

El austríaco Martin Karplus, el sudafricano Michael Levitt y el israelí Arieh Warshel han sido galardonados con el Premio Nobel de Química 2013 por el desarrollo de métodos computacionales, empleando mecánica clásica y cuántica, y su empleo para modelar reacciones y grandes sistemas químicos complejos.

En la década de 1970 los investigadores, galardonados sentaron las bases de los potentes programas que son usados para comprender y predecir procesos químicos, unos modelos informáticos que replican la vida real y que se han convertido en uno de los avances más cruciales para la química actual.

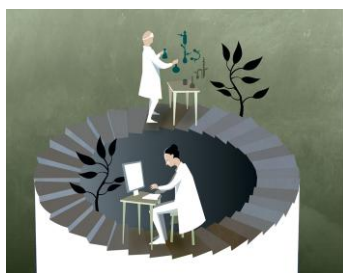


Martin Karplus nació en 1930 en Viena y es profesor emérito en Estados Unidos, en la Universidad de Harvard. Levitt, nacido en 1947 en Pretoria y con ciudadanía estadounidense y británica,

ejerce en la Universidad de Stanford. Warshel nació en 1940 en Sde-Nahum, Israel, y trabaja en la Universidad del Sur de California, Los Angeles.

Actualmente los químicos experimentan tanto en sus equipos como en sus laboratorios. Los resultados teóricos de las computadoras son confirmados por los experimentos reales que producen nuevas pistas sobre cómo funciona el mundo de los átomos. La teoría y la práctica se enriquecen mutuamente.

Las reacciones químicas ocurren a la velocidad del rayo, los electrones saltan entre los núcleos atómicos, ocultos a las miradas indiscretas de los científicos. El premio Nobel de Química 2013 ha permitido cartografiar los misteriosos caminos de la química mediante el uso de computadoras. El conocimiento detallado de los procesos químicos hace posible la optimización de los catalizadores, los medicamentos y las células solares.



Para tener una idea de cómo se puede beneficiar la humanidad de esto, empezaremos con un ejemplo. Pongámonos la bata de laboratorio, porque tenemos un reto que resolver: crear fotosíntesis artificial. La reacción química que se produce en las hojas verdes llena la atmósfera con oxígeno y es un prerrequisito para la vida en la Tierra. Pero también es interesante

desde el punto de vista ambiental. Si pudiéramos imitar la fotosíntesis se podrían crear

células solares más eficientes. Se crea oxígeno cuando se dividen las moléculas de agua, pero también hidrógeno que podría ser utilizado para alimentar nuestros vehículos. Así que hay muchas razones para que nos comprometamos en este proyecto. Si tiene éxito, podríamos contribuir a resolver el problema del efecto invernadero.

Una imagen vale más que mil palabras - pero no para todo

Como primer paso, es buscar y encontrar una imagen tridimensional de las proteínas que rigen la fotosíntesis. Estas imágenes son de acceso libre en las grandes bases de datos en Internet. En el equipo se puede girar y girar la imagen a nuestro gusto. Se dan a conocer moléculas de proteínas gigantescas que contienen decenas de miles de átomos. En algún lugar en el medio, hay una pequeña región llamada centro de reacción. Aquí es donde se separan las moléculas de agua. Sin embargo, sólo unos pocos átomos se ven directamente involucrados en la reacción. Entre otras cosas, se ve cuatro iones de manganeso, un ion de calcio y varios átomos de oxígeno. La imagen muestra claramente cómo están colocados los átomos e iones en relación con cada uno en sí, pero no dice nada acerca de lo que hacen estos átomos e iones. Esto es lo que necesitamos saber

De alguna manera, los electrones deben ser extraídos del agua y cuatro protones tienen que ser atendidos.

¿Cómo se hace eso?

Los detalles de este proceso son prácticamente imposibles de determinar mediante el uso de métodos tradicionales de la química. Muchas cosas suceden en una fracción de milisegundo - una tasa que excluye la mayoría de los tipos de experimentos de laboratorio. A partir de la imagen que tenemos en la computadora, también es difícil adivinar el proceso de reacción, ya que fue tomada cuando las proteínas se encontraban en un estado de reposo. Cuando la luz solar pega sobre las hojas verdes, sin embargo, las proteínas están llenas de energía y toda la estructura atómica se cambia. Para entender la reacción química es necesario saber a que se parece este estado lleno de energía.

Aquí es donde se puede invocar la ayuda de los programas informáticos cuyas bases han sentado los Premios Nobel de Química 2013.

Teoría y práctica - un exitoso intercambio de ideas

El uso de este tipo de software puede calcular varias rutas de reacción plausibles. Esto se llama simulación o modelado. De esta manera podemos tener una idea de lo del papel específico que desempeñan los átomos en diferentes etapas de la reacción

química. Y cuando se tiene un camino de reacción plausible, es más fácil de llevar a cabo experimentos reales que se confirme si el equipo está bien o no. Estos experimentos, a su vez, pueden dar nuevas pistas que llevan a aún mejores simulaciones, la teoría y la práctica se potencian mutuamente. Como consecuencia de ello, los químicos pasan ahora tanto tiempo frente a sus computadoras como con los tubos de ensayo.

Entonces, ¿qué es tan especial acerca de los programas de ordenador que ahora son premiados con el Premio Nobel de Química?

Combinando lo mejor de ambos mundos

Anteriormente, cuando los científicos querían simular moléculas en los equipos con un software basado en las teorías físicas, ya sea clásica newtoniana o la física cuántica. Ambos tenían sus fortalezas y debilidades. Los programas clásicos podrían calcular y procesar grandes moléculas químicas. Pero sólo se mostrarán moléculas en un estado de reposo, pero dio a los químicos una buena representación de cómo se colocan los átomos en las moléculas. Sin embargo, no se pueden utilizar estos programas para simular reacciones químicas. Durante la reacción, las moléculas no solo están llenas de energía, sino que se excitan. La física clásica simplemente no tiene conocimiento de dichos estados, y eso es una limitación grave.

Cuando los científicos querían simular reacciones químicas, tuvieron que recurrir a la física cuántica; la teoría dualista donde los electrones pueden ser a la vez ondas y partículas al mismo tiempo y en el Famoso gato de Schrödinger, oculto en la caja, puede estar a la vez vivo y muerto. La fuerza de la física cuántica es que es imparcial y que el modelo no incluye ningún tipo de prejuicios de los científicos. Por lo tanto estas simulaciones son más realistas. La desventaja es que estos cálculos requieren



enorme potencia de cálculo del ordenador. El equipo tiene que procesar cada electrón individual y cada núcleo atómico en la molécula. Esto puede ser comparado con el número de píxeles en una imagen digital. Muchos píxeles le

darán una alta resolución, pero también requieren más recursos del equipo. Del mismo modo, los cálculos de la física cuántica dan descripciones más detalladas de los procesos químicos, pero requieren equipos potentes. En la década de 1970, esto significaba que los científicos sólo podían realizar cálculos en moléculas pequeñas. Muchos modelos, también se vieron obligados a ignorar las interacciones con el

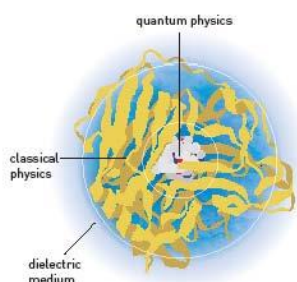
entorno. Sin embargo, si los científicos hubieran querido que el equipo incluyese el disolvente en el cálculo, habrían tenido que esperar décadas para los resultados.

Así, la química clásica y cuántica fueron los dos fundamentalmente diferentes, y en algunos aspectos representaban a mundos rivales. Pero el premio Nobel de Química 2013 ha abierto una puerta entre estos dos mundos. En sus modelos de ordenador, Newton y su manzana colaboran con Schrödinger y su gato.

La química cuántica colabora con la física clásica

El primer paso hacia esta colaboración se dio a principios de la década de 1970 en el laboratorio de Martin Karplus en la Universidad de Harvard en Cambridge, EE.UU. Karplus estaba firmemente arraigado en el mundo cuántico. Su grupo de investigación había desarrollado programas de ordenador que podría simular reacciones químicas con la ayuda de la física cuántica. También había desarrollado la "ecuación de Karplus", que se utiliza en la resonancia magnética nuclear (RMN); un método bien conocido para los químicos que se basa en las propiedades químicas cuántica de las moléculas. Al terminar su doctorado, Arieh Warshel llegó al laboratorio Karplus en 1970. Había recibido su formación doctoral en el Instituto de Ciencia Weizmann en Rehovot, Israel. El instituto tenía un ordenador potente, el Golem, el nombre de una criatura en el folklore judío. Con la ayuda de Golem, Arieh Warshel y Michael Levitt habían desarrollado un programa informático innovador basado en las teorías clásicas. El programa de modelado habilitado de todo tipo de moléculas, moléculas biológicas, incluso muy grandes.

El primer paso hacia esta colaboración se dio a principios de la década de 1970 en el laboratorio de Martin Karplus en la Universidad de Harvard en Cambridge, EE.UU. Karplus estaba firmemente arraigado en el mundo cuántico. Su grupo de investigación



había desarrollado programas de ordenador que podría simular reacciones químicas con la ayuda de la física cuántica. También había desarrollado la "ecuación de Karplus", que se utiliza en la resonancia magnética nuclear (RMN); un método bien conocido

para los químicos que se basa en las propiedades químicas cuántica de las moléculas. Al terminar su doctorado, Arieh Warshel llegó al laboratorio Karplus en 1970. Había recibido su formación doctoral en el Instituto de Ciencia Weizmann en Rehovot, Israel. El instituto tenía un ordenador potente, el Golem, el nombre de una criatura en el folklore judío. Con la ayuda de Golem, Arieh Warshel y Michael Levitt habían desarrollado un programa informático innovador basado en las teorías clásicas. El

programa de modelado habilitado de todo tipo de moléculas, moléculas biológicas, incluso muy grandes.

Cuando Arieh Warshel se unió a Martin Karplus en Harvard, trajo a su ordenador clásico su programa con él. Usando este como punto de partida, él y Karplus comenzaron a desarrollar un nuevo tipo de programa que llevaba a cabo diferentes tipos de cálculos en diferentes electrones. En la mayoría de moléculas cada electrón orbita alrededor de un núcleo atómico en particular. Pero en algunas moléculas, ciertos electrones pueden moverse sin estorbos entre varios núcleos atómicos. Tales "electrones libres" se pueden encontrar, por ejemplo, en la retina, una molécula incrustada en la retina del ojo. Karplus tenía gran interés desde hace mucho tiempo en la retina, para determinar como las propiedades químicas de la molécula cuántica afectaban a una determinada función biológica; cuando la luz golpea la retina, los electrones libres en la retina están llenos de energía, lo que altera la forma de la molécula. Esta es la primera etapa de la visión humana.

Eventualmente Karplus y Warshel manejaron modelos para la retina. Sin embargo, comenzaron con moléculas similares de una estructura más simple. Desarrollaron un programa informático basado en la física cuántica para realizar cálculos sobre los electrones libres, y aplicaron las teorías clásicas más simples para el resto de los electrones y los núcleos atómicos. En 1972, publicaron sus resultados. Esta fue la primera vez que alguien se las había arreglado para llevar a cabo una colaboración químicamente relevantes entre la física clásica y la cuántica. El programa fue innovador, pero tenía una limitación. Sólo podía manejar moléculas con simetría especular.

Hasta qué punto las simulaciones nos permitirán decidir en el futuro

El hecho de que los científicos de hoy en día pueden usar las computadoras para llevar a cabo experimentos ha dado una comprensión mucho más profunda de cómo juegan los procesos químicos. La fuerza de los métodos que Martin Karplus, Michael Levitt y Arieh Warshel han desarrollado reside en que son universales. Pueden ser utilizados para estudiar todos los tipos de química, a partir de las moléculas de la vida a los procesos químicos industriales. Los científicos pueden optimizar las células solares, los catalizadores en los vehículos de motor o incluso drogas, para señalar sólo algunos ejemplos.

El progreso no se detiene ahí, sin embargo. En una de sus publicaciones, Michael Levitt escribe sobre uno de sus sueños: para simular un organismo vivo a un nivel molecular. Es una idea tentadora. Los modelos de computadora que han sido desarrollados por los Premios Nobel de Química 2013 son herramientas poderosas.

.