



Nobel Prize in Chemistry 2013

"for the development of multiscale models for complex chemical systems"

Η απονομή

Η Βασιλική Σουηδική Ακαδημία Επιστημών αποφάσισε να απονεμίσει το Βραβείο Νομπέλ Χημείας για το 2013, μαζί με τα 8 εκατομμύρια σουηδικές κορόνες (περίπου 916.000 €) που το συνοδεύουν, στον Αμερικανό – Αυστριακό Μάρτιν Κάρπλους, στον νοτιοαφρικανικής καταγωγής Αμερικανό – Βρετανό Μάικλ Λίβιτ και στον Αμερικανό – Ισραηλινό Αριέχ Βάρσελ για την «ανάπτυξη μοντέλων πολλαπλών κλιμάκων που βοηθούν στην κατανόηση περίπλοκων χημικών συστημάτων».



**Μάρτιν Κάρπλους
(Martin Karplus)**

Γεννήθηκε το 1930 στη Βιέννη (Αυστρία), έλαβε το διδακτορικό του δίπλωμα το 1953 από το Ινστιτούτο Τεχνολογίας της Καλιφόρνιας και σήμερα είναι καθηγητής στα Πανεπιστήμια του Στρασβούργου και του Χάρβαρντ.



**Μάικλ Λίβιτ
(Michael Levitt)**

Γεννήθηκε το 1947 στην Πραιτόρια (Ν. Αφρική). Έλαβε το διδακτορικό του δίπλωμα το 1971 από το Πανεπιστήμιο του Κέμπριτζ και σήμερα είναι καθηγητής στο Πανεπιστήμιο του Στάνφορντ (Stanford, USA).

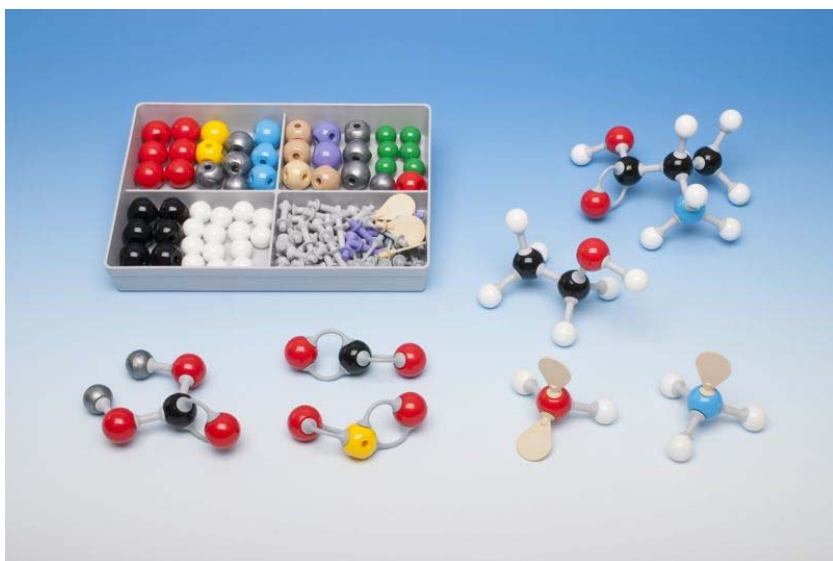


**Αριέχ Βάρσελ
(Arieh Warshel)**

Γεννήθηκε το 1940 στο Kibbutz (Ισραήλ). Έλαβε το διδακτορικό δίπλωμα του το 1969 από το Ινστιτούτο Επιστημών Weizmann (Ισραήλ). Σήμερα είναι διακεκριμένος καθηγητής στο Πανεπιστήμιο της Νότιας Καλιφόρνιας (Los Angeles, USA).

Γιατί η μοντελοποίηση των χημικών διεργασιών είναι τόσο σημαντική;

Οι χημικοί συνηθίζουν να δημιουργούν μοντέλα μορίων χρησιμοποιώντας ως «δομικά υλικά» ειδικές σφαίρες και ραβδάκια από πλαστικό (Σχ. 1). Έτσι, παίρνουν μια ιδέα για το ποιες είναι οι θέσεις των ατόμων στο χώρο που καταλαμβάνει ένα μόριο, για τις γωνίες δεσμών κ.λπ. Σήμερα, αυτή η δημιουργία μοντέλων γίνεται με ακρίβεια από υπολογιστές. Στη δεκαετία του 1970, οι Κάρπλους, Λίβιτ και Βάρσελ έβαλαν τα θεμέλια για την ανάπτυξη πανίσχυρων υπολογιστικών προγραμμάτων όχι μόνο για την κατανόηση, αλλά και για την πρόβλεψη διαφόρων χημικών διεργασιών. Υπολογιστικά μοντέλα που αντικατοπτρίζουν αυτά που συμβαίνουν στην πραγματική μας ζωή έχουν τεράστια σημασία στις περισσότερες προόδους που συντελούνται σήμερα στον χώρο της Χημείας.



Σχήμα 1.
Μοριακά μοντέλα
τύπου σφαίρας – ράβδου
(Molecular models (ball-and-
stick type))

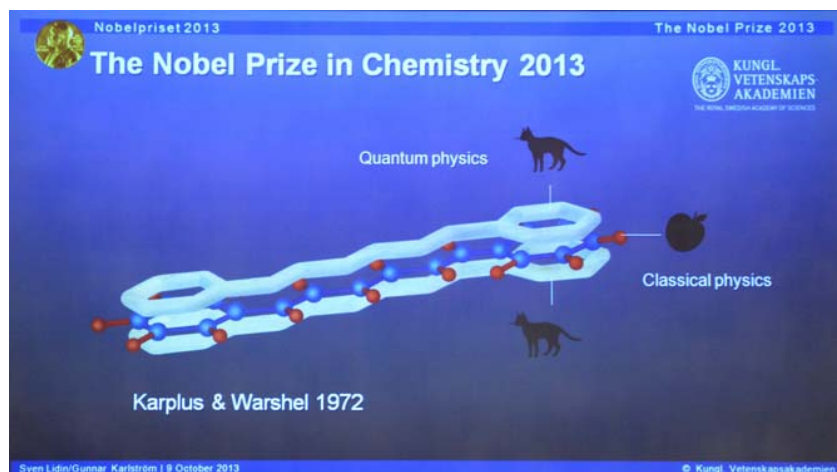
Πολλές χημικές αντιδράσεις γίνονται με ταχύτητα φωτός. Σε κλάσμα ενός χιλιοστού του δευτερολέπτου, ηλεκτρόνια μεταπηδούν από έναν ατομικό πυρήνα σε άλλον. Η κλασική Χημεία αδυνατεί να παρακολουθήσει το τι ακριβώς συμβαίνει. Στην πραγματικότητα είναι αδύνατο να «χαρτογραφηθεί» πειραματικά κάθε μικρό βήμα σε μια χημική διαδικασία. Τώρα, οι επιστήμονες, βοηθούμενοι από τις μεθόδους που ανέπτυξαν οι τιμηθέντες με το Βραβείο Νομπέλ Χημείας, αφήνουν τους υπολογιστές να αποκαλύψουν χημικές διεργασίες, όπως π.χ. ο καταλυτικός καθαρισμός των καυσαερίων ή η φωτοσύνθεση στα πράσινα φύλλα. Μια τέτοια γνώση καθιστά εφικτό τον σχεδιασμό υλικών, όπως νέα φάρμακα, ηλιακοί συσσωρευτές και καταλυτικοί μετατροπείς για οχήματα.

Πού στηρίζεται το επίτευγμα των τριών επιστημόνων;

Οι Κάρπλους, Λίβιτ και Βάρσελ έφεραν κυριολεκτικά επανάσταση, καθώς κατόρθωσαν να δημιουργήσουν μοντέλα που συνδύαζαν δύο μάλλον ασύμβατους κόσμους της Φυσικής: την Κλασική Φυσική του Νεύτωνα που κυβερνά τον μακρόκοσμο και την Κβαντική Φυσική που κυριαρχεί στον μικρόκοσμο. Παλιότερα, όταν οι χημικοί ήθελαν να προσομοιάσουν πολύπλοκες χημικές διεργασίες σε υπολογιστές, είχαν να επιλέξουν ανάμεσα σε λογισμικό βασισμένο σε Κβαντική Φυσική, που εφαρμόζεται σε κλίμακα ενός ατόμου, ή σε Κλασική Νευτώνεια Φυσική, η οποία λειτουργεί σε μεγαλύτερες κλίμακες. Δηλαδή, η ισχύς της

Κλασικής Φυσικής έγκειτο στο ότι οι υπολογισμοί ήταν απλοί και μπορούσαν να εφαρμοσθούν για μοντελοποίηση πραγματικά μεγάλων μορίων. Από το άλλο μέρος, η αδυναμία της ήταν ότι δεν προσέφερε καμία δυνατότητα προσομοίωσης χημικών αντιδράσεων. Για τέτοιους σκοπούς, αντίθετα, οι Χημικοί έπρεπε να χρησιμοποιούν Κβαντική Φυσική. Όμως, τέτοιοι υπολογισμοί απαιτούσαν τεράστια υπολογιστική ισχύ και γι' αυτό μπορούσαν να εφαρμοσθούν μόνο για μικρά μόρια. Η Σουηδική Ακαδημία είπε ότι οι τρεις τιμηθέντες ανέπτυξαν μοντέλα τα οποία «άνοιξαν την πύλη ανάμεσα στους δύο αυτούς κόσμους».

Οι σημερινοί Νομπελίστες πήραν ό,τι καλύτερο από τους δύο κόσμους και επινόησαν μεθόδους που χρησιμοποιούν και τους δύο, την Κλασική και την Κβαντική Φυσική (Σχ. 2). Ενώ η Κβαντική Φυσική είναι περισσότερο ακριβής, είναι αδύνατο να εφαρμοσθεί σε μεγάλα μόρια επειδή οι εξισώσεις είναι υπερβολικά πολύπλοκες για να επιλυθούν. Χρησιμοποιώντας Κβαντική Φυσική μόνο για μέρη – κλειδιά ενός μορίου και Κλασική Φυσική για το υπόλοιπο μόριο, η συνδυασμένη προσέγγιση παρέχει την ακρίβεια της κβαντικής προσέγγισης με διαχειρίσιμους υπολογισμούς. Για παράδειγμα, σε προσομοιώσεις του τρόπου με τον οποίον ένα φάρμακο συνδέεται με την πρωτεΐνη-στόχο στο σώμα μας, ο υπολογιστής εκτελεί κβαντικούς θεωρητικούς υπολογισμούς μόνο για εκείνα τα άτομα της πρωτεΐνης-στόχος τα οποία αλληλεπιδρούν με το φάρμακο. Το υπόλοιπο μέρος της μεγάλης πρωτεΐνης προσομοιώνεται χρησιμοποιώντας τη λιγότερο απαιτητική Κλασική Φυσική.



Σχήμα 2.
Ο συνδυασμός Κλασικής Φυσικής του Νεύτωνα και Κβαντικής Φυσικής.

Αυτή η εικόνα εμφανίζονταν σε μια οθόνη στη διάρκεια της συνέντευξης τύπου που έδωσε η Σουηδική Ακαδημία Επιστημών ανακοινώνοντας τα ονόματα των τιμωμένων με το Βραβείο Νομπέλ Χημείας 2013

Σήμερα, ο υπολογιστής είναι στην πραγματικότητα ένα τόσο σημαντικό εργαλείο για έναν χημικό, όσο ο δοκιμαστικός σωλήνας. Οι προσομοιώσεις είναι πλέον τόσο ρεαλιστικές, ώστε προβλέπουν τα αποτελέσματα παραδοσιακών πειραμάτων.

Πώς προέκυψε η συνεργασία των τριών επιστημόνων;

Στις αρχές της δεκαετίας του 1970, οι Κάρπλους και Βάρσελ συνεργάζονταν στο Χάρβαρντ, όπου και ανέπτυξαν ένα υπολογιστικό πρόγραμμα το οποίο «πάντρεψε» την Κλασική με τη Κβαντική Φυσική.

Ο Βάρσελ, αργότερα, ένωσε τις δυνάμεις του με τον Λίβιτ στο Ινστιτούτο Weizmann (Rehovot, Ισραήλ) και στο Πανεπιστήμιο του Κέμπριτζ, για την ανάπτυξη ενός προγράμματος που θα μπορούσε να εφαρμοσθεί στη μελέτη των ενζύμων.

Πηγές

1. Zany Science, Stockholm, 09.10.13
2. The Nobel Prize in Chemistry 2013,

- The Royal Swedish Academy of Sciences, 09.10.13**
- 3. Εφημερίδα «Το Βήμα», 09.10.2013**
 - 4. Εφημερίδα «Καθημερινή», 09.10.201**
 - 5. Εφημερίδα «Ελευθεροτυπία» 10.10.2013**