**BIOFÍSICA**

La biofísica és la ciència que estudia la biologia amb els principis i mètodes de la física.

Es discuteix si la biofísica és una branca de la física o de la biologia.

Des d'un punt de vista pot concebre's que els coneixements i enfocaments acumulats en la física "pura" poden aplicar-se a l'estudi dels sistemes biològics.

En aquest cas la biofísica li aporta coneixements a la biologia, però no a la física.

Exemples en aquest sentit són:

* La física de l'audició,
* La biomecánica,
* etc.

Altres estudiosos consideren que existeixen branques de la física que han de desenvolupar-se a profunditat com problemes físics específicament relacionats amb les matèria vivent.

Així, per exemple, les polímers biològics (com les proteïnes) no són prou grans com per a poder-los tractar com un sistema mecànic, alhora que no són prou petits com per a tractar-los com molècules simples en solució.

Els canvis energètics que ocorren durant una reacció química catalizada per un enzim, o fenòmens com l'acoblament químic-osmòtic semblen requerir més d'un enfocament físic teòric profund que d'una avaluació biològica.

Entre aquests dos extrems apareixen problemes com la generació i propagació de l'impuls nerviós on es requereix un pensament biològic, més un pensament físic així com alguna cosa qualitativament nou que apareix amb la visió integradora del problema.

Una subdisciplina de la biofísica és la dinàmica molecular, que intenta explicar les propietats químiques de les biomoléculas a través de la seva estructura i les seves propietats dinàmiques i d'equilibri.

Altra subdisciplina que es troba actualment en voga és la Biologia de sistemes, en la qual normalment es renuncia al detall molecular per a tractar d'entendre les interaccions globals dels sistemes vius.

Una qüestió històricament central en la biofísica és la necessitat o no de noves lleis de la física per a explicar les propietats de la matèria viva.

La gran majoria dels autors s'inclina contra el vitalisme, és a dir, consideren que les lleis de la física tal com les coneixem són suficients per a entendre als sistemes biològics.

DINÀMICA MOLECULAR

En química la Dinàmica Molecular (DM) és una tècnica de simulació en la qual es permet que àtoms i molècules interactuin per un període de temps.

En general, els sistemes moleculars són complexos i consisteixen d'un gran nombre de partícules, per la qual cosa seria impossible trobar les seves propietats de forma analítica.

Per a evitar aquest problema, la DM utilitza mètodes numèrics.

Representa un punt intermedi entre els experiments i la teoria.

Pot ser entesa com un experiment en la computadora.

La dinàmica molecular és un camp interdisciplinari.

Les seves lleis i teories provenen de les Matemàtiques, Física i Química.

Empra algorismes de les Ciències de la Computació i Teoria de la informació.

Permet entendre als materials i les molècules no com entitats rígides, sinó com cossos animats.

Originalment va ser concebuda dintre de la física teòrica, encara que avui dia se li utilitza sobretot en biofísica i ciència de materials.

El seu camp d'aplicació va des de superfícies catalíticas fins a sistemes biològics.

Aquesta tècnica presenta un compromís entre cost computacional i fiabilitat en els resultats, ja que s'utilitzen les Equacions de Newton, que són menys costoses que les de la mecànica quàntica.

És per això que moltes propietats que poden resultar d'interès, com per exemple la formació o ruptura d'enllaços no puguin ser estudiades mitjançant aquest mètode ja que no contempla estats excitats o reactividad.

Existeixen mètodes híbrids denominats QM/MM (Quantum Mechanics/Molecular Mechanics) en els quals un centre reactiu és tractat de manera quàntica mentre que l'ambient que ho envolta es tracta de manera clàssica.

El desafiament en aquest tipus de mètodes resulta en la definició de manera precisa de la interacció entre les dues formes de descriure el sistema.

Sabem que la matèria està constituída de partícules en moviment i interacció almenys des de l'època de Boltzmann en el segle 19.

Però molts encara s'imaginen a les molècules com els models estàtics d'un museu.

Richard Feynman va dir en 1963 que "*tot el que fan els éssers vius pot ser entès a través dels salts i contorsions dels àtoms*."

1 Una de les contribucions més importants de la dinàmica molecular és crear consciència que el DNA i les proteïnes són màquines en moviment.

Se la utilitza per a explorar la relació entre:

* estructura,
* moviment
* i funció.

També se li ha anomenat "estadística mecànica numèrica" o "la visió de Laplace de la mecànica Newtoniana", en el sentit de predir el futur a l'animar les forces de la naturalesa.

Resulta temptador pensar que la DM és com un microscopi virtual.

No obstant això, les simulacions llargues estan malament condicionades, la qual cosa genera errors numèrics acumulatius.

Això vol dir que hem d'abandonar la il·lusió que estem seguint el comportament real d'una molècula en el temps.

De qualsevol forma, la dinàmica molecular ens permet explorar el seu comportament representatiu en l'espai fase.

 Exemple de de una simulacion d'un sistema simple pel metodo de dinamica molecular:

Deposicio d'un atomo de Cu en una superfície de Cu (001) .

Cada cercle il·lustra la posicio d'un atom; noti que les veritables interaccions atomicas usades en simulacion són mes complexes que les bidimensionals mostrades en la figura.

El resultat d'una simulació de dinàmica molecular són les posicions X i velocitats V de cada àtom de la molècula, per a cada instant en el temps.

A això se l’anomena trajectòria.

Principis físics

Conjunt microcanónic (NVE)

La forma més simple de dinàmica molecular ocorre en el conjunt microcanónic.

En ell, el sistema està aïllat:

El seu volum no s'altera (V)

I no intercanvia massa (N)

Ni energia (I) amb l'entorn.

Per a un sistema de N partícules amb coordenades X i velocitats V, es pot plantejar el següent parell d'equacions diferencials de primer ordre

La funció d'energia potencial O(X) són:

* Les atraccions
* Repulsions

que senten els àtoms entre si a causa de els enllaços químics, interaccions electrostàtiques, van der Waals, etc. de les molècules.

A O(X) també es coneix com camp de força i és una funció de les coordenades de les partícules X.

Normalment prové de càlculs de química quàntica i/o experiments espectroscópics.

No obstant això, el camp de força generalment té una forma funcional que ho fa pertànyer a la mecànica clàssica.

La trajectòria de les partícules és discreta en el temps.

Normalment es tria un pas de temps suficientment petit (p. ex. 1 femtosegundo) per a evitar errors numèrics de discretizació.

Per a cada pas de temps, s'integra la posició X i velocitat V amb un mètode simpléctico com la integració de Verlet.

Donades les posicions inicials (p. ex. l'estructura de RAJOS X d'una proteïna) i les velocitats inicials (p. ex. aleatòries i Gaussianes), és possible calcular totes les posicions i velocitats en el futur.

BIOLOGIA DE SISTEMES

La biologia de sistemes és un àrea d'investigació científica que es preocupa de l'estudi de processos biològics usant un enfocament sistémic.

La biologia de sistemes va començar a desenvolupar-se en els anys seixanta del segle XX, si bé la seva institucionalització acadèmica no es va produir fins a l'any 2000 .

A diferència dels mètodes clàssics d'estudi usats pels biòlegs basats en el mètode científic, que es basen en la confirmació o refutació d'hipòtesi via resultats experimentals, la biologia de sistemes empra fonamentalment la modelització.

Aquestes tècniques sorgeixen fonamentalment de l'ús de models matemàtics que descriuen el comportament de l'ens en estudi. Els models permeten predir el comportament del procés com un sistema dinàmic, generalment tractat com una xarxa complexa.

Els arguments previs indiquen que la Biologia de Sistemes és inherentment un àrea interdisciplinària.

Solen trobar-se, a més de biòlegs i bioquímics, professionals i especialistes en:

Matemàtiques,

Física,

Enginyeria en Control Automàtic

Teoria de Sistemes.

Historia

La biologia de sistemes té les seves arrels en:

• El modelament cuantitatiu de cinètica enzimática, una disciplina que va florir entre 1900 i 1970

• Simulacions desenvolupades per a estudiar neurofisiología,

• Teoria del control i cibernètica

Un dels teòrics que pot ser vist com precursor de la biologia de sistemes és Ludwing von Bertalanffy, per la seva teoria general de sistemes.

En 1952, els neurofisiólogos britànics i els guanyadors del premi nóbel Alan Lloyd Hodgkin i Andrew Fielding Huxley van construir un model matemàtic descrivint l'acció potencial que es propagava a través del axón d'una neurona.

En 1960, Denis Noble desarroló el primer model computacional d'un cor latent.

La dècada de 1960 va veure el desenvolupament de diverses aproximacions a l'estudi de sistemes complexos moleculars, com per exemple l'anàlisi del control metabólic i la teoria de sistemes bioquímics.

L'èxit de la biologia molecular a través de la dècada de 1980, apariat amb una escepticisme cap a la biologia teòrica, van causar que el modelament quantitatiu de processos biològics es conviertis en un camp científic menor.

No obstant això, el naixement de la genòmica funcional en la dècada de 1990 va significar que una gran quantitat d'informació d'alta qualitat es va fer disponible, mentre que el poder computacional explotava, fent els models el més realista possible.

En l'any 1977, el grup de Masaru Tomita puiblicá el primer model quantitatiu del metabolisme del tot d'una cèl·lula hipotètica.

Prop de l'any 2000, quan els instituts de sistemes en biologia estaven sent establerts en Seatrle i Tòquio, la biologia de sistemes va emergir com un moviment en el seu propi dret, esperonat pel:

Acabament de diversos projectes de genoma,

El llarg increment d'informació dels omics (i.g. genòmica i proteòmica)

Els avanços acompañants en experiments així com també en bioinformática.

Des de llavors, diversos instituts d'investigació dedicats a la biologia de sistemes han estat desenvolupats.

Des del 2006, a causa de l'escassesa de gent treballant en biologia de sistemes, diversos doctorats en biologia de sistemes han estat establerts en diverses parts del món.

Aplicacions

Les aplicacions més importants apunten cap a la farmacología i la biotecnologia.