



# HIGHLIGHTS LA CHIMICA ALLO SPECCHIO

di Claudio Della Volpe - [claudio.dellavolpe@unitn.it](mailto:claudio.dellavolpe@unitn.it)

## Chimica multiscala

Quest'anno il premio Nobel per la Chimica si è tenuto lontano dalle polemiche pro e contro la biochimica che hanno caratterizzato le assegnazioni precedenti ed è riuscito in una sintesi notevole. È andato a congiuntamente a Martin Karplus, Michael Levitt e Arieh Warshel "for the development of multiscale models for complex chemical systems", ossia per lo sviluppo di modelli multiscala per sistemi chimici complessi.



La maggior parte dei giornali scritti dai soliti *ignorantisti* scientifici, pur riportando la motivazione ha volgarizzato l'evento in modo del tutto inaccettabile: «"Con i loro studi hanno "insegnato" la chimica ai computer"»; oppure «"I computer - scrive il comitato di Stoccolma - oggi sono diventati importanti per un chimico quanto le provette"», da *La Repubblica* del 9 ottobre.

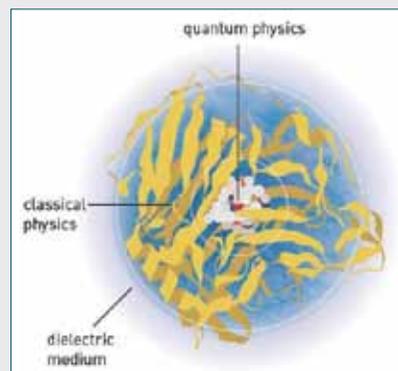
Una boiata pazzesca, visto che a parte che la frase esatta del testo della motivazione è: "This is just one of the aspects of how computers and theoretical models (sottolineatura dell'autore, ndr) have become essential tools for the experimental chemist" il contesto della motivazione è del tutto diverso.

Si tratta qui di capire cosa hanno fatto i tre autori e perché hanno ricevuto il premio e questo ha poco a che fare con il computer come tale, anzi direi che nasce esattamente dal fatto che il computer non è ancora capace di fare tutto. Il concetto di multiscala è comune a varie discipline e nasce dalla necessità di far lavorare insieme teorie che sono state sviluppate *ad hoc* per certi contesti. Per esempio un materiale appare regolato da teorie nate nel contesto della concezione continua della materia, ma di fatto poi è costituito da molecole ed atomi ed a loro volta tali molecole ed atomi sono tenute insieme da forze che originano nella struttura quantistica della materia; come si mettono insieme concezioni e teorie pre-atomiche, atomiche e quantistiche? Ecco questo è il multiscala.

Ce ne sono ovviamente di esempi anche in contesti diversi: l'uomo come animale sociale, come si tengono le teorie dell'individuo, la biologia dell'individuo ed i suoi meccanismi ormonali ed enzimatici con le relazioni sociali e politiche?

Il clima della terra nasce da fenomeni a scala microscopica e territoriale ma oggi lo affrontiamo con calcoli la cui griglia è di centinaia di chilometri quadrati e siamo costretti a parametrizzare molti fenomeni a scala minore. Nel caso specifico i tre autori hanno consentito di superare i limiti

di potenza dei moderni computer che non sono ancora capaci in tempi ragionevoli di fare calcoli quantistici che riguardino le transizioni di stato delle molecole durante le reazioni chimiche quando le dimensioni del sistema sono grandi; un enzima come l'emoglobina, per esempio, dalla sua interazione con l'ossigeno trae una modifica strutturale che riguarda tutta la sua struttura e che consente di far sì che la prima e le successive interazioni (l'emoglobina può accettare fino a 4 molecole di ossigeno) seguano andamenti diversi; ma come si fa a spiegare questa transizione che nasce dall'interazione quantistica fra un ossigeno e l'eme, ma che ha effetti su tutte le centinaia di amminoacidi e le migliaia di atomi dell'enzima? Il problema si amplifica con il crescere delle dimensioni dell'enzima o del sistema enzimatico in gioco; ed ecco che la strategia migliore appare mescolare le scale, usare la chimica quantistica nel luogo dell'interazione e la dinamica molecolare sul resto della struttura.



L'idea è mostrata in modo schematico nella figura a lato, dove si fa il caso della ossidazione del rame (figura del prof. Ulf Ryde) e si ha anche la possibilità di includere il ruolo del solvente che si può in alcuni casi parametrizzare con la sua costante dielettrica, ma non sempre; quest'ultimo problema mi fa pensare alla teoria

di Debye-Huckel: l'acqua è un liquido complesso, ciononostante l'approssimazione di Debye-Huckel che la vede come un semplice mezzo a costante dielettrica data funziona. Sono procedure che hanno radici.

I tre vincitori sono riusciti a superare i limiti del computer usando con accortezza l'intelligenza umana che al momento non è automatizzabile e sono riusciti nell'intento di sviluppare metodi che consentono di applicare teorie ed equazioni basate su diversi e a volte contraddittori presupposti. Ecco questo, in due parole, il motivo del Nobel 2013; se volete approfondire vi consiglio la lettura del documento originale ([www.nobelprize.org/nobel\\_prizes/chemistry/laureates/2013/advanced.html](http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/chemistry/laureates/2013/advanced.html)).

Ma se le cose stanno così la domanda nasce spontanea: ci sono altri casi di multiscala in chimica?

Beh direi di sì la chimica è la base di tutti i fenomeni biologici e tramite essi di quelli sociali e perfino economici, ma per ciascuna di queste dimensioni "superiori" esistono regole complesse e specifiche che debbono essere tenute in conto. Non siamo in grado di fare calcoli quantistici sul cervello o sui fenomeni economici, ma certamente un approccio multiscala servirebbe a capire se la chimica moderna, usata come è usata, sia sostenibile o meno; nel fare ciò uno dei concetti fondamentali è quello di retroazione, un meccanismo che è alla base di tutti i sistemi non lineari; a quando, non dico un premio Nobel, ma un progetto serio per l'analisi multiscala del rapporto fra chimica e società umana?