

CHEM-C3220 - Kemiallinen dynamiikka

1. laskuharjoitus 4.11.2020

1. Lääkkeen liukeneminen pallomaisesta partikkelista on diffuusion kontrolloimaa:

$$J = D \frac{C^s}{a}$$

J = diffuusiovuo = liukenemisnopeus (mol/(cm²s))

D = diffuusiokerroin (cm²/s)

C^s = kylläinen konsentraatio partikkelin pinnalla (mol/cm³)

a = partikkelin säde (cm)

Jos **sama lääkemäärä** (mg) on kahdessa eri partikkelikoossa $a_1 = 1,0$ mm ja $a_2 = 100$ μ m, miten **kokonaisliukenemisnopeudet** suhtautuvat toisiinsa?

2. Teofylliinin terapeutinen taso* on 10 μ g/mL ja CL = 67 mL/min. Mikä täytyy lääkkeen annostelunopeuden olla, jotta terapeutinen taso saavutetaan? Onko mahdollista annostella teofylliiniä (tästä näkökulmasta katsottuna) lääkeläästärin avulla, kun alkoholipohjaisesta voiteesta on saavutettu vuo ihon läpi 0,9 mg/(cm²h)? Kuinka kauan terapeutisen tason saavuttaminen kestää?
3. Oheisessa taulukossa on muutamien ionien säteet ja diffuusiokertoimet vedessä. Kuinka hyvin Stokes-Einstein-yhtälö ennustaa diffuusiokertoimet? Ottamalla kokeelliset arvot (D_m), mitä tulee kunkin ionin säteeksi?

Ioni	$r/\text{\AA}$	D_m (10^{-5} cm ² /s)
Li ⁺	0.74	1.030
Na ⁺	1.05	1.334
K ⁺	1.33	1.957
Rb ⁺	1.48	2.071
Cs ⁺	1.69	2.110
Cl ⁻	1.81	2.032
Br ⁻	1.95	2.084
I ⁻	2.16	2.044

* Terapeutinen taso on pitoisuus, jonka alapuolella lääkkeellä ei ole hoitovaikutusta. CLS = 'clearance', joka ilmoittaa lääkkeen eliminaation ts. metabolian nopeuden. Se on yhtä kuin lääkkeen eliminaation nopeusvakio k_e (1/s) kerrottuna tilavuudella, johon lääke jakautuu (distribution volume).