

Chimica e computer

Il Nobel alla simulazione dei sistemi complessi

**Premiati Karplus, Levitt
e Warshel: hanno creato
modelli che spiegano
il comportamento di una
molecola a livello quantistico**

PIETRO GRECO

PREMIO NOBEL PER LA CHIMICA 2013 ALL'AUSTRIACO MARTIN KARPLUS, 83 ANNI; ALL'INGLESE MICHAEL LEVITT, 66 ANNI; E ALL'ISRAELENO ARIEH WARSHEL, 73 ANNI, «per lo sviluppo di modelli multiscala per sistemi chimici complessi». I tre lavorano tutti negli Stati Uniti. La motivazione sembra tecnica. Ma il lavoro dei tre chimici, iniziato negli anni '70 del secolo scorso, premiato a Stoccolma è abbastanza semplice da descrivere. Karplus, Levitt e Warshel hanno messo a punto gli algoritmi giusti per simulare al computer come funzionano i sistemi chimici complessi. Per esempio come, negli organismi viventi, un enzima accelera (anche di milioni di volte) la velocità di una reazione chimica. Esempio nell'esempio: come un lisozima catalizza la formazione degli zuccheri.

Per descrivere sistemi del genere è necessario conoscere non solo la struttura delle molecole coinvolte, ma il modo come «lavorano», per esempio le forma tridimensionale che assumono nel mezzo (in genere acquoso) in cui si trovano e le interazioni fini reciproche. Nei sistemi chimici complessi queste interazioni sono molto numerose, difficili da studiare, sia sul piano teorico che su quello sperimentale.

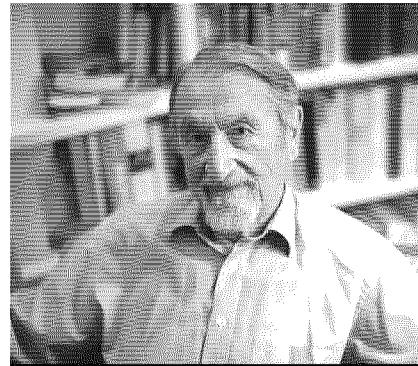
Le novità prodotte dai tre scienziati per riuscire nella difficile impresa sono, sostanzialmente, due. La prima è, in apparenza, molto tecnica. Hanno elaborato modelli misti, quantistici e classici. In pratica Karplus, Levitt e Warshel hanno

trovato gli algoritmi giusti per spiegare il comportamento di una molecola a livello quantistico, a livello dei singoli atomi: il più preciso possibile. Hanno poi spiegato il modo in cui questa molecola interagisce con l'ambiente circostante a livello classico, ovvero con una serie di approssimazioni. Il modello misto, quantistico e classico, è capace di fornire una spiegazione abbastanza fine del comportamento di sistemi chimici complessi.

La seconda novità è molto facile da comprendere. I tre, in buona sostanza, hanno inaugurato il «terzo paradigma» in chimica: ovvero, la simulazione al computer. Per molti secoli la scienza, compresa la scienza chimica, si è fondata su due paradigmi: quelli che Galileo Galilei chiamava le «certe dimostrazioni» (ovvero la teoria, possibilmente matematizzata) e le «sensate esperienze», ovvero i fatti sperimentali. L'avvento, mezzo secolo fa o giù di lì, di una nuova tecnologia, quella informatica, ha consentito un nuovo modo di fare scienza, complementare ai primi due: la simulazione al computer. È questo un «nuovo paradigma», il terzo appunto. La capacità di calcolo del computer consente, da cinquant'anni a questa parte, di «trattare» problemi una volta ritenuti impossibili (causa lentezza di elaborazione degli umani) e di ricostruire ambienti virtuali in cui effettuare degli esperimenti (abbastanza, ma non del tutto) realistici. Si tratta, appunto, di simulazioni.

Grazie a Karplus, Levitt e Warshel i chimici hanno imparato a simulare al computer il funzionamento di sistemi molto complessi. Con ricadute teoriche: come per esempio acquisire informazioni su processi - come le reazioni chimiche - molto complicati che in natura avvengono in tempi velocissimi. E con ricadute pratiche: come, per esempio, studiare tra un'infinità di candidati potenziali la molecola che può meglio svolgere funzioni desiderate. Per esempio, agire da farmaco.

La simulazione al computer è oggi una parte decisiva sia della chimica teorica che della chimica applicata.



Martin Karplus, vincitore del Nobel per la chimica insieme a Michael Levitt e Arieh Warshel
FOTO REUTERS