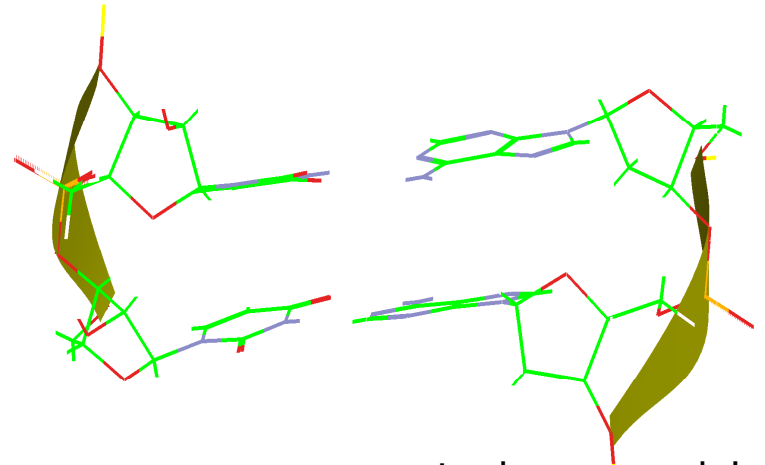
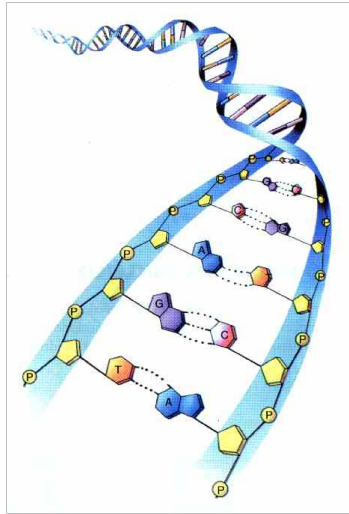


Self-assembly (auto-agregação)



Na bio(química-física):

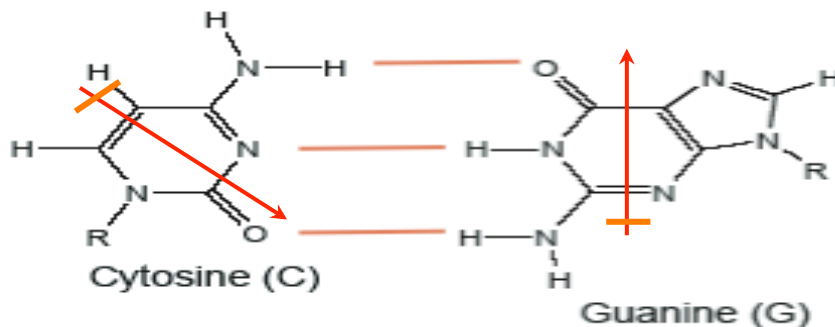
Auto-agregação (self-assembly) e Auto-organização



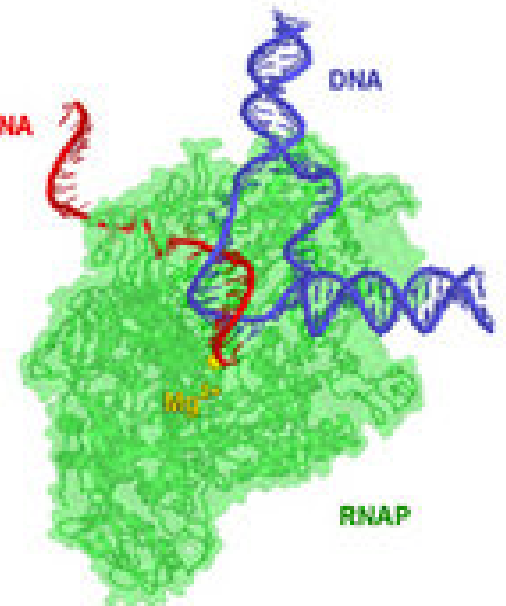
uma pequena parte de uma cadeia de
ARN e uma parte de ADN

Interacções intermoleculares

- Interacções de van der Waals
- Ligações de hidrogénio
- Interacções π - π



interacção
entre o ARN
e o ADN,
associados
a uma
enzima



Interações e ligações intermoleculares

AUTO-AGREGAÇÃO *Self-assembly*

QUÍMICA SUPRAMOLECULAR

“Self-assembly” (auto-agregação) molecular :
associação espontânea de moléculas, em condições de equilíbrio, de modo a formar agregados estruturalmente bem definidos, ligados por ligações não-covalentes

Auto-organização

Os sistemas auto-organizados apresentam muitas vezes propriedades ***emergentes***.

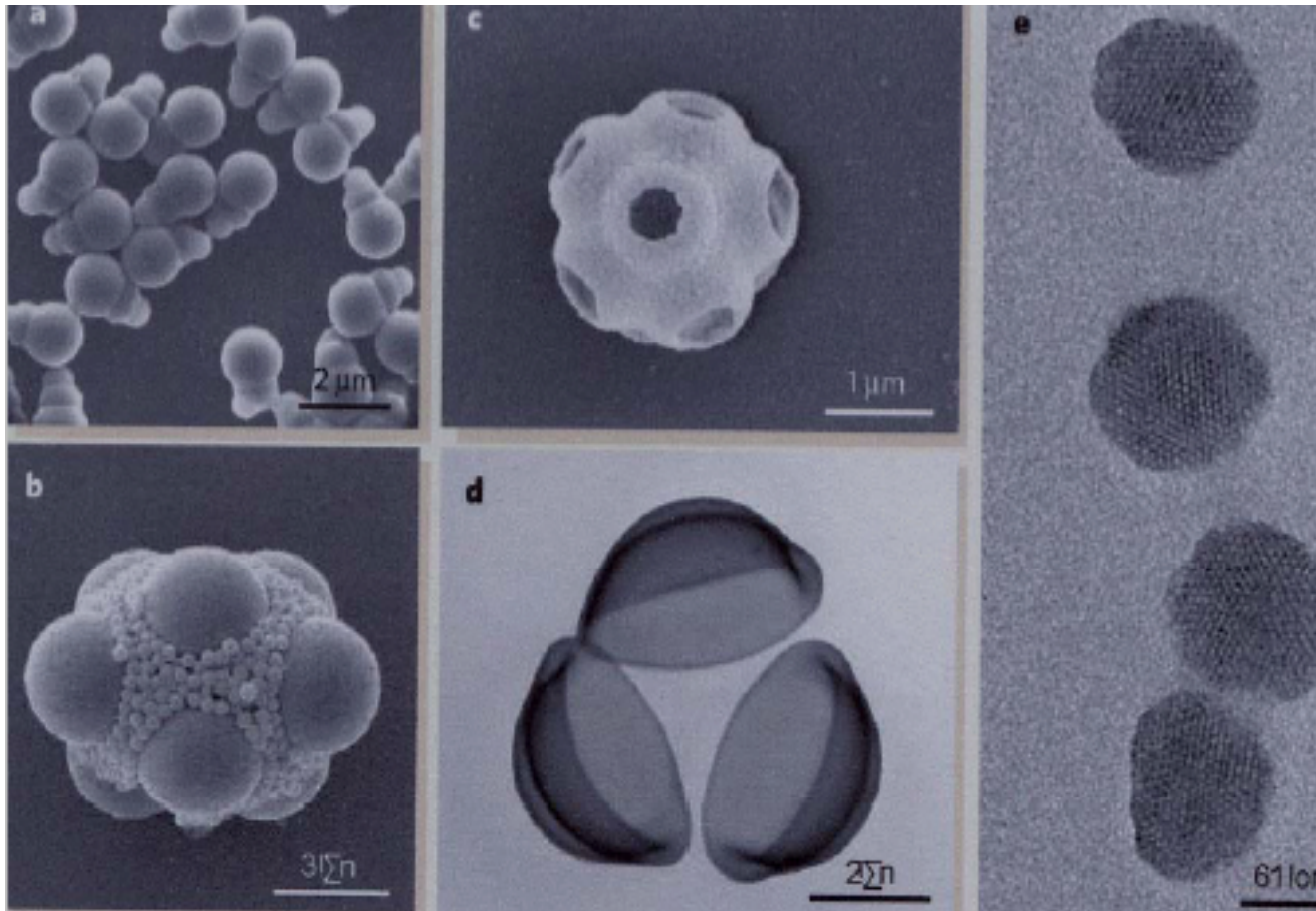
O conceito de ***emergência*** surge associado à complexidade.

Já Aristoteles, há mais de 2000 anos, escrevia na *Metafísica*, que "o todo é algo de diferente e acima das suas partes, e não apenas a soma de todas elas.

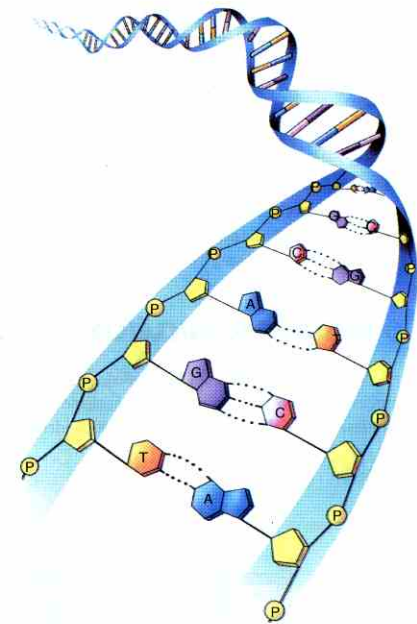
Foi no entanto no século XIX que essa ideia surgiu entre os biólogos para explicar como alguns aspectos dos seres vivos são estáveis e reprodutíveis, enquanto que as leis microscópicas da química donde descendem são aleatórias e probabilísticas.

Os especialistas consideram que os fenómenos emergentes são governados por **regras de selecção**, que controlam o modo como os agentes interactivam uns com os outros. Essas regras são muitas vezes expressas em modelos matemáticos. É curioso como **um pequeno conjunto de regras simples** pode gerar comportamentos de grande complexidade.

EMERGÊNCIA



Autoagregação de componentes sintéticos da matéria mole (e.g., polímeros, cristais líquidos, colóides e híbridos orgânicos/inorgânicos) gera **estruturas hierárquicas organizadas regulares**



Componentes
naturais
e.g., Proteínas,
ADN



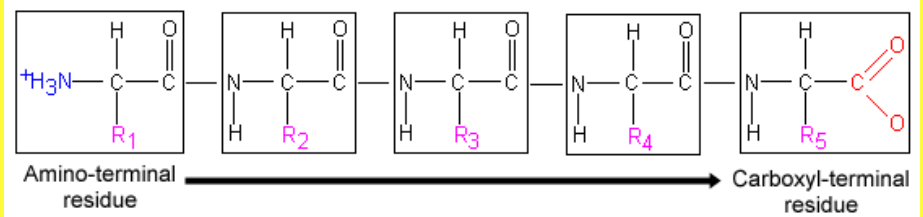
Jackson Pollock - Alchemy, 1947. Oil, aluminum, enamel paint, and string on canvas, 45 1/8 x 87 1/8 inches. Peggy Guggenheim Collection.

As tintas de Jackson Pollock não se auto-organizaram (**por si**), dando a **estrutura emergente** que nós admiramos.

Foi preciso o input do génio de Jackson Pollock.

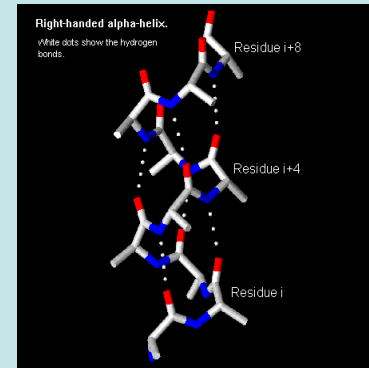
Self-assembly na matéria viva: e.g., Proteínas

Estrutura primária:
sequência de aminoácidos
20 aminoácidos



Estrutura secundária: hélice alfa

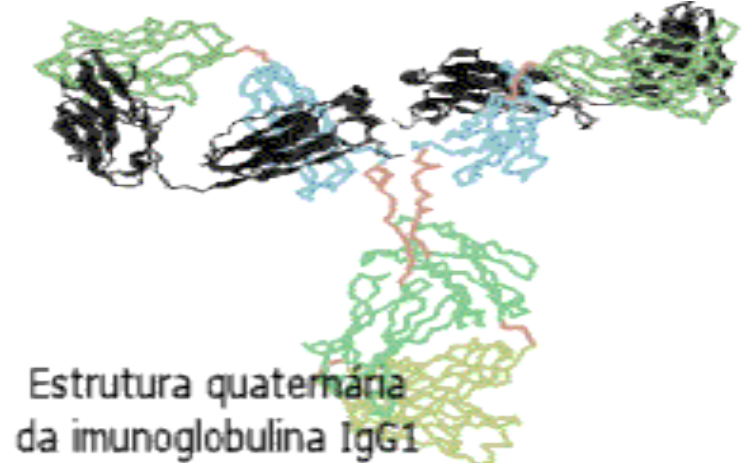
interações intermoleculares (pontes de hidrogénio) entre os aminoácidos



Estrutura terciária:
conformação espacial



Estrutura quaternária: várias unidades



Factores responsáveis pelo processo de self-assembly

Interações intermoleculares

Forças de van der Waals

Pontes de hidrogénio

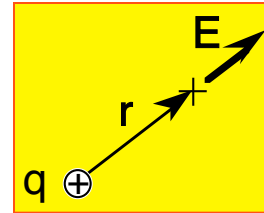
Empilhamento π - π

Definições: momento dipolar, polarizabilidade

Campo à distância r da carga q na origem das coordenadas

$$\text{Força entre 2 cargas: } F = \frac{q_1 q_2}{4\pi\epsilon_0 r^2}$$

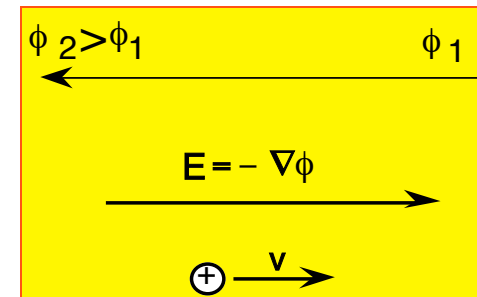
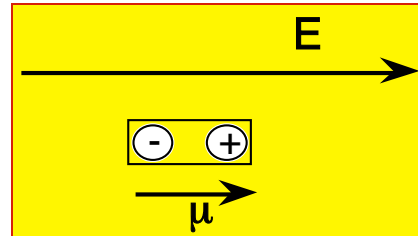
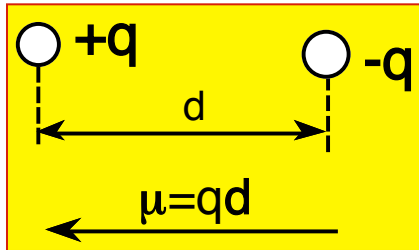
$$E = \frac{q r}{4\pi\epsilon_0 r^3}$$



O campo eléctrico é o gradiente do potencial eléctrico: $E = -\nabla\phi$

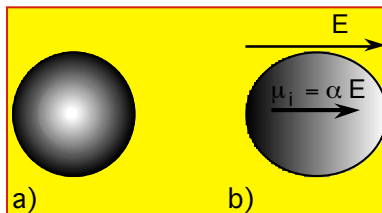
$$[E] = \text{V m}^{-1}; [\phi] = \text{V}$$

momento dipolar

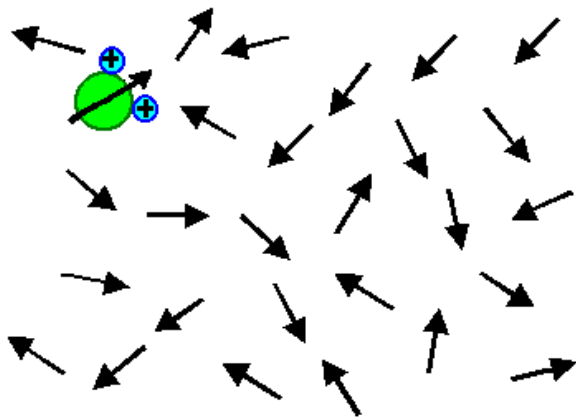


uma carga positiva colocada no campo eléctrico irá mover-se de um potencial mais alto para um potencial mais baixo

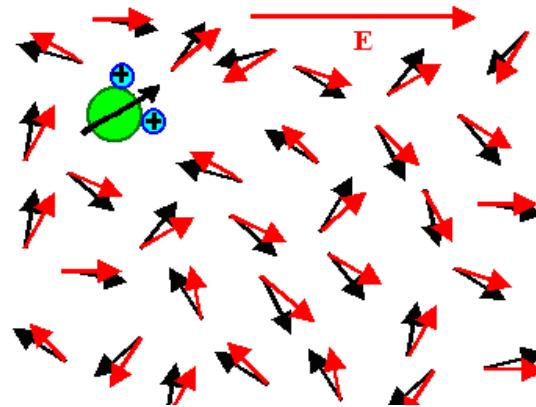
polarizabilidade



$$\mu_i = \alpha E$$



Sem campo eléctrico



Com campo eléctrico

$$\bar{\mu} = \frac{\mu^2}{3k_B T}$$

$$P_m = \frac{\epsilon_r - 1}{\epsilon_r + 2} \frac{M}{\rho} = \frac{N_A}{3 \epsilon_0} \left(\alpha + \frac{\mu^2}{3k_B T} \right)$$

Eq. Langevin-Debye

Microondas

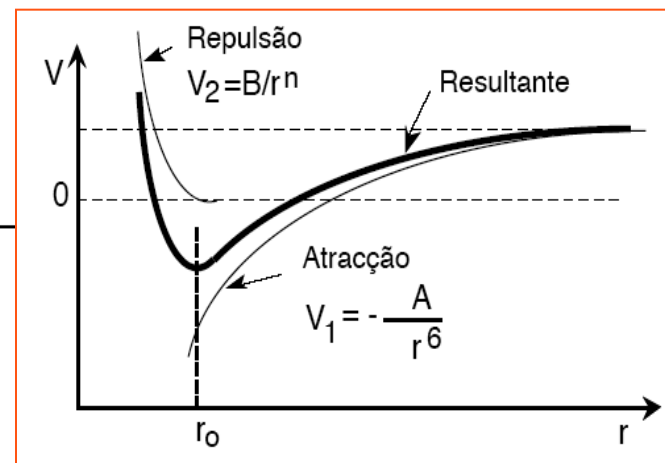
$$R_m = \frac{n^2 - 1}{n^2 + 2} \frac{M}{\rho} = \frac{N_A \alpha}{3 \epsilon_0}$$

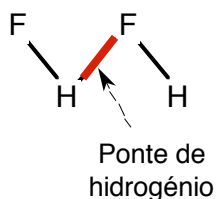
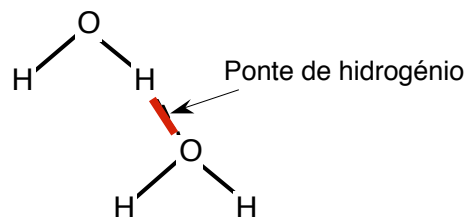
Luz visível

Interacções intermoleculares e dependência com a distância

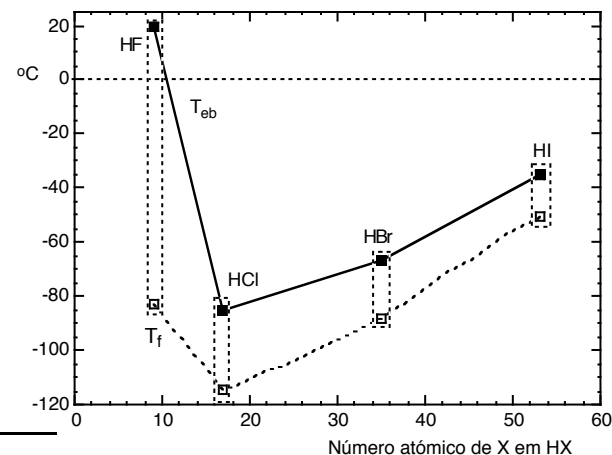
Tipo de interacção	Dependência da energia potencial com a distância	V/(kJ mol ⁻¹)	Comentários
Dipolo-dipolo (Keesom)	$V_K = -\frac{C_K}{r^6}$ $C_K = -2\left(\frac{\mu_1\mu_2}{4\pi\epsilon_o}\right)^2 \frac{1}{3k_B T}$	0.3	Entre moléculas polares não estacionárias
Dipolo-dipolo induzido (Debye)	$V_D = -\frac{C_D}{r^6}$ $C_D = \frac{\mu_1^2\alpha_2}{4\pi^2\epsilon_o^2}$		Entre moléculas polares e não polares. Nas polares, é um termo aditivo à interacção de Keesom.
Dipolo induzido- dipolo induzido (dispersão) (London)	$V_L = -\frac{C_L}{r^6}$ $C_L \propto -\alpha_1\alpha_2 \frac{I_1 I_2}{I_1 + I_2}$ I_1, I_2 =energias de ionização	2	Entre todos os tipos de moléculas

A energia potencial resultante das forças de van der Waals é devida a duas componentes, uma atractiva e outra repulsiva. Por esse facto existe um mínimo que corresponde à distância de equilíbrio.





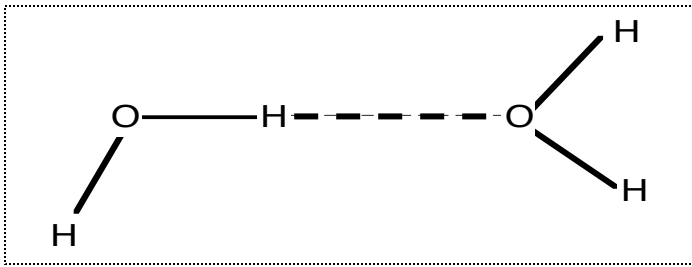
Correlação entre os pontos de fusão e de ebulição de moléculas polares do tipo HX, (sendo X=F, Cl, Br, I) e o número atómico do elemento X.



HX	nº atómico de X	Ponto de fusão, $T_f/^\circ\text{C}$	Ponto de ebulição, $T_{eb}/^\circ\text{C}$
HF	9	-83.1	19.54
HCl	17	-114.8	-84.9
HBr	35	-88.5	-67
HI	53	-50.8	-35.38(?)

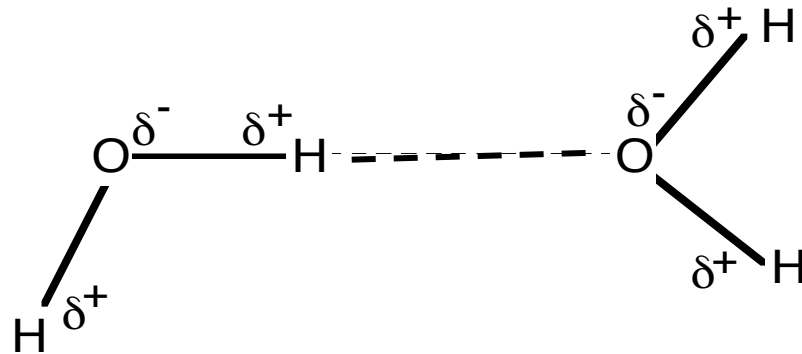
Correlação entre os pontos de fusão e de ebulição de moléculas do tipo H_2X , (sendo X=O, S, Se, Te) e o número atómico do elemento X.

H_2X	nº atómico de X	Ponto de fusão, $T_f/^\circ\text{C}$	Ponto de ebulição, $T_{eb}/^\circ\text{C}$
H_2O	8	0.00	100.00
H_2S	16	-85.5	-60.7
H_2Se	34	-60.4	-41.5
H_2Te	52	-49	-2



A ligação de hidrogénio é muito mais fraca do que a ligação covalente, mas mais forte do que as interacções de van der Waals. A energia associada à ligação de hidrogénio é cerca de 10 vezes maior do que a atracção de van der Waals e cerca de 10 vezes menor do que a ligação covalente!

A explicação da ligação de hidrogénio baseia-se na natureza polar das ligações F—H, O—H e N—H. Numa molécula como a de H₂O, o par de electrões na ligação O—H está deslocado na direcção do núcleo de oxigénio, afastando-se dos núcleos de H. Isso dá um carácter iónico parcial à ligação O—H, tendo o H um certo carácter positivo, e permitindo aos electrões de um outro átomo aproximarem-se bastante do protão, embora ele já esteja ligado.

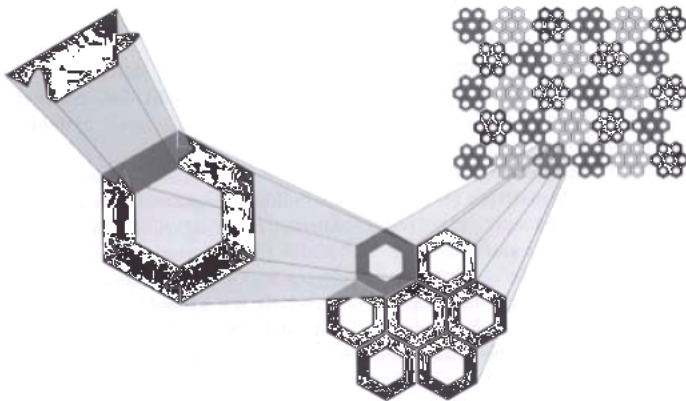


COMPLEXIDADE

- Estruturas complexas (e.g., organismos vivos, tais como o cérebro e as células, materiais de elevado grau de estruturação, sistemas políticos, a sociedade) partilham o facto sua complexidade inerente resultar da organização intrincada de um vasto número de unidades simples.
- Nestas estruturas, o comportamento complexo **não se deve apenas** à estrutura atómica dos constituintes, mas ao *arranjo ordenado de todos ou parte dos constituintes*.

AUTO-ORGANIZAÇÃO HIERÁRQUICA

- **blocos de construção primários** (“building blocks”, BBs) associam-se para formar estruturas secundárias mais complexas que, por sua vez, são integradas no nível hierárquico seguinte.
- o esquema de organização continua até se atingir o nível hierárquico mais elevado.



As estruturas hierárquicas podem exibir propriedades únicas que não se encontram nos constituintes individuais.

VISÃO SUPRAMOLECULAR



Prémio Nobel da Química em 1987

"for their development and use of molecules with structure-specific interactions of high selectivity"

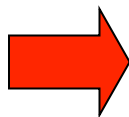


Jean-Marie Lehn

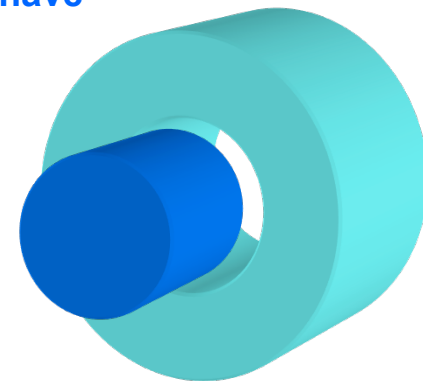
pioneiro da química supramolecular

- introduziu na química o conceito de que o **reconhecimento molecular** pode conduzir à **auto-organização** dos **sistemas supramoleculares**
- **kit de construção**: moléculas **orgânicas** e **inorgânicas complementares** que se **reconhecem espontaneamente** através de **interacções intermoleculares** do tipo **fechadura-chave**

forças directoras da
auto-organização molecular



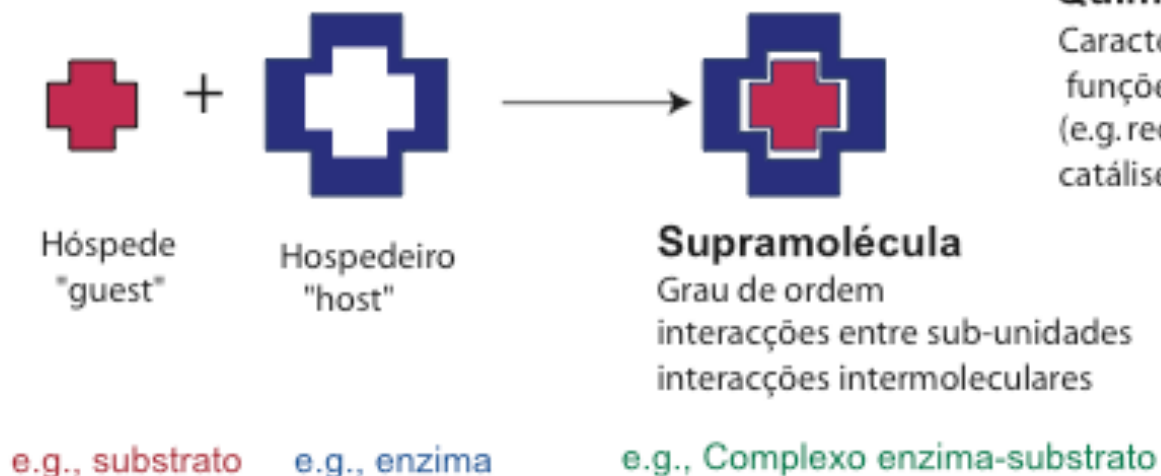
iónicas
covalentes
não-covalentes
de coordenação
ligações de hidrogénio





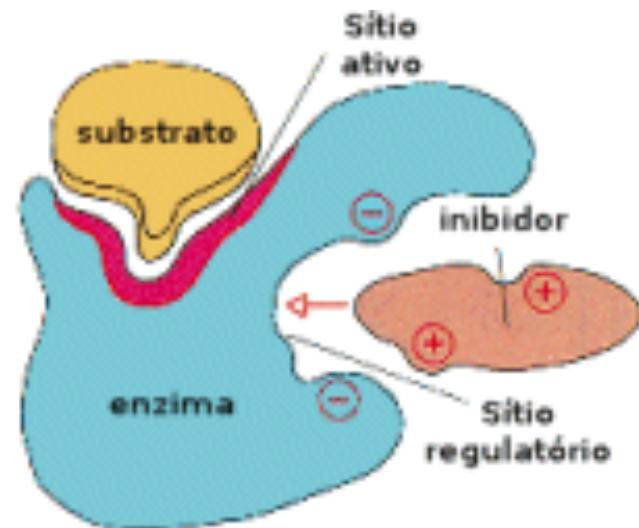
Química Molecular

propriedades redox,
forma, HOMO-LUMO
polaridade
quiralidade
etc.



Química Supramolecular

Características específicas,
funções ou propriedades
(e.g. reconhecimento,
catálise, transporte)



Uma dada região de uma proteína liga-se a um substrato, que se adapta ao sítio ativo da enzima, como uma **chave** na **fechadura**.

Hospedeiro-Hóspede

Na química biológica:

Hospedeiros: *sítios* receptores das enzimas, genes, anticorpos.

Hóspedes: substratos, inibidores, drogas, antígenos

Todos exibem propriedades supramoleculares: reconhecimento molecular, self-assembly, complementaridade cinética e termodinâmica.

Devidas a interações supramoleculares ião-dipolo, H---, empilhamento π - π

Exemplos da química biológica:

1. catiões metálicos (e.g. Na^+ , K^+) através de membranas (potenciais de membrana) — e.g., transporte de sinais em neurónios.
2. porfirinas e macrociclos— e.g. clorofila (complexos de Mg), hemoglobina
3. processo de fotossíntese
4. transporte de oxigénio pela hemoglobina
5. neurotransmissores e hormonas (acetilcolina)
6. DNA

H---, π - π , a razão pela qual se forma a hélice dupla reside no facto (pensa-se) que a hélice dupla permite às partes hidrofóbicas da molécula (as nucleobases) evitar o solvente aquoso, otimizando as interações internucleobases minimizando ao mesmo tempo o espaço vazio no interior.

7. *self-assembly* bioquímico

“Self-assembly” (auto-agregação) molecular :
associação espontânea de moléculas, em condições de equilíbrio, de modo a formar agregados estruturalmente bem definidos, ligados por ligações não-covalentes

Estratégias de síntese de macromoléculas e agregados moleculares — *nanoestruturas*

- i) **Formação sequencial de ligações covalentes**
- ii) **Polimerização covalente**

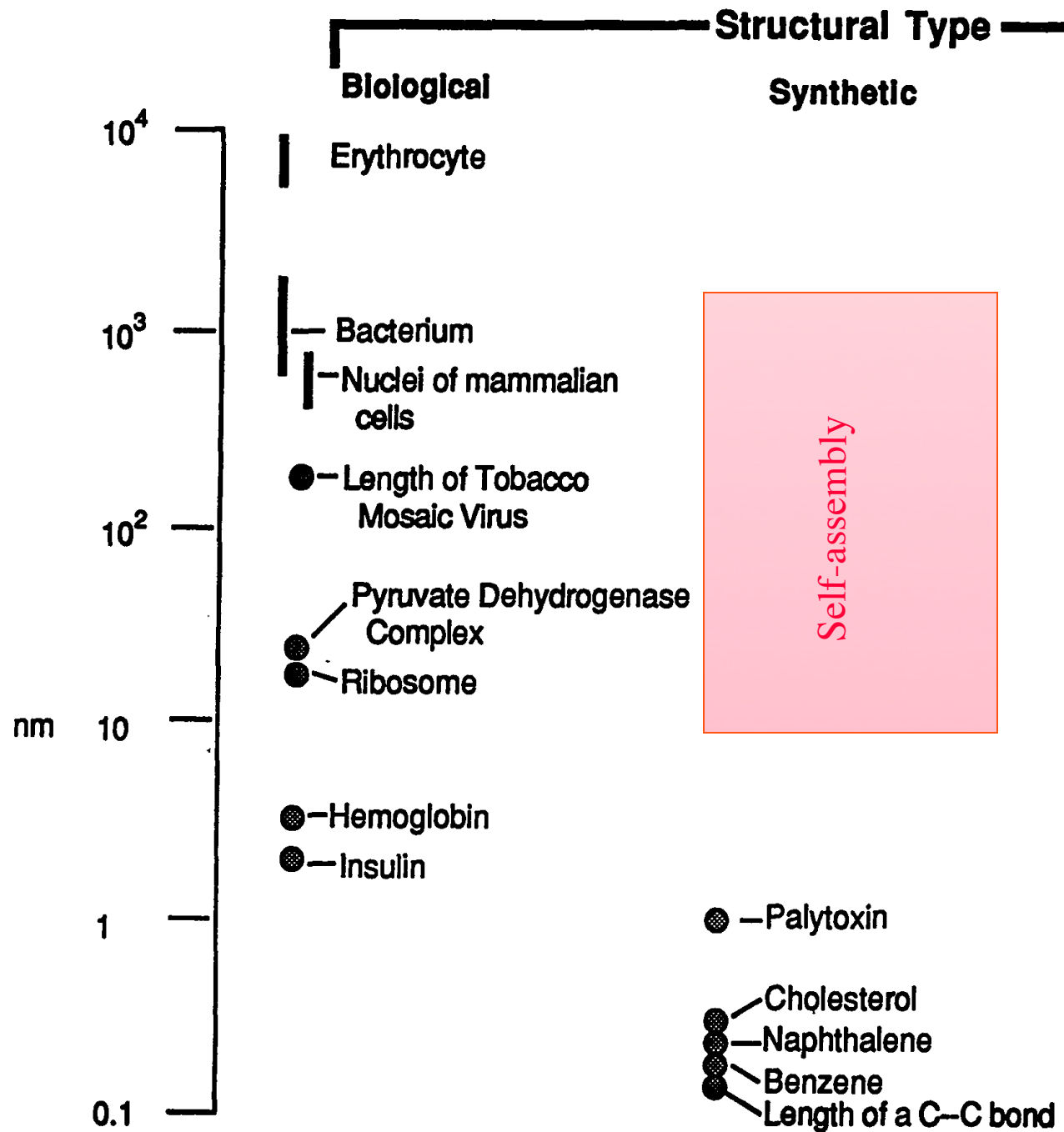
- iii) **Síntese auto-organizadora — Uso de ligações fracas e não direccionadas**
 - i) iónicas
 - ii) ligações de H,
 - iii) interacções de van der Waals

- iv) **“self-assembly” molecular**
 - i) **formação de moléculas de complexidade intermédia** (formação sequencial de ligações covalentes)
 - ii) **formação de agregados** (ligações de H, interacções de van der Waals)
 - iii) **uso de cópias múltiplas de uma ou várias moléculas** (replicação)

Interacções de van der Waals:

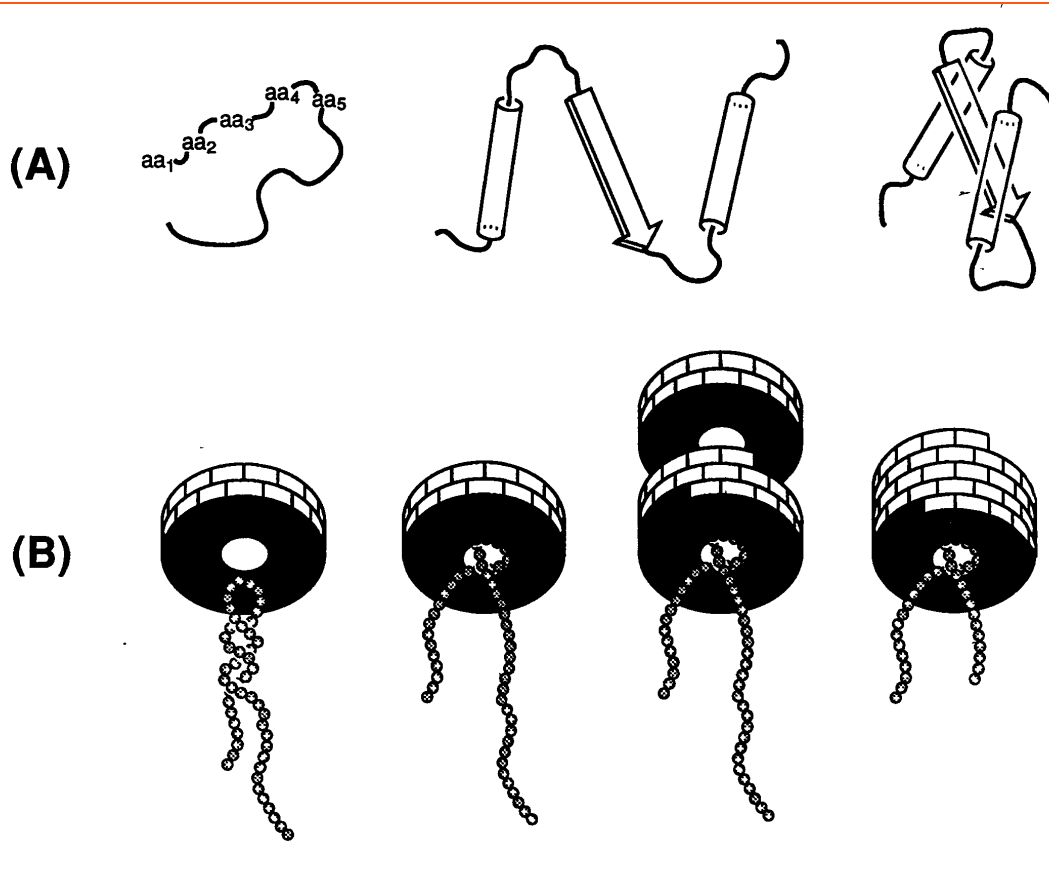
- i) Dipolo-dipolo
- ii) Dipolo-dipolo induzido (Debye)
- iii) Dipolo induzido-dipolo induzido (London)

A interacção **hidrofóbica** combina interacções de van der Waals com as consequências entálpicas e entrópicas da restrição da ligação de H da água junto de uma interface não-polar



Exemplos biológicos

Self-assembly em solução aquosa



Cooperatividade

Modificação da conformação de partículas individuais quando se ligam de modo a aumentar a afinidade para as outras componentes

A) *folding* de proteínas

- i) Interações electrostáticas envolvendo grupos carregados e dipolos
- ii) Ligações de H
- iii) Interações de grupos carregados e não carregados com moléculas de água (efeito hidrofóbico e hidrofílico)

B) Self-assembly do vírus mosaico do tabaco

Partícula com 300 nm x 18 nm
2130 unidades de proteína, cada uma com 158 resíduos amino-ácidos à volta de uma única sequência de RNA (com 6400 nucleotídeos)

C) Formação de hélices duplas (e.g., DNA)

Princípios de *self-assembly* molecular em biologia:

- i) Associação de várias interações fracas reversíveis de modo a dar uma estrutura final que corresponde a um mínimo termodinâmico. As unidades incorrectas são rejeitadas no processo de associação dinâmica.
- ii) A *self-assembly* é um processo modular (unidades pré-formadas)
- iii) Só estão normalmente envolvidos pequenos números de tipos de moléculas — minimizando a quantidade de informação requerida para uma determinada estrutura: 20 aminoácidos, uns poucos nucleótidos, uma dúzia de lípidos, 2 dúzias de açúcares + alguns intermediários
- iv) Cooperatividade
- v) Complementaridade na forma molecular
- vi) Quiralidade

Em resumo:

Self-assembly molecular requer apenas a informação contida na forma, propriedades de superfície e deformabilidade de um número limitado de precursores moleculares.

A associação entre esses precursores envolve interações não-covalentes que geram estruturas que correspondem a **mínimos termodinâmicos**.

TERMODINÂMICA

O balanço entre a entalpia, ΔH e a entropia, ΔS , na formação das estruturas é mais importante do que na formação das ligações covalentes.

Os valores de ΔH para as interações que dão coesão a estruturas *self-assembled* variam bastante mas estão compreendidas entre 2 e 20 kcal/nm² de superfície.

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S \leq 0$$

$$\Delta G = \Delta G^\circ + RT \ln Q \leq 0$$

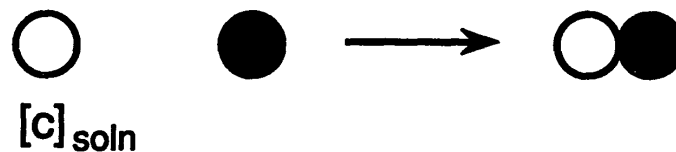
Condição de espontaneidade

ΔH



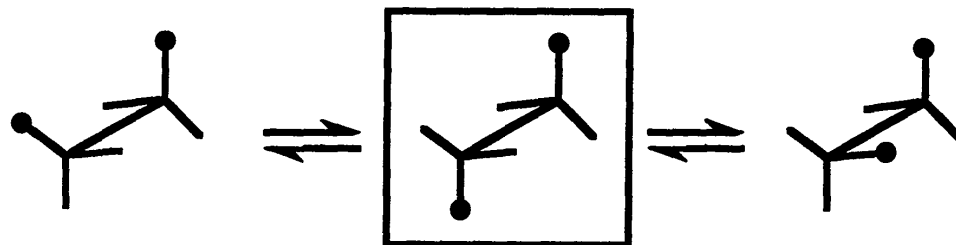
$$\Delta H \sim -2 - 20 \text{ kcal/nm}^2$$

$T\Delta S$ translation

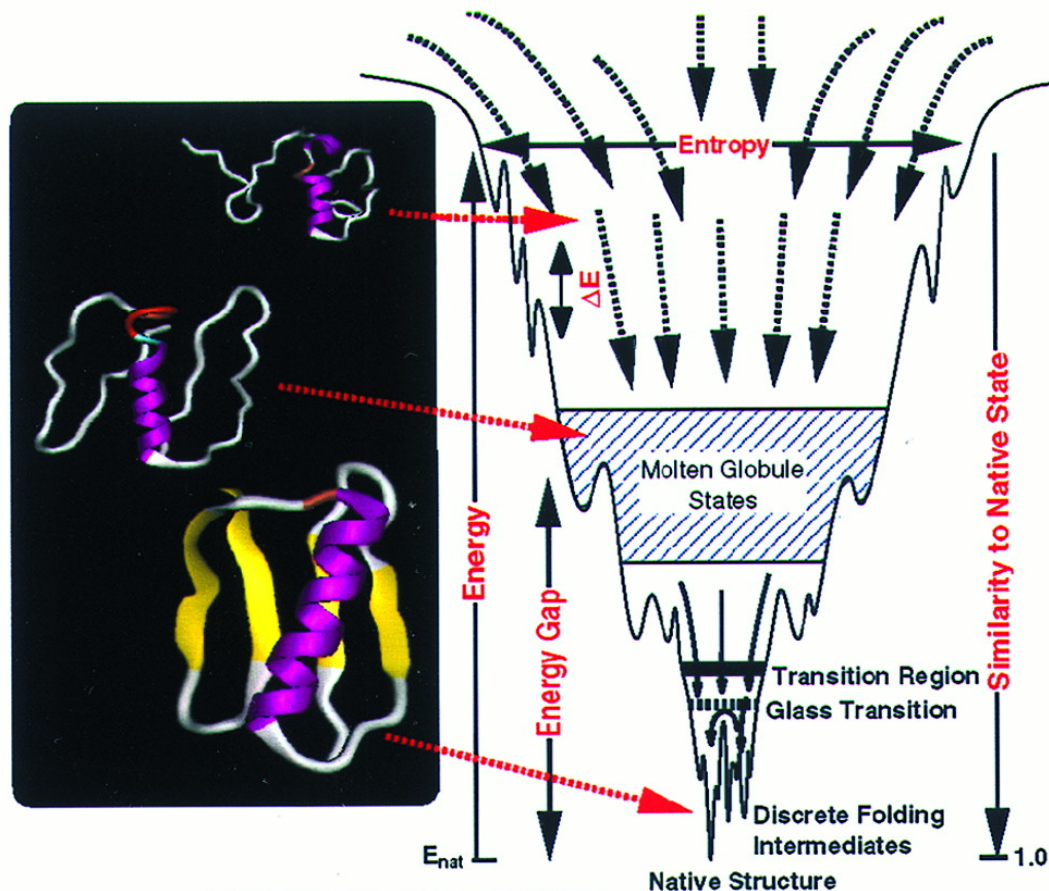


$$T\Delta S_{\text{trans}} \sim RT \ln \frac{[c]_{\text{soln}}}{[c]_{\text{pure}}} \sim 0.6 \ln \frac{[c]_{\text{soln}}}{10} \sim -5.5 \text{ kcal/mol}$$

$T\Delta S$ conformation



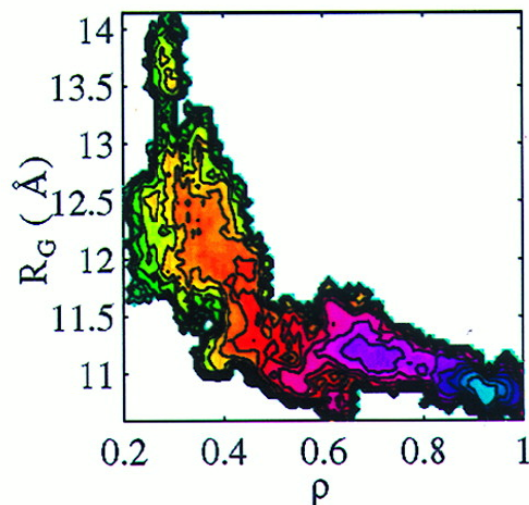
$$T\Delta S_{\text{conf}} \sim RT \ln \frac{1}{3} \sim -0.7 \text{ kcal/mol}$$



The energy landscape for a folding protein.

ΔE is related to the glass transition temperature, T_g

The folding landscape for GB1 is projected onto two coordinates, the radius of gyration, R_g , of the folding globule, and the fraction of native contacts, ρ , which indicates how close the folding protein is to the native.

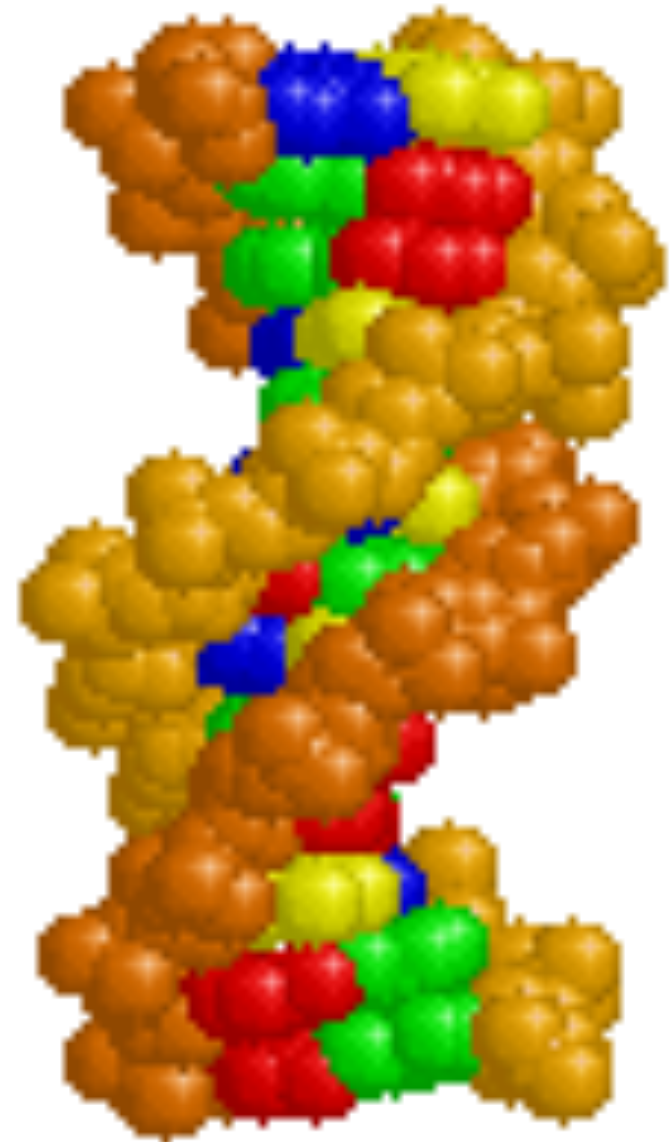
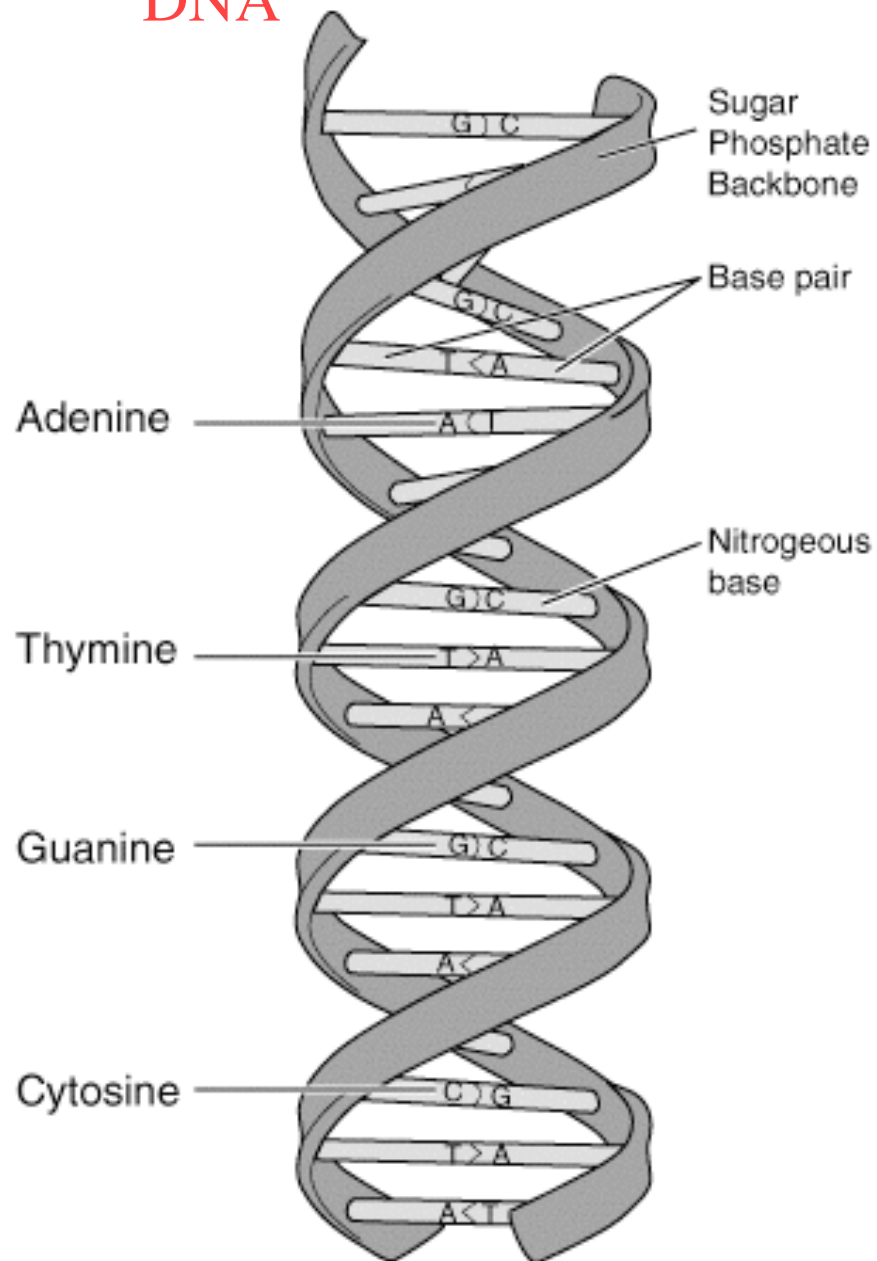


The free energy change as folding occurs is shown as a contoured surface: (native) state corresponds to the blue region and the most unfavorable unfolded state is represented by the green contours.

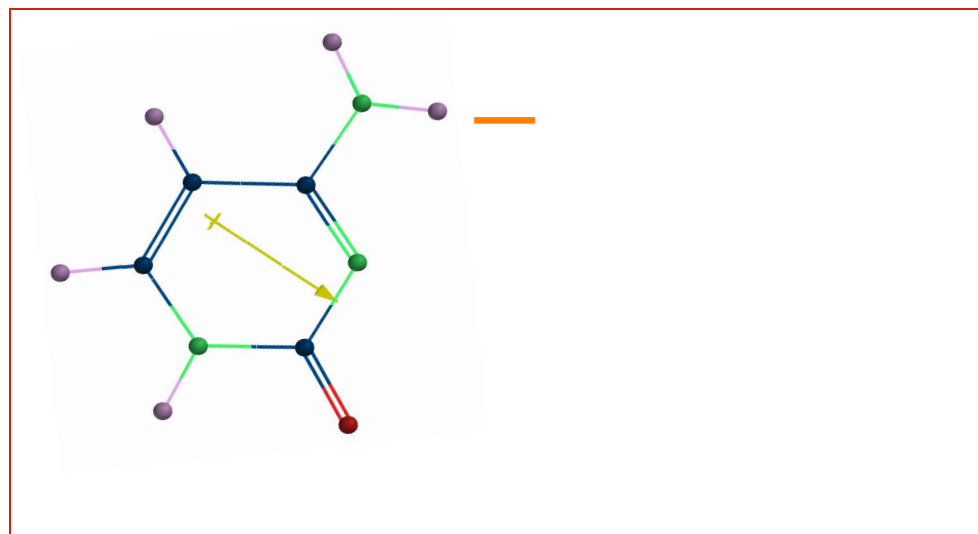
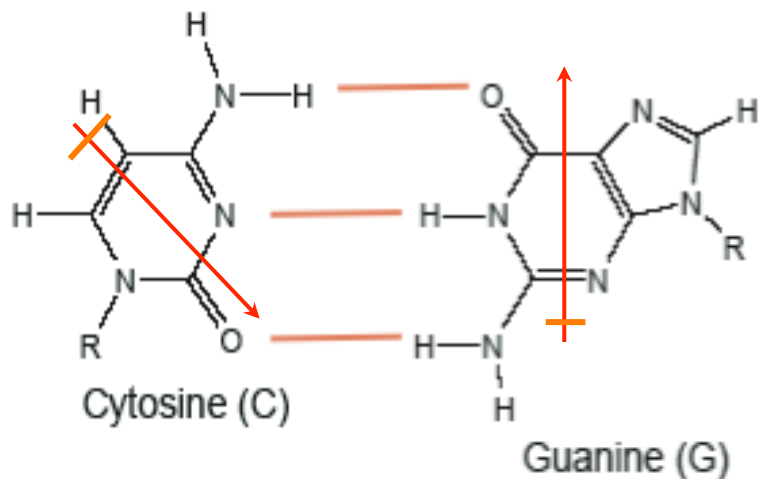
Table 1. Types of bonds and interactions applicable to molecular self-assembly. Boldfaced entries in the column headed “Examples” are important in (or taken from) biochemistry.

Bond type	Examples
Covalent bonds that can be formed and broken reversibly	Disulfides (RSSR, ribonuclease); vanadate and borate esters
Inorganic metal-ligand bonds	Metal salts; organometallic complexes; zinc fingers (65)
Hydrogen bonds	Crystalline urea; melamine cyanurate; nucleotide base pairs; amide hydrogen bonds in proteins
Electrostatic interactions involving charges	Salt bridges in proteins ; cadmium arachidate bilayers
Electrostatic interactions involving dipoles	Crystalline IC ₆ H ₄ CN
Hydrophobic interactions	Micelles; Langmuir-Blodgett monolayers on water; lipid bilayers, hydrophobic “cores” of proteins , inclusion complexes with cyclodextrins (66)
Aromatic π -stacking and charge transfer	Nucleic acids ; J-aggregates (67)
Van der Waals interactions	<i>n</i> -Alkane crystals; urea inclusion complexes

DNA



Name	E LUMO (eV)	E HOMO (eV)	Dipole (debye)
Guanine	6.5307	-5.65	5.53
cytosine	6.247	-6.35	5.01



Cálculo computacional

Exemplos de sistemas auto-organizados dinâmicos (sistemas complexos)

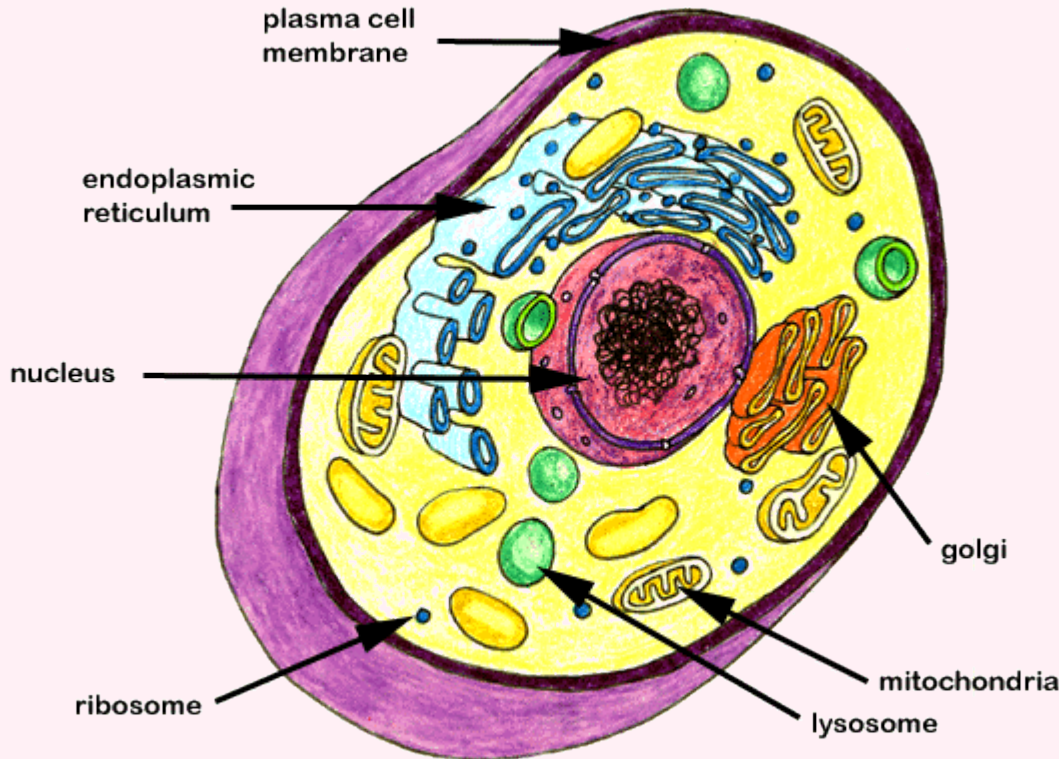
- Células
- Membranas das células
- Neurónios
- Cérebro

Dimensões: 10 - 100 μm

Numa célula viva há cerca de 10 000 proteínas que se movem de modo organizado.

Cada célula sabe a sua posição no organismo, pensa-se que, *comunicando* com as vizinhas.

A origem evolutiva da célula está relacionada com a origem da vida.

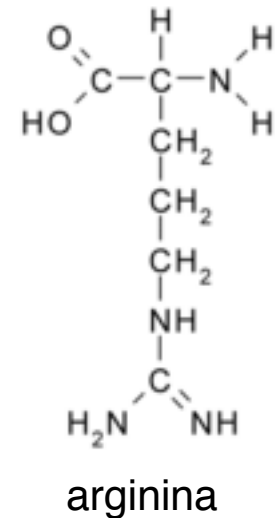
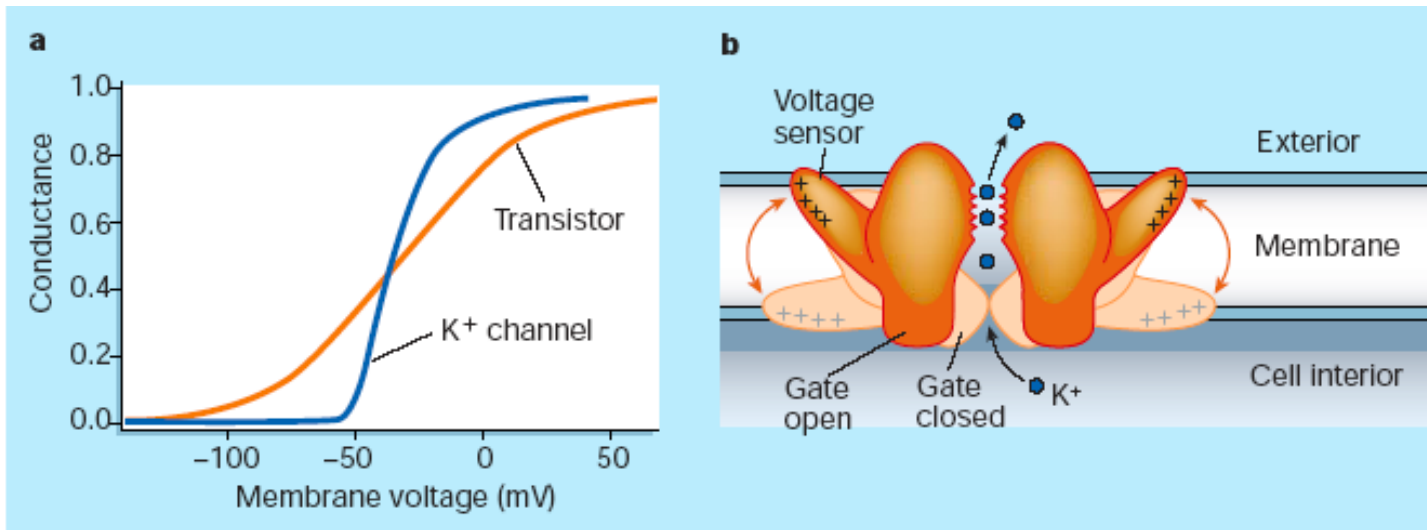
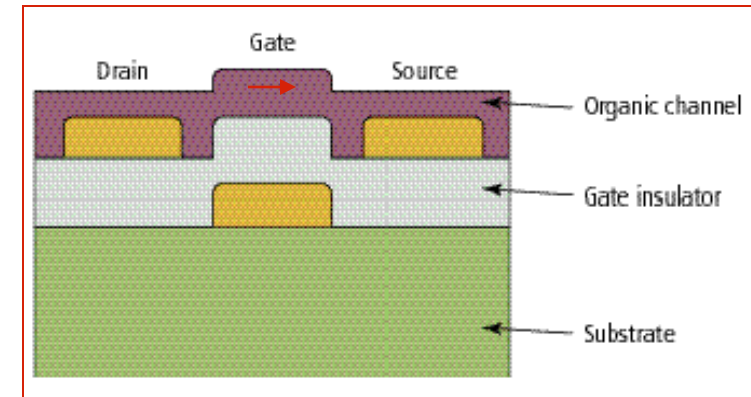


Célula

Não se sabe quase nada!

As membranas das células vivas contêm macromoléculas (proteínas) que funcionam como transistores.

Nos transistores, a corrente de electrões através do *canal* é controlada pela tensão da *porta*. Nas membranas das células, uma tensão imposta através da membrana, provoca a abertura dos canais de iões que atravessam a membrana.

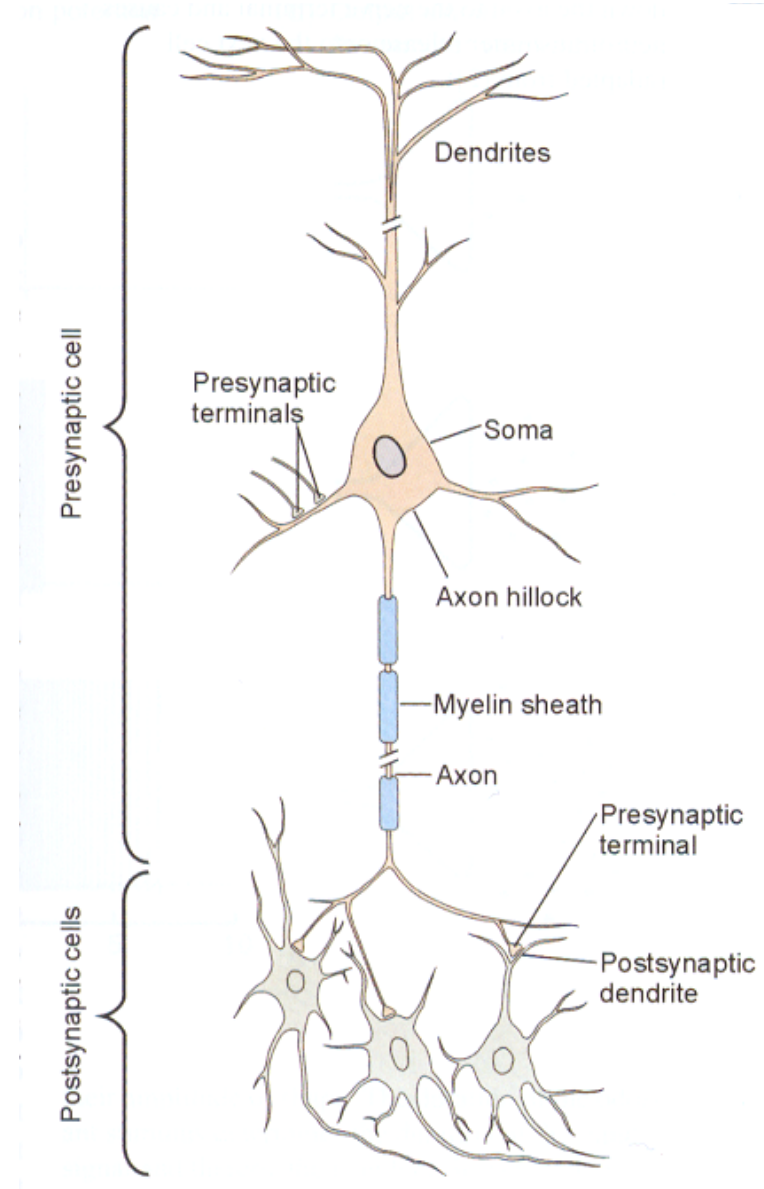


- Comparaç o da condut ncia em funç o da tens o aplicada na porta num transistor e numa membrana em que o controle de fluxo de i es   feito pela tens o atrav s da membrana.
- Os sensores de tens o no canal de pot ssio s o paletas carregadas electricamente que se movem no fl uido interior da membrana. H  4 sensores ligados mecanicamente ao canal da porta. Cada sensor tem 4 cargas positivas (arginina).

A elevada sensibilidade resulta do transporte de 16 cargas quase totalmente atrav s da membrana.

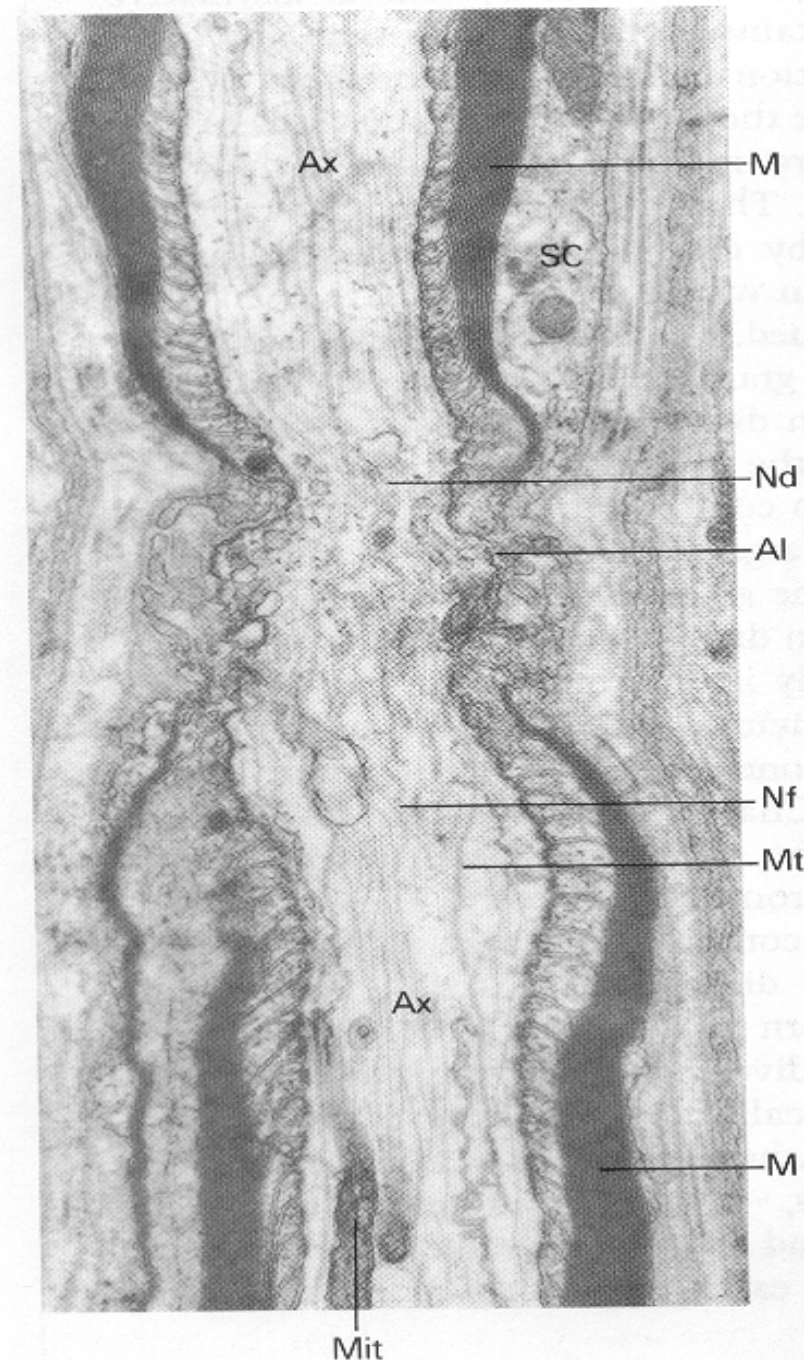
O neurónio tem três subdivisões:

1. Corpo ou soma;
2. Axónio;
3. Dendrites.

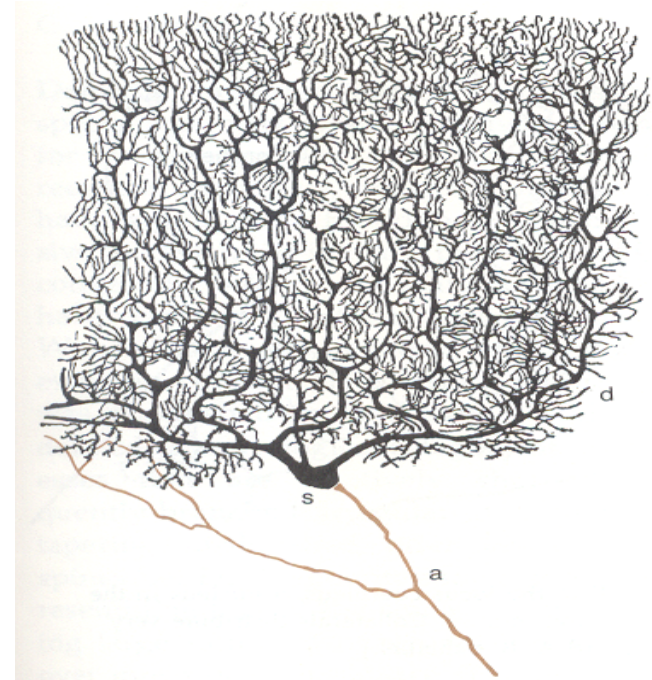
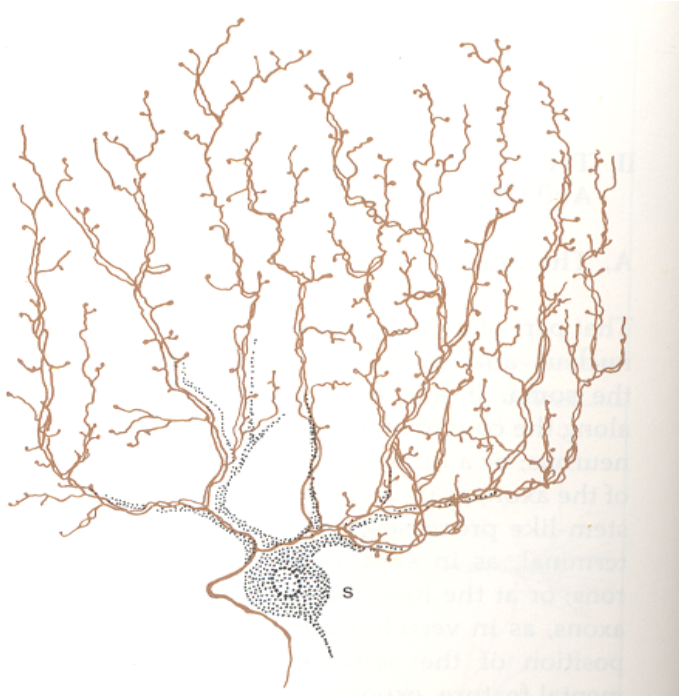


2. Axónio

- Conduz excitação de forma constante (sem decair);
- Ramificações do axónio: terminações pré-sinápticas (função secretora);
- Transmite o impulso para outros neurónios ou para órgãos efectores (músculos e glândulas);



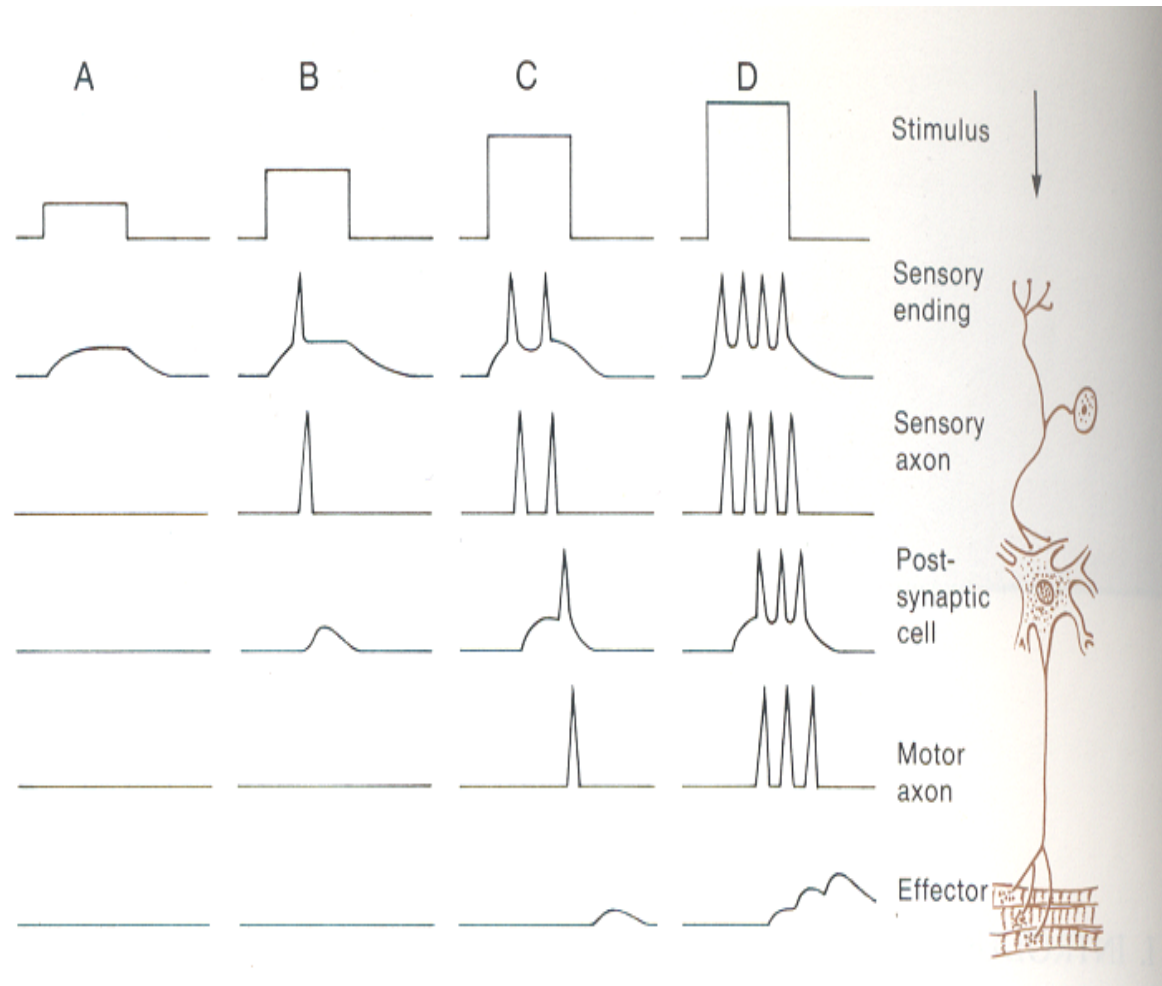
3. Dendrites



- Unidades receptoras do neurónio (junções pós-sinápticas);
- Ramos finos especializados em produzir potenciais sinápticos como resposta a adequados eventos pré-sinápticos.

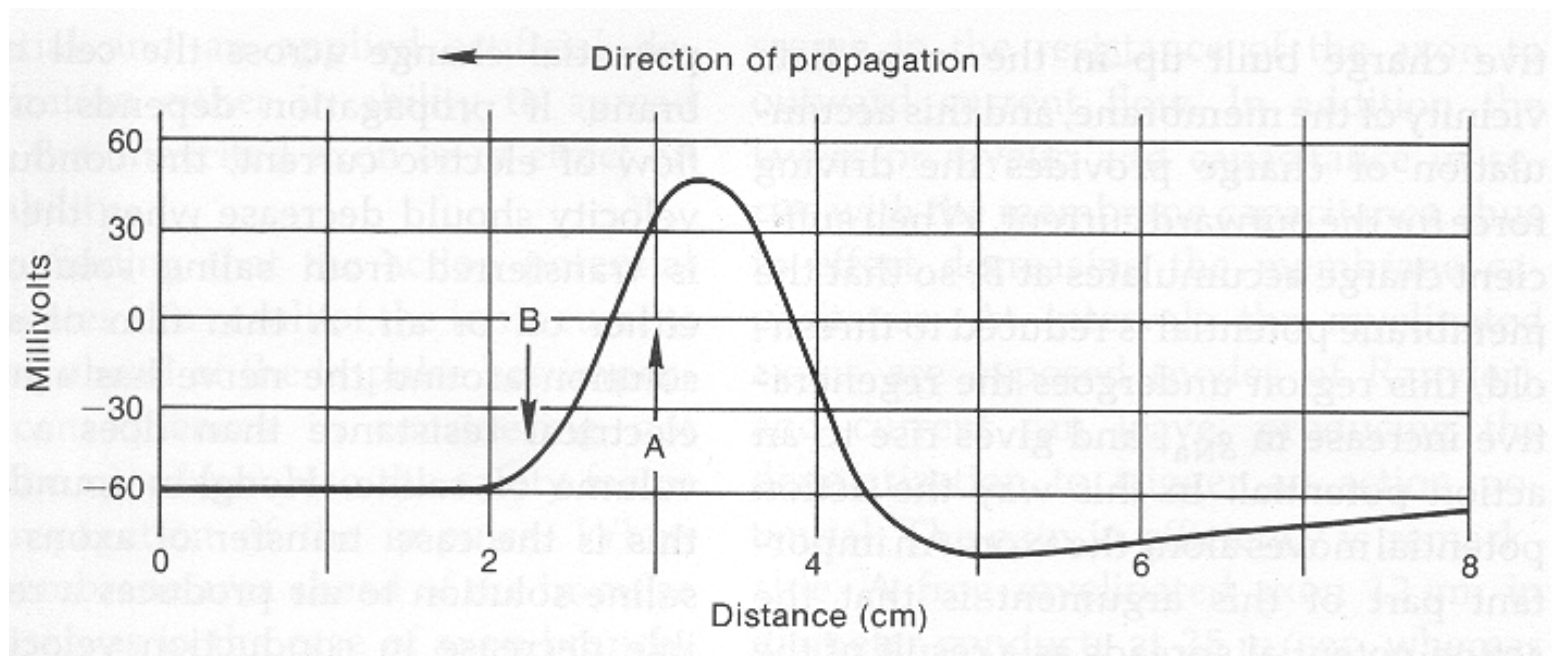
B.1 Sinais eléctricos do sistema nervoso

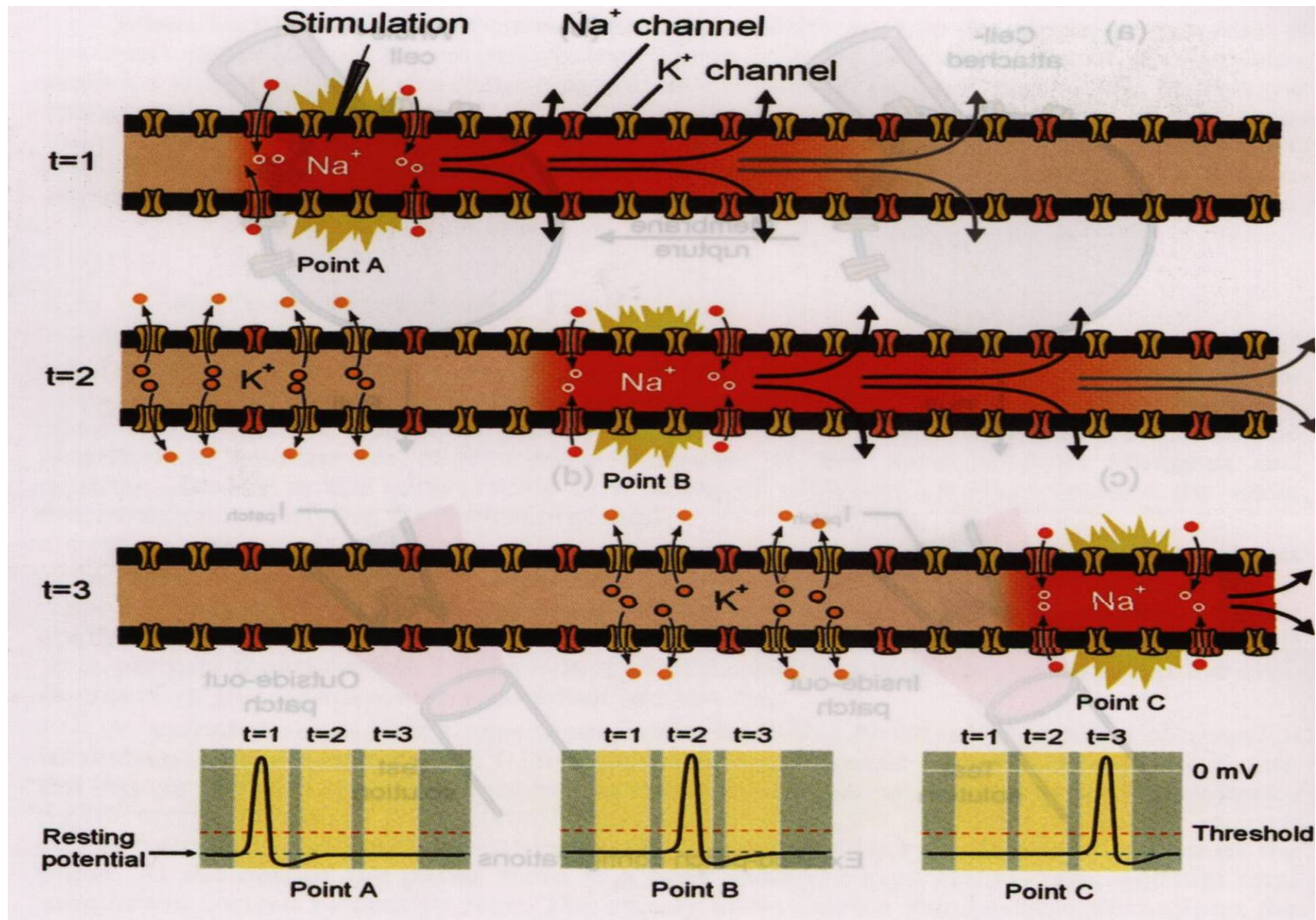
- Energia externa é absorvida pelo neurónio sensorial: potencial gerador sensorial (PGS);
- PGS pode levar a uma alteração de potencial: potencial de acção (impulso nervoso).



C.3 Propagação

- Velocidade de condução = 150m/s (540 km/h)
- Potencial de acção ocupa 2cm
- Propaga-se como resultado da corrente iónica que flui à frente do impulso





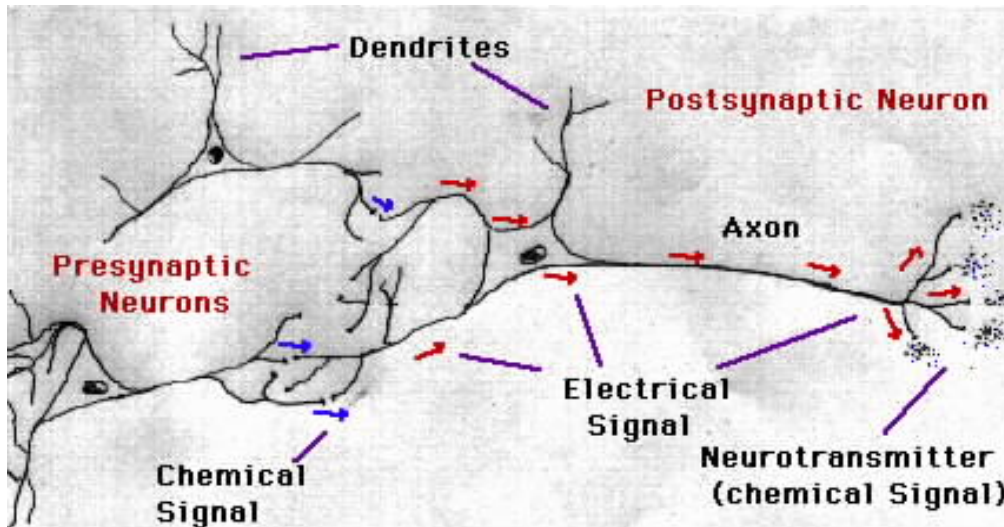
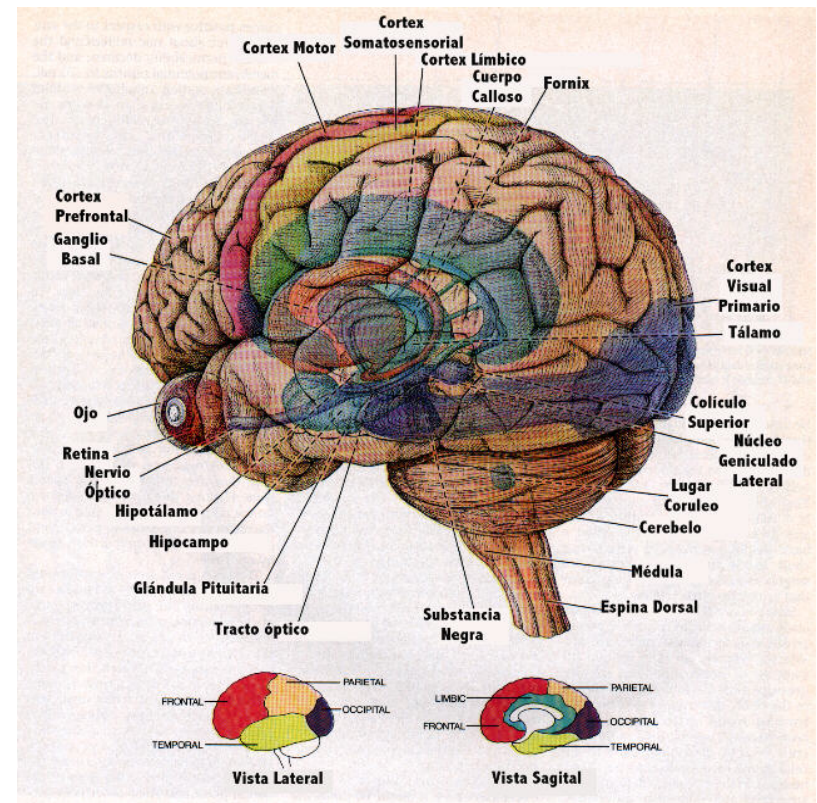
- O potencial de acção desloca-se ao longo do axónio, depolarizando as áreas adjacentes, ou seja, abrindo canais iónicos de Na^+ .

O Cérebro Humano

~ 10^{11} neurónios

~ 10^4 ligações sinápticas por neurónio

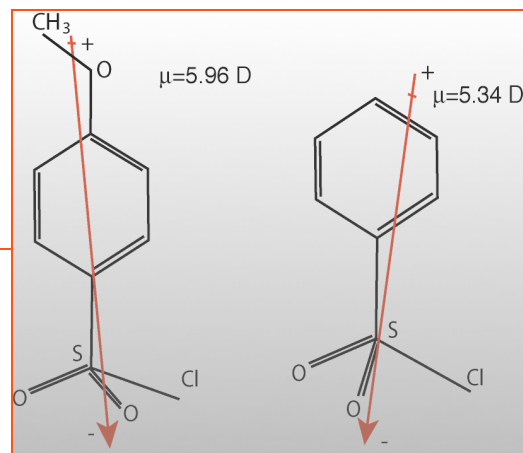
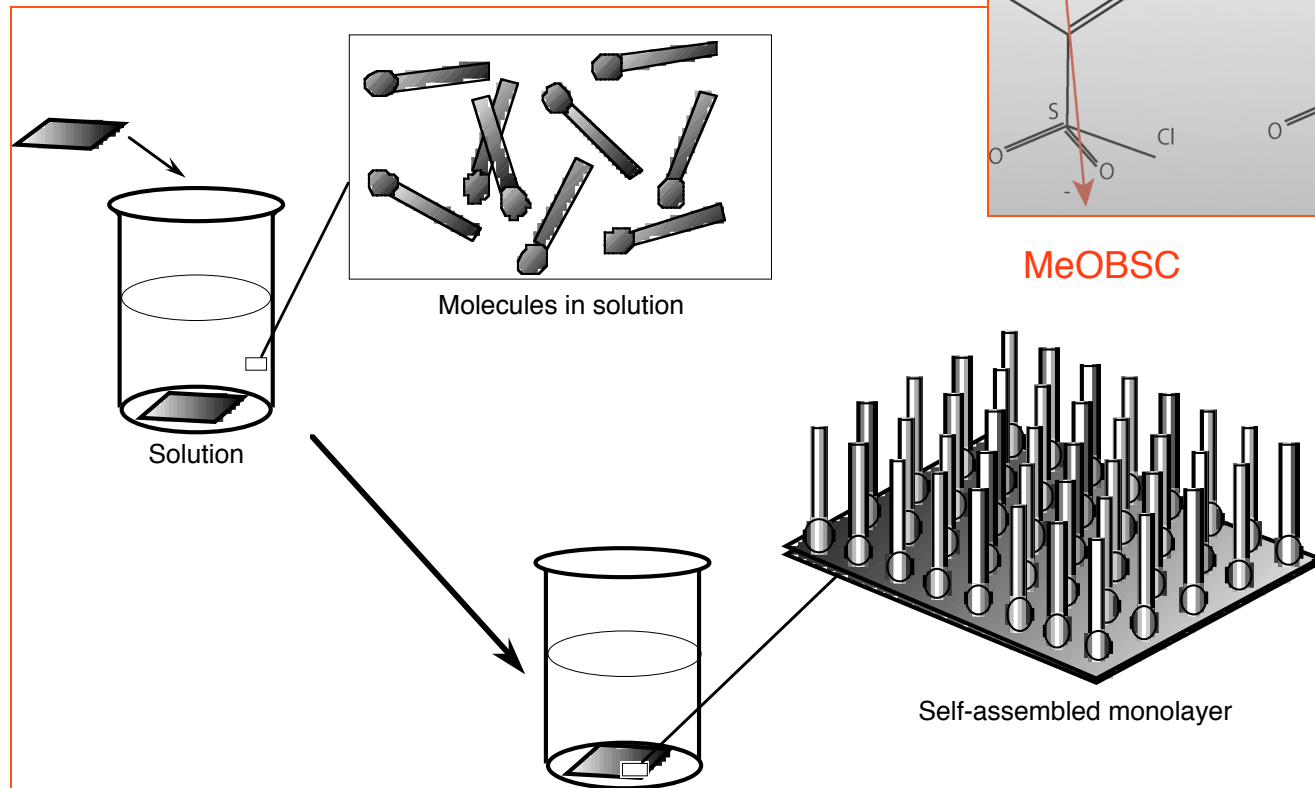
~ 10^6 km de ligações



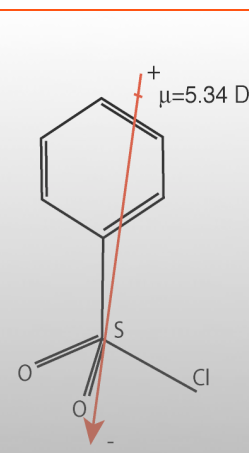
As grandes questões que se colocam à química:

- Qual é a base química da célula viva?
- Qual a base química do pensamento e da memória?
- Como começou a vida na terra, e como e onde poderá começar noutros mundos?
- Como poderemos fazer o "design" de moléculas com funções e dinâmicas específicas?
- Como poderemos fabricar os materiais necessários para o futuro, nas áreas da energia, da indústria aeroespacial e da medicina?
- Como poderemos explorar todas as possíveis combinações de todos os elementos químicos?

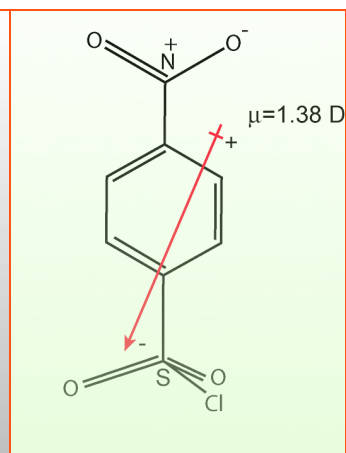
Nanotechnologias



MeOBSC



BSC



NBSC

Self-assembly occurs spontaneously as molecules with a specially chosen “end group” attach themselves to a substrate.
Example: alkanethiol molecules on gold

[Scientific American June 2000].

Teoria da complexidade

Rene Thom (morfogenese)

Andrei Kolmogorov
Andrei Kolmogorov

Edward Lorenz
Alan Turing

ENIAC and Complex Systems Tools
Balthazar Van der Pol

Fractals

Benoit Mandelbrot

Georg Cantor
Bifurcation

George Birkhoff
Catastrophe Theory

Infinite Sets
Cellular Automata

Jules Henri Poincare
Chaos

Kurt Godel
Chaotic Attractor

Michele Henon
Claude Shannon

Nonlinearity
Communication Theory

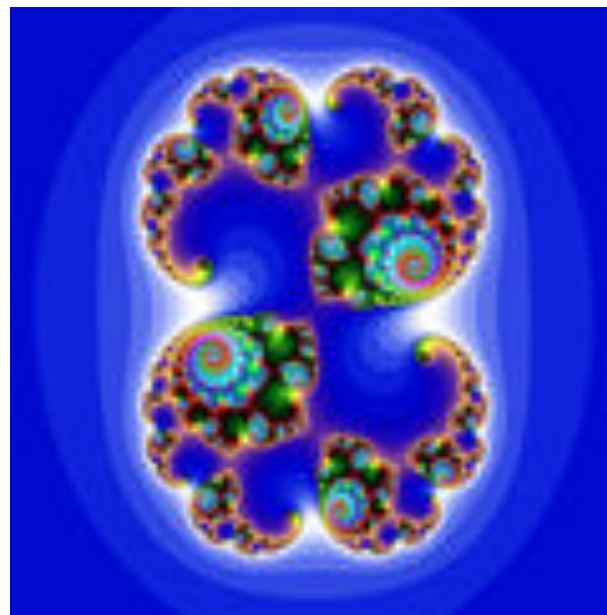
Qualitative Dynamics
Complexity

Fractals. *Julia set*

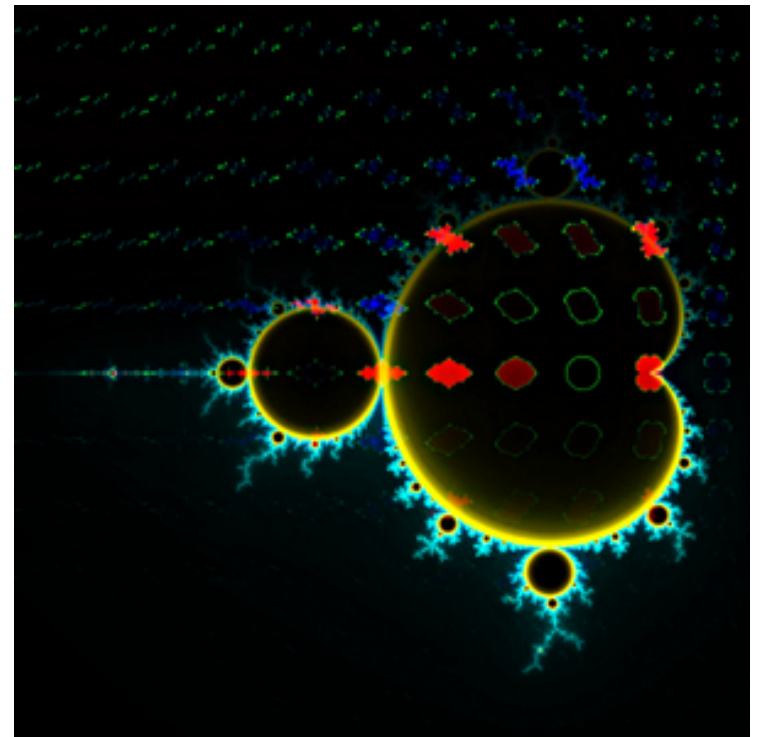
$$f_c(z) = z^2 + c$$



Filled Julia set for f_c , $c = \phi - 2$ where ϕ is the golden ratio



Julia set for f_c ,
 $c = 0.285 + 0.01i$





Jackson Pollock - Alchemy, 1947. Oil, aluminum, enamel paint, and string on canvas, 45 1/8 x 87 1/8 inches. Peggy Guggenheim Collection. 76.2553.150. Jackson Pollock © 2007 The Pollock-Krasner Foundation/ Artists Rights Society (ARS), New York.

Há duas razões para suspeitar que as pinturas de Pollock podem ter geometria fractal.

Ao mover-se à volta da tela, estendida no chão, o artista deixa a tinta voar de todos os ângulos, usando todo o seu corpo.

Sabe-se que os movimentos do corpo humano têm propriedades fractais, quando as pessoas retomam o equilíbrio, e os filmes de Pollock parecem mostrar que ele pintava num estado de *desequilíbrio controlado*.

Em segundo lugar, o derramar e o pingar da tinta, podem ser processos *caóticos*.

Richard Taylor, Univ. of Oregon

Analizou 14 Pollocks, 37 imitações e 46 de origem desconhecida

Pollock-Krasner Foundation

NATURE, Vol 439, 9 February 2006

As tintas de Jackson Pollock não se auto-organizaram (por si), dando a estrutura emergente que nós admiramos.

Foi preciso o input do génio de Jackson Pollock.

More Is Different

Broken symmetry and the nature of the hierarchical structure of science.

P. W. Anderson

SCIENCE

4 August 1972, Volume 177

The reductionist hypothesis may still be a topic for controversy among philosophers, but among the great majority of active scientists I think it is accepted without question. The workings of our minds and bodies, and of all the animate or inanimate matter of which we have any detailed knowledge, are assumed to be controlled by the same set of fundamental laws, which except under certain extreme conditions we feel we know pretty well.

LAPLACE (1820)

The constructionist hypothesis breaks down when confronted with the twin difficulties of scale and complexity. The behavior of large and complex aggregates of elementary particles, it turns out, is not to be understood in terms of a simple extrapolation of the properties of a few particles. Instead, at each level of complexity entirely new properties appear, and the understanding of the new behaviors requires research which I think is as fundamental in its nature as any other.

...

FITZGERALD: The rich are different from us.

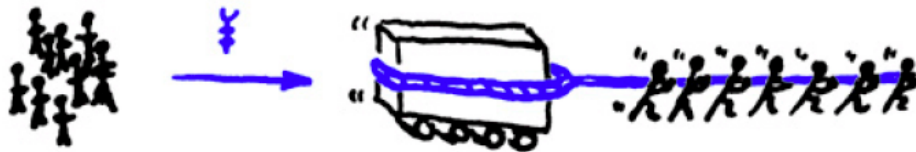
HEMINGWAY: Yes, they have more money.

Teoria da emergância

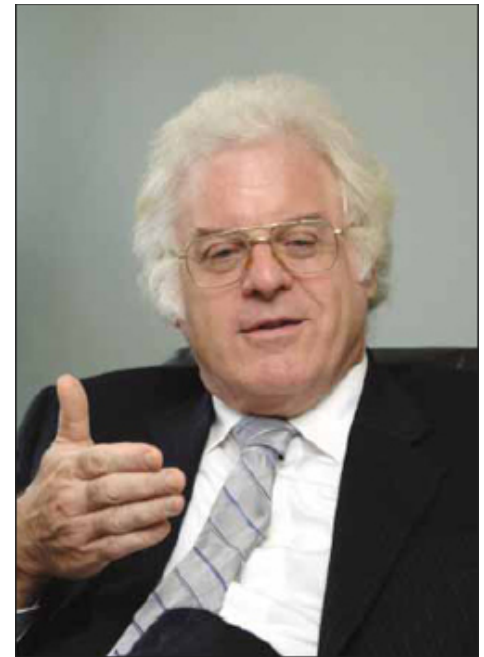
①

Self-Organization of Matter

R.B. Laughlin
Stanford University
USA



R. Laughlin



Robert Laughlin

1998 Nobel Prize in physics for his explanation of the fractional quantum Hall effect.

Todos sabemos que as sociedades humanas se organizam.
Mas também é verdade que a natureza se organiza, e que os princípios pelos quais o faz é o principal tema da ciência moderna

Theory of Everything

②

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi$$

$$\hat{H} = - \sum_j \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_j^2 - \sum_a \frac{\hbar^2}{2m_a} \nabla_a^2$$

$$- \sum_{j,k} \frac{Ze^2}{|r_j - r_k|} + \sum_{j,k} \frac{e^2}{|r_j - r_k|} + \sum_{a,b} \frac{Z_a Z_b e^2}{|R_a - R_b|}$$

e = electron charge
 $= 1.60217733(49) \times 10^{-19}$ coulomb
 $\hbar$ = planck's constant
 $= 1.05457266(63) \times 10^{-34}$ joule-sec.
 m = electron mass
 $= 9.1093897(54) \times 10^{-31}$ kg



Increasing Complexity

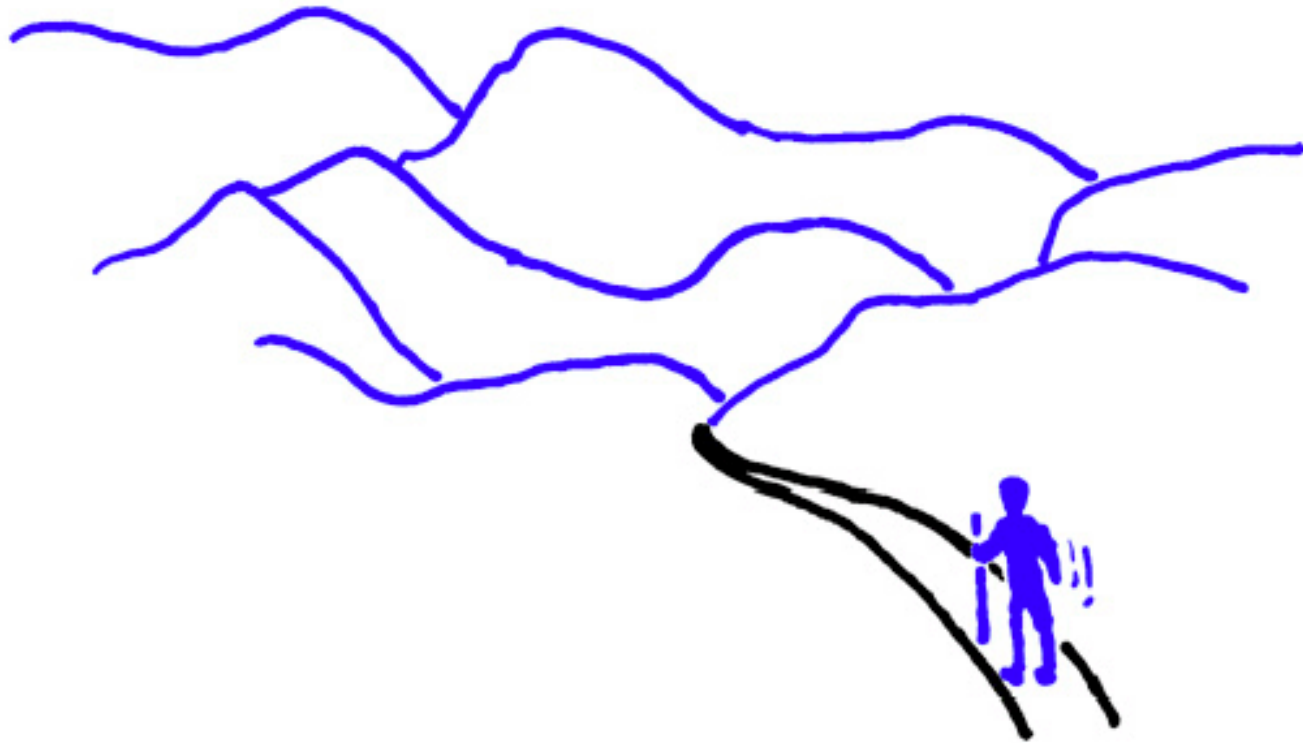
Reduccionismo:
Os sistemas complexos podem ser sempre explicados por redução às suas partes constituintes mais simples.

Gostamos de pensar na MQ como a “teoria de tudo” porque, se se pudessem resolver as equações, poderíamos descrever todas as coisas (Reduccionismo). É claro que o reduccionismo não funciona: há **fenómenos emergentes** não redutíveis.

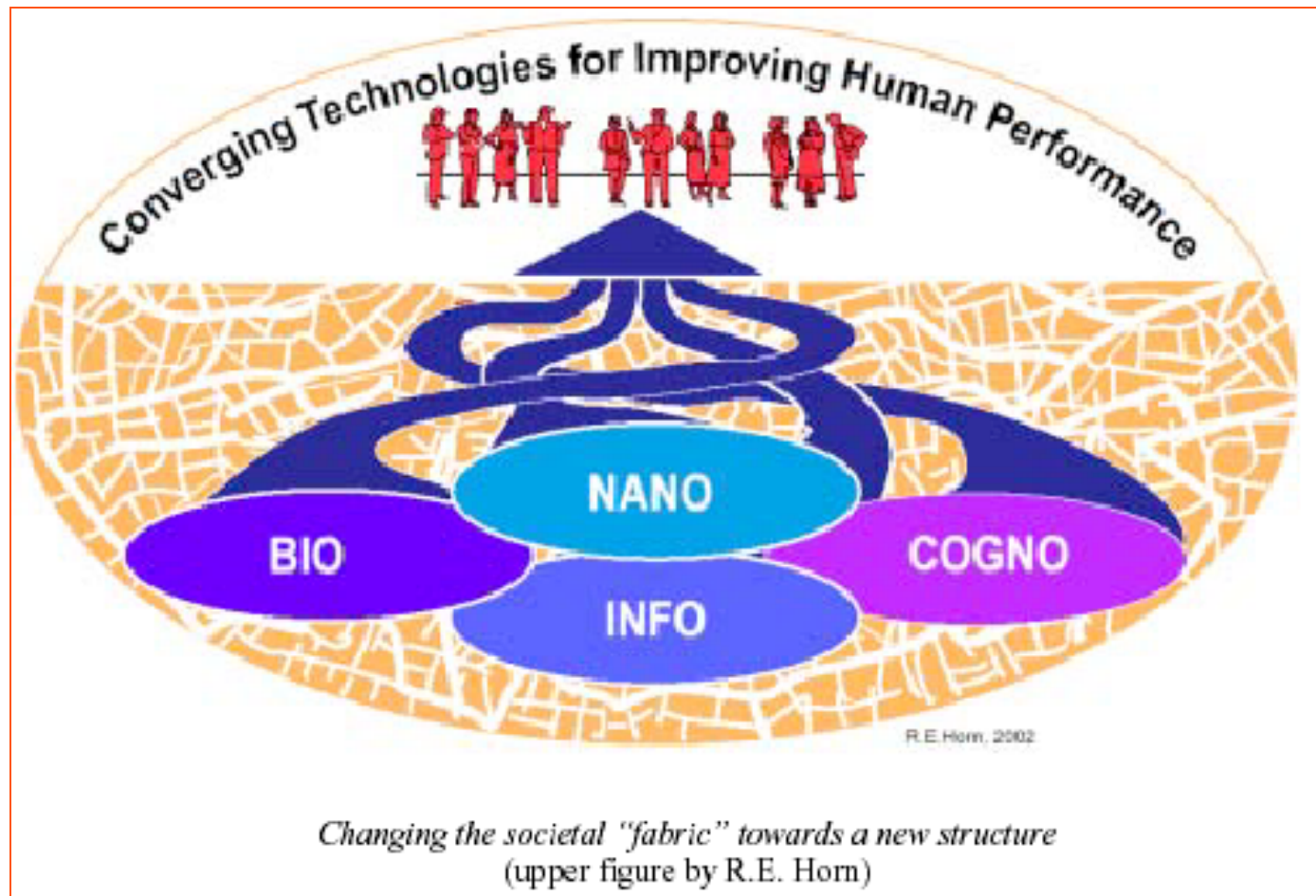
Não chegámos ao fim da ciência, mas sim ao fim do pensamento reducionista.

Robert M. Laughlin

Modern science is the search for new organizing principles
of nature.



They are there, waiting to be discovered!



**Converging Technologies
for Improving Human Performance
NANOTECHNOLOGY, BIOTECHNOLOGY, INFORMATION
TECHNOLOGY AND COGNITIVE SCIENCE**

NSF/DOC-sponsored report

<http://www.wtec.org/ConvergingTechnologies/>

RESUMO

Os fenómenos emergentes são governados por **regras de selecção**, que controlam o modo como os agentes interactuam uns com os outros. Essas regras são muitas vezes expressas em modelos matemáticos.

Um pequeno conjunto de regras simples pode gerar comportamentos de grande complexidade.

Na bio(química-física):

Self-assembly e auto-organização

Interacções intermoleculares

- Interações de van der Waals
- Ligações de hidrogénio
- Interações π - π

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S \leq 0$$

Condição de espontaneidade