{d[L]} = 0$.

La estrategia es la siguiente:

1. Obtener $h$([L]) como la pendiente del gráfico de Hill.
2. Hallar [L] que hace que $\frac{dh}{d[L]} = 0$
3. Calcular $h_{ext}$ evaluando la función obtenida en el punto 1 en el valor de [L] obtenido en el punto 2.

1- Es útil tener en cuenta que $\frac{dln(y)}{dln(x)} = \frac{dy}{dx}\frac{x}{y}$, esto se puede demostrar utilizando la regla de la cadena. Entonces:

$$h = \frac{d\left(\ln\left(\frac{Y}{1-Y}\right)\right)}{d(\ln([L]))} = \frac{d\left(\frac{Y}{1-Y}\right)}{d[L]}\frac{[L]}{\frac{Y}{1-Y}} = \frac{d\left(\frac{Y}{1-Y}\right)}{d[L]}\frac{[L](1-Y)}{Y}$$

Obtendremos ambos factores por separado y luego procederemos con el producto correspondiente.

Comenzaremos por determinar $\frac{Y}{1-Y}$, que aparece tanto en la derivada como en el segundo factor.

$$\frac{Y}{1-Y} = \frac{\frac{K_1'[L]+K_1'K_2'[L]^2}{1+2K_1'[L]+K_1'K_2'[L]^2}}{1 - \frac{K_1'[L]+K_1'K_2'[L]^2}{1+2K_1'[L]+K_1'K_2'[L]^2}} = \frac{\frac{K_1'[L]+K_1'K_2'[L]^2}{1+2K_1'[L]+K_1'K_2'[L]^2}}{\frac{1+2K_1'[L]+K_1'K_2'[L]^2-K_1'[L]-K_1'K_2'[L]^2}{1+2K_1'[L]+K_1'K_2'[L]^2}}$$

$$\frac{Y}{1-Y} = \frac{\frac{K_1'[L]+K_1'K_2'[L]^2}{1+2K_1'[L]+K_1'K_2'[L]^2}}{\frac{1+K_1'[L]}{1+2K_1'[L]+K_1'K_2'[L]^2}} = \frac{K_1'[L] + K_1'K_2'[L]^2}{1 + 2K_1'[L] + K_1'K_2'[L]^2}\frac{1 + 2K_1'[L] + K_1'K_2'[L]^2}{1 + K_1'[L]}$$

$$\frac{Y}{1-Y} = \frac{K_1'[L] + K_1'K_2'[L]^2}{1 + K_1'[L]}$$

Obtenido $\frac{Y}{1-Y}$ , procederemos a derivarle en función de [L]. Para ello debemos recordar cómo se deriva el cociente de funciones: $\left(\frac{f}{g}\right)' = \frac{f'g - f\,g'}{g^2}$

$$\frac{d\left(\frac{Y}{1-Y}\right)}{d[L]} = \frac{(K_1' + 2K_1'K_2'[L])(1 + K_1'[L]) - (K_1'[L] + K_1'K_2'[L]^2)K_1'}{(1 + K_1'[L])^2} =$$

$$\frac{d\left(\frac{Y}{1-Y}\right)}{d[L]} = \frac{K_1' + K_1'^2[L] + 2K_1'K_2'[L] + 2K_1'^2K_2'[L]^2 - K_1'^2[L] - K_1'^2K_2'[L]^2}{(1 + K_1'[L])^2}$$

$$\frac{d\left(\frac{Y}{1-Y}\right)}{d[L]} = \frac{K_1' + 2K_1'K_2'[L] + K_1'^2K_2'[L]^2}{(1 + K_1'[L])^2} = K_1'\frac{1 + 2K_2'[L] + K_1'K_2'[L]^2}{(1 + K_1'[L])^2}$$

A partir de esto:

$$h = \frac{d\left(\frac{Y}{1-Y}\right)}{d[L]}\frac{[L](1 - Y)}{Y} = K_1'\frac{1 + 2K_2'[L] + K_1'K_2'[L]^2}{(1 + K_1'[L])^2} \times [L] \times \frac{1 + K_1'[L]}{K_1'[L] + K_1'K_2'[L]^2}$$

$$h = \frac{K_1'[L](1 + 2K_2'[L] + K_1'K_2'[L]^2)}{(1 + K_1'[L])K_1'[L](1 + K_2'[L])} = \frac{1 + 2K_2'[L] + K_1'K_2'[L]^2}{(1 + K_1'[L])(1 + K_2'[L])}$$

Así queda establecido *h([L]).*

2- Primero vamos a calcular $\frac{dh}{d[L]}$ y luego vamos a hallar su raíz. Teniendo en cuenta la derivada del cociente de funciones utilizada en la parte 1, y la derivada del producto de funciones ((fg) '=f'g+fg'), tenemos que:

$$\frac{dh}{d[L]} =$$

$$\frac{(2K_2' + 2K_1'K_2'[L])(1 + K_1'[L])(1 + K_2'[L]) - (1 + 2K_2'[L] + K_1'K_2'[L]^2)(K_1'(1 + K_2'[L]) + K_2'(1 + K_1'[L]))}{(1 + K_1'[L])^2(1 + K_2'[L])^2}$$

$$= \frac{\begin{array}{c}2K_2' + 2K_1'K_2'[L] + 2K_2'^2[L] + 2K_1'K_2'^2[L]^2 + 2K_1'K_2'[L] + 2K_1'^2K_2'[L]^2 + 2K_1'K_2'^2[L]^2 + 2K_1'^2K_2'^2[L]^3 \\ -K_1' - K_2' - 2K_1'K_2'[L] - 2K_1'K_2'[L] - 2K_2'^2[L] - 4K_1'K_2'^2[L]^2 - K_1'^2K_2'[L]^2 - K_1'K_2'^2[L]^2 - 2K_1'^2K_2'^2[L]^3\end{array}}{(1 + K_1'[L])^2(1 + K_2'[L])^2}$$

El doble renglón en el numerador está para que puedan caber todos los términos. Reduciendo los términos del numerador obtenemos:

$$\frac{dh}{d[L]} = \frac{K_2' - K_1' + K_1'^2K_2'[L]^2 - K_1'K_2'^2[L]^2}{(1 + K_1'[L])^2(1 + K_2'[L])^2} = \frac{K_2' - K_1' + K_1'K_2'[L]^2(K_1' - K_2')}{(1 + K_1'[L])^2(1 + K_2'[L])^2}$$

Si $\frac{dh}{d[L]} = 0 \Rightarrow K_2' - K_1' + K_1'K_2'[L]^2(K_1' - K_2') = 0 \Rightarrow K_1'K_2'[L]^2(K_1' - K_2') = K_1' - K_2' \Rightarrow$

$$K_1'K_2'[L]^2 = \frac{K_1' - K_2'}{K_1' - K_2'} = 1 \Rightarrow [L] = \frac{1}{\sqrt{K_1'K_2'}}$$

3- Habiendo establecido que h tiene un extremo cuando $[L] = \frac{1}{\sqrt{K_1'K_2'}}$. Con este valor de [$L$], encontraremos $h_{ext}$ de la siguiente forma:

$$h_{ext} = h\left(\frac{1}{\sqrt{K_1'K_2'}}\right) = \frac{1 + 2K_2'\left(\frac{1}{\sqrt{K_1'K_2'}}\right) + K_1'K_2'\left(\frac{1}{\sqrt{K_1'K_2'}}\right)^2}{\left(1 + K_1'\left(\frac{1}{\sqrt{K_1'K_2'}}\right)\right)\left(1 + K_2'\left(\frac{1}{\sqrt{K_1'K_2'}}\right)\right)} = \frac{1 + 2\sqrt{\frac{K_2'}{K_1'}} + 1}{\left(1 + \sqrt{\frac{K_1'}{K_2'}}\right)\left(1 + \sqrt{\frac{K_2'}{K_1'}}\right)}$$

$$= \frac{2\left(1 + \sqrt{\frac{K_2'}{K_1'}}\right)}{\left(1 + \sqrt{\frac{K_1'}{K_2'}}\right)\left(1 + \sqrt{\frac{K_2'}{K_1'}}\right)} = \frac{2}{1 + \sqrt{\frac{K_1'}{K_2'}}}$$

Queda establecido entonces que:

$$h_{ext} = \frac{2}{1 + \sqrt{\frac{K_1'}{K_2'}}}$$