



LA CHIMICA TEORICA E LO SVILUPPO ECOSOSTENIBILE

Viaggio a bordo di un nanomotore guidato da Martin Karplus

di Chiara Aieta, Giovanni Di Liberto, Fabio Gabas,
Riccardo Conte, Michele Ceotto
Università degli Studi di Milano

Lo scorso 8 aprile presso l'Università degli Studi di Milano, il professor Martin Karplus, premio Nobel per la chimica 2013, ha tenuto la sua lezione intitolata *Motion: Hallmark of Life. From Marsupials to Molecules*. Tradotto letteralmente, *Il moto: un tratto distintivo della vita. Dai marsupiali alle molecole*.

Come noto, al moto è associata una forma di energia detta energia cinetica, e il movimento stesso degli animali è permesso dalla trasformazione dell'energia chimica (immagazzinata all'interno delle cellule) in energia cinetica.

Nella sua lezione, il professor Karplus ha intrapreso un percorso che, a partire dal ruolo del movimento negli animali, è giunto a trattare l'importanza del moto nei meccanismi di funzionamento delle cellule e degli organuli che le compongono. In particolare, simulazioni che utilizzano potenti supercomputer hanno recentemente permesso di analizzare e comprendere meglio il funzio-

namento di un vero e proprio motore di dimensioni molecolari.

Questo nanomotore (così definito per le sue dimensioni nanoscopiche) è in grado di ottimizzare la produzione della molecola di ATP (adenosintrifosfato), che funge da fonte di energia di immediato consumo per l'azionamento dei muscoli e, quindi, per il movimento.

L'avanzamento degli studi concernenti il moto molecolare e la possibilità di produrre e immagazzinare energia passa attraverso lo sviluppo della chimica teorica e della dinamica molecolare. L'importanza della ricerca in questi campi è stata recentemente ribadita anche dall'Unione Europea, che ha finanziato con il suo prestigioso *ERC Consolidator Grant* il progetto *Semicomplex* del professor Michele Ceotto dell'Università degli Studi di Milano.

Ulteriori fondi di ricerca, pubblici e privati, sono però necessari per non far perdere terreno all'Italia in questo settore. Al Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Milano diversi gruppi sono attivi nell'ambito della dinamica molecolare con applicazioni di dinamica classica, semiclassica e quantistica, che concernono sistemi molecolari e biologici.



Martin Karplus, premio Nobel per la chimica 2013

conferitogli nel 2013 per "lo sviluppo di modelli multiscalarari per lo studio di sistemi chimici complessi".

Complessità e semplificazione

Il professor Karplus ha dedicato la sua carriera allo studio di sistemi complessi (ovvero costituiti da tanti atomi) con l'intento di facilitarne la comprensione e di trasformare la chimica teorica in uno strumento al servizio di studiosi di altri campi, quali la chimica sperimentale, la biologia, la farmacologia, la medicina, l'ingegneria e la scienza dei materiali.

La possibilità di descrivere realisticamente sistemi complessi attraverso simulazioni al computer è legata alla capacità di semplificare il problema dal punto di vista matematico, senza introdurre errori o approssimazioni grossolane. La ricerca del professor Karplus ha permesso di dimostrare che nello studio di un'ampia varietà di sistemi chimici, la rigorosa meccanica quantistica (la teoria formulata nella prima metà del '900 che descrive correttamente il moto delle particelle di dimensione atomica e sub-atomica), può essere affiancata in maniera soddisfacente dall'impiego della più semplice meccanica classica newtoniana.

I successi di elevata risonanza del professor Karplus all'interno della comunità scientifica internazionale sono numerosissimi, partendo dallo studio pionieristico della dinamica di reazione a soli tre atomi per il sistema H_2+H negli anni '60, fino alla recente e molto più complessa caratterizzazione della foto-isomerizzazione del retinale e allo studio dei moti molecolari in sistemi biologici.

L'investigazione di un sistema apparentemente semplice come H_2+H ha dimostrato che la dinamica classica può essere utilizzata con profitto anche in casi in cui fenomeni quantistici sono prevalenti, aprendo così il campo allo studio di

“

Gli scienziati del futuro potranno sfruttare la chimica teorica e la dinamica molecolare per creare nuovi materiali, usare la luce del sole per attivare le molecole (motori molecolari e la foglia artificiale), spiegare i meccanismi di funzionamento di virus, intere cellule, e perfino organi come il cervello. E molto altro ancora

”

sistemi più complessi, quali quelli di interesse biologico. La caratterizzazione sotto irraggiamento del retinale, un derivato della vitamina A e iniziatore del ciclo di eventi alla base del funzionamento dell'occhio, ha permesso di anticipare studi sperimentali che si sono successivamente dimostrati in accordo con le previsioni teoriche.

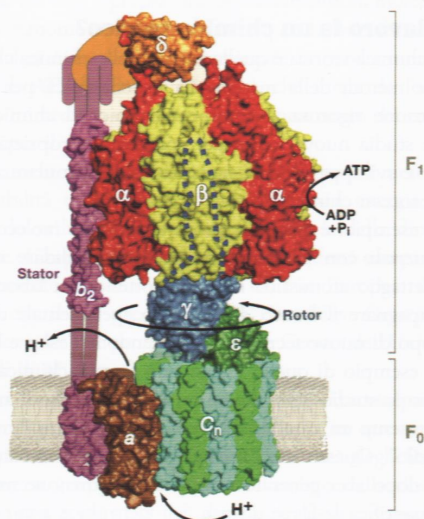
Lo studio dei moti interni di particolari proteine, chiamate enzimi, ha chiarito il meccanismo attraverso il quale essi riescono a velocizzare i processi biologici (come quelli legati al metabolismo), consentendo il funzionamento degli organismi viventi.

Questi e gli innumerevoli altri studi del professor Karplus serviranno come base e stimolo per nuove generazioni di scienziati, che potranno affrontare e risolvere stimolanti problemi di natura inter-disciplinare e di immediato impatto sulla società.

Gli scienziati del futuro potranno, per esempio, sfruttare la chimica teorica e la dinamica molecolare per: creare nuovi

Una proteina che agisce da vero e proprio "motore molecolare rotante"

Figura 1



Traité de A. E. Senior, Coll. 130 (2), 220-221 (2007).

NOUVA ENERGIA 2-2016

Viaggio a bordo di un nanomotore guidato da Martin Karplus

materiali, usare la luce del sole per attivare le molecole (motori molecolari e la foglia artificiale), spiegare i meccanismi di funzionamento di virus, intere cellule, e perfino organi come il cervello, e molto altro.

L'Università ha il dovere di parlare anche al cittadino comune

La principale missione dell'Università degli Studi di Milano è contribuire allo sviluppo della società civile attraverso l'istruzione, l'insegnamento, e la ricerca attuati a livelli di eccellenza internazionale. In particolare, questa è l'unica università italiana tra i 21 membri della LERU (lega delle università di ricerca europee) tra i quali vi sono anche Oxford, Cambridge, e Heidelberg.

Al suo interno sono attive numerose collaborazioni con centri di ricerca e istruzione universitaria sia italiani che esteri, e l'università adotta l'inglese come lingua ufficiale dei corsi di dottorato.

La visita del professor Martin Karplus si inquadra nel contesto degli sforzi di disseminazione scientifica del già citato progetto finanziato dall'European Research Council (ERC) *Semicomplex*. Lo scopo è di raggiungere un pubblico di non specialisti e di sensibilizzare l'opinione pubblica sull'importanza della ricerca effettuata presso il Dipartimento di Chimica e finanziata dalla Comunità Europea.

La figura di un premio Nobel è altamente riconoscibile an-



che dal cittadino comune ed è sinonimo indiscusso di eccellenza. L'aver avuto il professor Karplus ospite dell'Università ha permesso di offrire alla cittadinanza e, soprattutto, agli studenti delle scuole superiori di Milano e della Lombardia un vero e proprio evento pubblico, unico nel suo genere. Per rendere ancor più speciale la giornata, al termine della lezione, durante una sessione a loro specificamente dedicata, gli studenti hanno potuto interagire direttamente con il professore.



L'immagine più bella...

L'immagine più bella dell'evento è uno scatto che, da un punto di vista *squisitamente* fotografico, è obiettivamente brutto. Schiens. Solo e semplicemente una calca di schiene di studenti, assiepati fuori dalle tre entrate principali dell'Aula Magna, dove si è svolta la *lecture*. Altri ragazzi, non pochi, erano invece seduti sui gradoni delle due scale laterali che fanno da cornice alla medesima Aula, o in qualsiasi altro luogo raggiunto dal servizio di traduzione in cuffia. Tanti e tanti giovani, oltre la capienza di una sala conferenze che già di suo offriva parecchie centinaia di posti a sedere (pavimento compreso); senza bisogno di scomodare, per attirare la loro attenzione, una pop star di grido o il lancio dell'ultima versione di un *device* elettronico. Se questa non è un'immagine meravigliosa! Evidentemente anche la chimica (in formato Nobel) può ancora fare miracoli.

Multiutility da Nobel

Tra i sostenitori di questa *lecture* si è visto anche il marchio di una nota multiutility lombarda. E non è un caso. La ricerca di soluzioni innovative alle sfide dei servizi rappresenta, da sempre, uno degli ambiti di impegno del Gruppo LGH e delle sue società – come Linea Energia, la *business unit* in campo energetico – e significativi sono nel tempo i progetti instaurati con Università e centri di ricerca.

Questo rapporto positivo e fecondo ha trovato anche nel sostegno alla visita in Italia del Premio Nobel Karplus un momento qualificante, teso a consolidare relazioni in ambito accademico e a qualificare il gruppo come partner della ricerca più avanzata in ambito scientifico.

“Qualche mese fa i professori Mario Raimondi e Michele Ceotto mi sono venuti a trovare”, racconta Davide Alberti, direttore generale di Linea Energia, spiegando come è nata questa collaborazione tra la multiutility e l’Università di Milano. “È stata una riunione informale anche per la stima reciproca che da tempo ci caratterizza; non mi sembrava vero poter partecipare direttamente alla realizzazione di un evento di tale portata. Le decisioni si sono prese in un battito di ciglia: tutti uniti nel costruire assieme un evento unico! Evento che è andato al di là delle nostre migliori aspettative e che ha visto la partecipazione di tantissimi giovani, le nostre nuove leve”.

Per comprendere meglio l’importanza di questi studi, di seguito sono descritte le caratteristiche peculiari delle due discipline, assieme a un approfondimento sulla carriera e sul contributo scientifico del professor Karplus.

Che lavoro fa un chimico teorico?

La chimica teorica è quella branca della chimica che utilizza leggi e metodi della matematica e della fisica per dare una spiegazione rigorosa ai fenomeni chimici. Il chimico teorico crea e studia nuove teorie per spiegare le proprietà delle sostanze e sviluppa modelli matematici per simulare al computer i processi chimici.

Ad esempio, è possibile progettare nuove molecole e nuovi materiali con funzionalità specifiche, validare e spiegare con dettaglio atomistico i risultati ottenuti in laboratorio, ed accompagnare il lavoro del chimico sperimentale durante lo sviluppo di nuove tecniche, prevedendone l’esito e l’efficacia.

Un esempio di quello che si può fare in chimica teorica è proprio lo studio della dinamica della molecola di ammoniaca che presenta un caratteristico movimento detto “inversione a ombrello”. Questo meccanismo può essere simulato al computer dopo aver generato un’opportuna funzione matematica, che quantifica le forze dovute agli elettroni e a cui sono soggetti i nuclei.



All’interno della chimica teorica, un ruolo importante è rivestito dalla dinamica molecolare, una disciplina che studia il moto delle molecole e i suoi effetti. Tra le sue principali applicazioni rientrano le simulazioni delle reazioni chimiche, delle vibrazioni molecolari e le modificazioni strutturali di molecole complesse come le proteine in presenza di altre molecole, con cui interagiscono. Infatti, le reazioni chimiche sono dovute al movimento e al *riarrangiamento* degli atomi in seguito alla rottura e formazione di legami. Le vibrazioni molecolari sono il risultato dei moti nucleari interni alle molecole, mentre le modificazioni strutturali delle proteine sono determinate dal riorientamento delle catene di aminoacidi che le costituiscono, in seguito all’interazione con altre molecole.

In Figura 1 (a pagina 88) è rappresentata una proteina che agisce da vero e proprio “motore molecolare rotante”. Il movimento delle parti che la compongono viene sfruttato per la sintesi dell’ATP, una molecola fondamentale per la vita. La simulazione al computer, con la dinamica molecolare, del suo meccanismo di funzionamento permette di comprendere meglio e di controllare questo importante processo che sta alla base del metabolismo degli organismi viventi.

Il professor Martin Karplus è uno dei più importanti scienziati del nostro tempo nel campo della chimica teorica e computazionale. La sua carriera è cominciata con un dottorato di ricerca conseguito a 23 anni presso il *California Institute of Technology* (Caltech), è proseguita con vari incarichi in prestigiose università, fino all’attuale cattedra come professore emerito all’Università di Harvard e al premio Nobel per la chimica,