

Stoccolma

Il Nobel ai tre chimici delle «tecno-molecole»

È un premio Nobel per la chimica inusuale quello assegnato ieri dall'Accademia delle scienze svedesi a tre scienziati tutti americani e docenti negli Stati Uniti ma contemporaneamente con altre nazionalità: Martin Karplus (austriaco) 83 anni, docente ad Harvard; Michael Levitt (britannico e israeliano) 66 anni, insegnante a Stanford e Arieh Warshel (israeliano) 73 anni, professore all'University of Southern California. Ma l'inusuale sta nel fatto che i tre sono ideatori di programmi per computer con i quali progettare e costruire nuove combinazioni di molecole e poi predire, e quindi gestire, i più complicati processi chimici. Oggi le strutture molecolari di un farmaco si possono disegnare in un supercomputer in modo da garantire loro l'effetto desiderato sull'obiettivo. Ma quando si tratta di immaginare e descrivere con precisione i passi delle reazioni chimiche che avvengono, il lavoro si complica

Sul computer

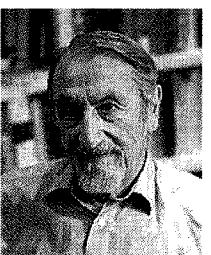
Le loro simulazioni permettono di predire complicati processi chimici

enormemente perché tutto ciò avviene ad altissima velocità, di cui tener conto. Ora, proprio grazie ai supercomputer in grado di macinare miliardi e miliardi di operazioni al secondo, è possibile affrontare il problema che richiede, prima di tutto, enormi potenze di calcolo. Ma in questi processi c'è un altro ostacolo più fondamentale che i

tre scienziati hanno superato nella creazione dei loro programmi e, altrettanto essenziale, per arrivare a un risultato efficace. Per descrivere compiutamente ciò che accade bisogna infatti mettere insieme la fisica classica di Newton con la fisica quantistica, indispensabile in alcuni passaggi chiave delle reazioni. L'impresa non era da poco, ma ci sono riusciti apendo la strada alla comprensione di molti fenomeni finora sconosciuti: dalla fotosintesi clorofilliana in una foglia alla fabbricazione di farmaci più efficaci. Ma il premio è pure inusuale per un altro motivo. Per la prima volta si riconosce anche la determinante importanza della simulazione con i supercomputer nell'aprire nuove frontiere della conoscenza di base.

Giovanni Caprara

© RIPRODUZIONE RISERVATA

**Premiati** Michael Levitt, Martin Karplus e Arieh Warshel