



QUÍMICA

Nobel por simular las reacciones por ordenador

Karplus, Levitt y Warshel lograron imitar procesos biológicos

ALICIA RIVERA
Madrid

Tres científicos que trabajan en EE UU reciben el Premio Nobel de Química 2013 por el desarrollo, en los años setenta, de la química computacional avanzada que permite simular en ordenadores reacciones químicas complejas, incluso sistemas biológicos. Martin Karplus, Michael Levitt y Arieh Warshel, químicos teóricos, "sentaron las bases de los potentes programas que se utilizan para comprender y predecir los procesos químicos", destacó ayer la Real Academia Sueca de Ciencias. Y añadió: "Los modelos de ordenador que imitan la vida real son cruciales para la mayoría de los avances de la química actual".

Estos modelos avanzados que ellos empezaron a crear hace 40 años "son herramientas que permiten predecir la realidad, si una reacción va a ocurrir o no... incluso se utilizan para inventar materiales, o fármacos con propiedades nuevas", comenta el experto español Fernando Martín, profesor de la Universidad Autónoma de Madrid. También se utilizan estas potentes herramientas, como aplicación indirecta, para investigar, por ejemplo, cómo responden determinadas proteínas a contaminantes o a fármacos.

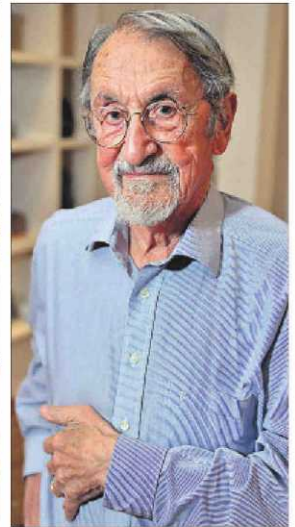
"Actualmente estos modelos tienen tal poder predictivo que puedes hacer experimentos de química en ordenador en lugar del laboratorio convencional", señala Martín.

Los tres científicos galardonados tienen nacionalidad estadounidense, pero ninguno de ellos nació en su país de adopción: Karplus es austriaco de nacimiento (1930); el británico Levitt nació en Sudafrica (1947) y Warshel, en Israel (1940).

"Los trabajos de Karplus, Levitt y Warshel son fundamentales ya que lograron que la física clásica de Newton funcionase junto con la fundamentalmente diferente física cuántica", destacó la Academia sueca.

El primer paso en esta dirección lo dio Karplus, en la Universidad de Harvard, al que, en 1970, se unió Warshel, que había trabajado con Levitt en Israel. En Harvard empezaron a desarrollar un nuevo tipo de programas y publicaron, en 1972, sus resultados: "Por primera vez alguien había logrado una colaboración química relevante entre la física clásica y la cuántica", señala la Fundación Nobel. Dos años después, Warshel volvió a trabajar con Levitt y, en 1976, publicaron el primer modelo computacional de una reacción enzimática.

"Se trata de hacer química en



Arieh Warshel (al teléfono), Martin Karplus (arriba) y Michael Levitt, premios Nobel de Química. / REUTERS / AP

Estas técnicas han permitido la modelización completa del VIH

el ordenador", resume Modesto Orozco, catedrático de la Universidad de Barcelona e investigador del Instituto de Investigación en Biomedicina. La biocomputación, "nos ha dotado, por ejemplo, de la capacidad de entender cómo son, cómo se mueven y cómo interaccionan las proteínas", continúa. "Esto permite abordar el diseño racional de fármacos en lugar del método tradicional de sintetizar guía-

dos por el azar o la intuición decenas de miles de compuestos".

Orozco, además, es el director del Departamento de Ciencias de la Vida del Centro Nacional de Supercomputación, en Barcelona, y destaca que precisamente los cálculos de dinámica molecular son los que más tiempo de cálculo consumen en el superordenador *Marenostrum*, como en muchos otros superordenadores del mundo. Esto permite, añade Orozco, "ver las proteínas como son, como máquinas nanoscópicas en constante movimiento". Destaca como un logro reciente de ese tipo de supercomputación química la modelización completa del virus que causa el sida, el VIH, con decenas de millones de áto-

mos, o la representación del plegamiento de proteínas.

"La descripción de un sistema químico y un sistema biológico se puede hacer a priori, a partir de las leyes de la mecánica cuántica con gran precisión, pero en la práctica, el cálculo es tan costoso que solo se puede hacer con sistemas relativamente pequeños", explica Orozco. La aportación de Karplus, Levitt y Warshel "fue usar la física clásica aproximándola a la física cuántica y lograr una buena descripción de los sistemas con un coste computacional moderado. Sus trabajos permiten ajustar las leyes clásicas para reproducir el comportamiento de los sistemas según las leyes cuánticas y, a partir de ahí, estudiar sistemas químicos y biológicos de enorme tamaño, obteniendo sobre ellos información de una calidad y detalle impensable".