

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'ISRAELIANO 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 forme tridimensionali 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 simula-



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

zione 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.



E in contemporanea a Francoforte si svolge la «Buchmesse», la fiera internazionale del libro

La Siria o l'America? Quale scrittore sceglierà l'Accademia di Svezia?

Letteratura Tanti i candidati, da Roth a Dylan. Oggi il vincitore del Premio più importante del mondo

MARIA SERENA PALIERI
spalieri@tin.it

È DA UNA ROSA DI CINQUE FINALISTI CHE L'ACCADEMIA DI SVEZIA IN QUESTE ORE STA SCEGLIENDO LO SCRITTORE - romanziere, drammaturgo, poeta, saggista - che verrà insignito del premio Nobel 2013 per la Letteratura. L'annuncio alle ore 13 di oggi. 195 i candidati di quest'anno, dalla «A» di Adonis, il poeta ottantatreenne nato ad Al Qassadin, da sempre in lizza ma oggi rilanciato dal dramma del suo Paese, la Siria, alla «Z» del ben più giovane Ghassan Zaqtan, palestinese, in pectore già vincitore del Neustadt International Prize for Literature 2014 / University of Oklahoma, il cosiddetto Nobel americano.

Perché è ben noto che sulla scelta degli accademici pesa, eccome, la componente politica: nella cosiddetta triade che ha fatto grande la letteratura israeliana, Grossman-Oz-Yehoshua è per esempio da sempre il secondo che è candidato, perché il meno sospetto di sionismo, come fondatore di Peace Now. La presidenza Bush ha fatto escludere invece per alcuni anni gli Usa: si fossero pure spese, come ha fatto Philip Roth, righe di annichito scandalo nei propri romanzi, non bastava, l'etichetta di «americano» concimava la *conventio ad excludendum*. Mentre questioni squisitamente interne dettano preclusioni come quella verso il grande svedese Per Olov Enquist.

Ma, se guardiamo all'elenco di nomi che circola - candidati da sempre, candidati che si aggiungono nell'anno - vediamo poi pesare le motivazioni più squisitamente letterarie, la «mediaticità» - e qui pesa il ruolo dei bookmakers londinesi che da un paio di decenni raccolgono scommesse sui «cavalli» del Nobel - e infine l'amor di patria, che porta di paese in paese a valorizzare i candidati nazionali. Ed ecco allora una possibile lista: il giapponese Haruki Murakami, il coreano Ko Un, l'algerina Assia Djebar, il keniano Ngũgĩ wa Thiong'o, il somalo Nuruddin Farah, gli statunitensi Philip Roth, Thomas Pynchon, Don DeLillo, Joyce Carol Oates, Cormac McCarthy, le canadesi Margaret Atwood e Alice Munro, il britannico John Le Carré, il francese Yves Bonnefoy, l'irlandese William Trevor, lo spagnolo Javier Marías, l'ungherese Peter Nadas, lo svedese Jon Fosse, per l'Italia Claudio Magris, Dacia

Maraini e Umberto Eco. Domande: può vincere un poeta, e può vincere uno scandinavo, a distanza di soli due anni da Toma Tranströmer? Qual è l'area geopolitica che gli accademici vogliono valorizzare? E aggiungeranno una tredicesima donna al mazzolino di nomi femminili inalberato dal Nobel nei suoi 106 anni di storia?

Tra i cosiddetti «Diciotto», ovvero i membri dell'Accademia di Svezia nominati a vita, sono sei i prescelti quest'anno a formare il Comitato che sceglie il vincitore: Per Wästberg, Horace Engdahl, Kjell Espmark, Katarina Frostenson, Kristina Lugn e Peter Englund. Le candidature arrivano da istituzioni e accademie dei singoli Paesi, ma anche dai Nobel degli anni precedenti. Ovvero da gruppi autocostituiti alla bisogna, come il duo Allen Ginsberg-Gordon Ball che nel 1997 candidò per la prima volta Bob Dylan, il «menestrello» che ricompare periodicamente e che, nella sua scia, ha coinvolto altri colleghi, Leonard Cohen e quest'anno - ma la faccenda è alquanto pasticciata - Roberto Vecchioni. Un ruolo esterno, in tutt'altra location, lo giocano appunto i bookmakers londinesi. E non c'è volta che ci azzecchino... Ma se si vuole scoprire quanta farragine e quanta capricciosità (con sorprendenti venature di diletantismo) si celino dietro la facciata del Premio Più Importante del Mondo, leggete *La letteratura italiana e il premio Nobel*, serissimo excursus dietro le quinte di Enrico Tiozzo, uscito nel 2009 per Leo S. Olschki.

IL FESTIVAL

Da oggi a Roma «Eurovisioni»

Si apre oggi a Roma la nuova edizione di «Eurovisioni» festival internazionale di cinema e di televisione, tra le sedi di Palazzo Farnese e Villa Medici. Il tema di quest'anno sarà «Rafforzare il servizio pubblico di fronte alla tempesta digitale» e durante le giornate del convegno parteciperanno tra gli altri Francesco Posteraro, Roberto Zaccaria, Sergio Zavoli e Luigi Gubitosi, direttore generale Rai. Nella serata dell'inaugurazione alle ore 20 all'Ambasciata di Francia verrà proiettata l'anteprima del film di Denis Malleval *L'escalier de fer* tratto da un romanzo di Georges Simenon alla presenza del figlio dello scrittore



«Literary Lennon» la mostra a Bologna

🕒 Ieri avrebbe compiuto 73 anni e in America la festa clou si è svolta a Hollywood davanti alla stella che ricorda il talento geniale e assoluto. Mentre al Museo della Musica di Bologna, fino al 20 ottobre, c'è la mostra «Literary Lennon», a cura di Antonio Taormina ed Enzo Gentile, che racconta il John letterato tra poesie e libri.