

Nobelpriset i kemi 2013

Kungl. Vetenskapsakademien har beslutat utdela Nobelpriset i kemi 2013 till

Martin Karplus,

Université de Strasbourg, Frankrike och
Harvard University, Cambridge, MA, USA

Michael Levitt

Stanford University School of Medicine,
Stanford, CA, USA

Arieh Warshel

University of Southern California,
Los Angeles, CA, USA

"för utvecklandet av flerskalemodeller för komplexa kemiska system"

Datorn – visar vägen i atomernas värld

Förr använde kemister plastkuler och pinnar när de byggde sina molekylmodeller. Idag har model-
lerandet 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 kemiska förlopp. Verklighets-
trogna datormodeller har blivit avgörande för de flesta framsteg som görs inom kemin.

Kemiska reaktioner sker blixtnabbt. Inom loppet av en bråkdel millisekund hoppar elektroner från en atom till en annan. Klassisk kemi har svårt att hänga med i det tempot; det är i princip omöjligt att experimentellt kartlägga varje litet steg i ett kemiskt förlopp. Med hjälp av de metoder som nu belönas med Nobelpriset i kemi, låter forskare istället datorer åskådliggöra kemiska händelser, såsom avgasrening med katalysatorer eller fotosyntesen i gröna blad.

Martin Karplus, Michael Levitts och Arieh Warshels arbeten var banbrytande eftersom de lyckades få Newtons klassiska fysikaliska lagar att samarbeta med den fundamentalt annorlunda kvantfysiken. Tidigare hade kemister ställts inför valet att använda antingen eller. Den klassiska fysikens styrka var att beräkningarna var enkla och gick att använda för att modellera riktigt stora molekyler. Begränsningen var att de inte klarade av att simulera kemiska reaktioner. Den som ville följa ett förlopp, fick istället använda kvantfysiken. Men dessa beräkningar krävde en enorm datorkraft och gick därför bara att använda på små molekyler.

Årets Nobelpristagare i kemi tog det bästa av de två världarna och utarbetade metoder som nyttjar både klassisk fysik och kvantfysik. I en simulering av hur ett läkemedel kopplar till sitt målprotein i kroppen, låter en kemist numera datorn räkna med kvantfysik på de atomer i målproteinets växelverkar med läkemedlet. Resten av det stora proteinet får datorn istället behandla med mindre krävande klassisk fysik.

Idag är datorn ett lika viktigt experimentellt verktyg för kemister som provröret. Simuleringar är så verklighetstroga att de till och med kan förutspå utfallet av traditionella experiment.

Martin Karplus, amerikansk och österrikisk medborgare. Född 1930 (83 år) i Wien, Österrike. Fil.dr 1953 vid California Institute of Technology, CA, USA. Professeur Conventionné, Université de Strasbourg, Frankrike och Theodore William Richards Professor of Chemistry, emeritus, Harvard University, Cambridge, MA, USA.

<http://chemistry.harvard.edu/people/martin-karplus>
<http://www-isis.u-strasbg.fr/biop/start>

Michael Levitt, amerikansk, brittisk och israelisk medborgare. Född 1947 (66 år) i Pretoria, Sydafrika. Fil.dr 1971 vid University of Cambridge, Storbritannien. Robert W. and Vivian K. Cahill Professor in Cancer Research, Stanford University School of Medicine, Stanford, CA, USA.

http://med.stanford.edu/profiles/Michael_Levitt

Arieh Warshel, amerikansk och israelisk medborgare. Född 1940 (72 år) i Kibbutz Sde-Nahum, Israel. Fil.dr 1969 vid Weizmann Institute of Science, Rehovot, Israel. Distinguished Professor, University of Southern California, Los Angeles, CA, USA.

<http://chem.usc.edu/faculty/Warshel.html>

Prissumma: 8 miljoner svenska kronor, delas lika mellan pristagarna.

Mer information: <http://kva.se> och <http://nobelprize.org>

Kontaktperson: Perina Stjernlöf, pressansvarig/redaktör, tel. 08-673 95 44, 070-673 96 50, perina.stjernlof@kva.se

Kungl. Vetenskapsakademien, stiftad år 1739, är en oberoende organisation som har till uppgift att främja vetenskaperna och stärka deras inflytande i samhället. Akademien tar särskilt ansvar för naturvetenskap och matematik, men strävar efter att öka utbytet mellan olika discipliner.