¿Cuál es la concentración de ligando libre $[L]_0$ para que el 75% de los sitios de un dímero simétrico estén ocupados?

Esta situación puede plantearse de la siguiente forma, utilizando las constantes microscópicas k_1 y k_2:

$$\frac{3}{4} = Y = \frac{k_1[L]_0 + k_1k_2[L]_0^2}{1 + 2k_1[L]_0 + k_1k_2[L]_0^2}$$

multiplicando ambos lados por ambos denominadores multiplicando

$$3 + 6k_1[L]_0 + 3k_1k_2[L]_0^2 = 4k_1[L]_0 + 4k_1k_2[L]_0^2$$

agrupando los términos similares, tenemos

$$3 + (6-4)k_1[L]_0 + (3-4)k_1k_2[L]_0^2 = 0$$

$$3 + 2k_1[L]_0 - k_1k_2[L]_0^2 = 0$$

que es un polinomio de segunod grado en $[L]_0$. Como queremos obtener una fórmula para $[L]_0$, debemos despejarlo usando la fórmula de Bhaskaras para las ecuaciones de segundo grado, con lo que tenemos que

$$[L]_0 = \frac{-2k_1 \pm \sqrt{4k_1^2 - 4 \cdot 3 \cdot (k_1k_2)}}{-2k_1k_2} = \frac{2k_1 \pm \sqrt{4k_1^2 + 12k_1k_2}}{2k_1k_2} = \frac{k_1 \pm \sqrt{k_1^2 + 3k_1k_2}}{k_1k_2}$$

Podemos refinar aún más esta ecuación: Sabemos que cuando no hay ligando, ningún sitio del receptor puede estar ocupado, y que, aunque nunca podamos llegar a saturar completamente el receptor, podemos acercanos a esta posibilidad al ir agregando cada vez más ligando a la solución donde se encuentra el receptor. Podemos decir entonces, que Y va de 0 a 1 a medida que variamos L, pasando por todos los puntos intermedios (porque pensamos a Y como una función continua). Más aún, sabemos que, para los receptores que hemos visto, ir agregando ligando no puede generar que se desocupen sitios, por lo que siempre que L aumenta, Y aumenta también. Uniendo todo esto, tenemos que nuestra ecuación siempre tiene que tener solución, y debe ser una sola. Sabiendo además que tiene que ser positiva, eso nos deja con

$$[L]_0 = \frac{k_1 + \sqrt{k_1^2 + 3k_1k_2}}{k_1k_2}$$

con lo que llegamos a la fórmula final que buscábamos.

Como caso particular podemos pensar en un caso en el que haya cooperatividad positivda, por ejemplo si $k_1 = 1mM^{-1}$ y $k_2 = 5mM^{-1}$. En ese caso, para que $Y = 0.75$ debería cumplirse que

$$[L] = \frac{1 + \sqrt{1+15}}{5} = \frac{1 + \sqrt{16}}{5} = \frac{1+4}{5} = 1mM$$