



## De lyfte kemin till virtuella rymder

Förr använde kemister plastkuler och pinnar när de byggde sina molekylmodeller. Idag har modellerandet flyttat in i datorer. Martin Karplus, Michael Levitt och Arieh Warshel lade på 1970-talet grunden till de kraftfulla program som numera används för att förstå och förutspå komplexa kemiska förlopp. Verklighetstroga datormodeller har blivit avgörande för de flesta framsteg som görs inom kemin.

Idag är det ofta virtuella beräkningar som avslöjar hur en kemisk reaktion går till, exakt hur varje liten elektron, proton och atom beter sig under en annars blixtnabb process. Med hjälp av datorn kartlägger kemister olika reaktioner på en extremt detaljerad nivå. Det kan handla om allt från hur ett läkemedel binder till sitt målprotein i kroppen, till att förstå växters fotosyntes eller hur celler genererar energi i sina kraftverk, mitokondrierna.

Storheten i Martin Karplus, Michael Levitts och Arieh Warshels arbete ligger i att de lyckades öppna en dörr mellan två av fysikens stora teoribyggen: Newtons klassiska fysik och Schrödingers kvantmekanik. Tidigare rivaliserade de två teorierna. Idag kan kemister utnyttja det bästa av de två världarna i sina datormodeller.



**Nutid – Datorn kan förutspå reaktioner**  
Sammansmältningen mellan de två världarna har revolutionerat kemin. Idag får kemister lika mycket kunskap från virtuella experiment i sina datorer, som de får från experiment på laboratoriet. Datorn visar hur en kemisk reaktion troligtvis går till. Dessa teorier testas genom riktiga experiment, som leder till ny kunskap, som leder till bättre simuleringar.

**1975 – En förenkling av den klassiska fysiken**  
I stället för att genomföra beräkningar på varje atom för sig, slog Levitt och Warshel ihop flera atomer i de klassiska beräkningarna. Förenklingen sparade datorkraft, utan att skärpan i modellerna gick förlorad.

**Förr – Newton för stora molekyler i vila**

Forskare kunde använda Newtons klassiska fysik för att modellera riktigt stora molekyler. Ekvationerna var så enkla att till och med 1970-talets datorer räckte till. Men Newtons fysik kan inte beskriva hur kemiska bindningar bildas och bryts. Molekylerna modellerades därför alltid i vila.

**1976 – Samarbetet blir permanent**

Warshel och Levitt får till ett samarbete mellan den klassiska fysiken och kvantfysiken som fungerar för all form av kemi. Det går därmed att simulera kemiska händelser i riktigt stora molekyler, till exempel i kroppens alla proteiner. I händelsernas centrum, där det krävs detaljrikedom, räknar forskare med kvantfysik. Mindre intressanta delar av molekylen modellerar de med den grovare klassiska fysiken.

**1972 – Ett första trevande möte**

Karplus och Warshel modellerade för första gången molekyler med både klassisk fysik och kvantfysik. Det var ett stort steg, men metoden de utvecklade hade en begränsning: den gick enbart att använda på så kallade symmetriska molekyler.

**Förr – Kvantfysik för små aktiva molekyler**

När forskare skulle simulera kemiska reaktioner eller andra processer, använde de sig av kvantfysiken; den dualistiska teori där Schrödingers märkliga katt kan vara både död och levande i sin låda. Kvantfysikens ekvationer kräver en enorm datorkraft. Därför gick det bara att simulera små molekyler, vilket var en svaghet.

Klassisk fysik

Kvantfysik

Proteinmolekyl

**Michael Levitt**  
Amerikansk, brittisk och israelisk medborgare. Född 1947 i Pretoria, Sydafrika. Robert W. and Vivian K. Cahill Professor in Cancer Research vid Stanford University School of Medicine, Stanford, CA, USA.

**Arieh Warshel**  
Amerikansk och israelisk medborgare. Född 1940 i Kibbutz Sde-Nahum, Israel. Distinguished Professor vid Université de Strasbourg, Frankrike och Theodore William Richards Professor of Chemistry, Emeritus vid Harvard University, Cambridge, MA, USA.

**Martin Karplus**  
Amerikansk och österrikisk medborgare. Född 1930 i Wien, Österrike. Professeur Conventionné vid Université de Strasbourg, Frankrike och Theodore William Richards Professor of Chemistry, Emeritus vid Harvard University, Cambridge, MA, USA.

