

## KIMIKA

**Martin Karplus**

Austrian jaioan, 1930ean. Estatu Batuetara emigratu zuen familiarekin ume zela. Harvard Unibertsitateko Kimikako irakasle emeritua da, eta baita Estrasburgoko Unibertsitateko irakaslea ere. ARG.: STEPHANIE MITCHELL/HARVARD UNIBERTSITATEKO ARGAZKILARIA.

**Michael Levitt**

Hegoafrikan jaioa, 1947an. Biofisikaria, Londreseko King's College-n egin zituen ikasketak. Stanford Unibertsitateko Medikuntza Eskolako irakaslea da gaur egun. ARG.: L.A. CICERO/STANFORD UNIBERTSITATEA.

**Arieh Warshel**

Israelen jaioan, 1940an. Israelgo Weizmann Zientzia Institutuan egin zituen ikasketak, eta hainbat urtez lan egin zuen bertan. 1976tik, Kaliforniako Hegoaldeko Unibertsitateko irakaslea da. ARG.: MIRA ZIMET/KALIFORNIAKO HEGOALDEKO UNIBERTSITATEA.

**Martin Karplus, Michael Levitt eta Arieh Warshel**

*“Sistema kimiko konplexuentzat multieskala-ereduak garatzeagatik”*

Erreakzio kimikoak ordenagailu bidez simulatzeko programak garatzen egin dute lan hiru sarituek. Gaur egun, kimika laborategietako ohiko tresna dira programa horiek, eta haien bidez simulatzen dira era guztietako erreakzio eta prozesu kimikoak, industrialak eta biologikoak. Programa horiek Karplusek, Levittek eta Warshel 1970eko hamarkadan egindako lan iraultzailearen emaitza dira.

Iraultza fisika klasikoak eta fisika kuantikoa programa berdinean bateratzea izan zen. Izan ere, ordura arte, edo fisika klasikoan oinarritzen ziren programak, edo fisika kuantikoan oinarritzen zirenak aukeratu behar zituzten kimikariek. Eta bakoitzak bere abantailak eta mugak zituen.

**BI MUNDUEN ONENA**

Karplusek, Levittek eta Warshelek bi munduen onena bildu zuten programa bakarrean. 1976an argitaratu zuten emaitza: programak fisika kuantikoaren ereduak aplikatzen zituen molekularen gune aktiboan, erreakzio kimikoa gertatzen den gunean, eta, fisika klasikoaren ereduak aktiboak ez diren molekularen beste eremuetan. Horrela, arrazoizko denbora eta ahalmen konputazionala baliatuz, erreakzio eta prozesu kimikoak ordenagailuan simulatzeko bidea ireki zuten.

Fisika klasikoak eta fisika kuantikoak Harvard Unibertsitatean egin zuten topo, 1970ean, Levitt Israeletik Estatu Batuetara mugitu eta Karplusen laborategian hasi zenean. Karplusen taldeak fisika kuantikoan oinarritutako ordenagailu programak garatuak zituen, erreakzio kimikoak simulatzeko. Levittek, berriz, fisika klasikoan oinarritutako programa bat garatu zuen Israelen —gaurko hirugarren saritu Warshelekin batera— era guztietako molekulek ereduak egiteko gai zena, baita oso molekula biologiko handienak ere.



IRUDIA: JOHAN JARNESTAD/SUEDIAKO ZIENTZIEN ERREGE-AKADEMIA.

1970 eta 1972 artean, elkarrekin lanean aritu ziren Karplus eta Levitt, eta erretinako retinal molekula (A bitaminaren aldaera bat) eredu hartuta, molekula hura eta, oro har, ispilu simetria zuten molekulak simulatzeko lehen programa mistoa garatu zuten. Hurrengo pausoa, eta behin-betikoa, Levittek eta Warshelek eman zuten, 1972an Cambridgen berriz elkartu eta gero. Entzimak hartu zituzten aztergai, eta, oraingoan bai, unibertsala zen programa bat garatzea lortu zuten erreakzio entzimatikoko baten lehen ordenagailu-eredua egiteko. Programa haren oinarriak dira gaur egun erabiltzen direnak. ●