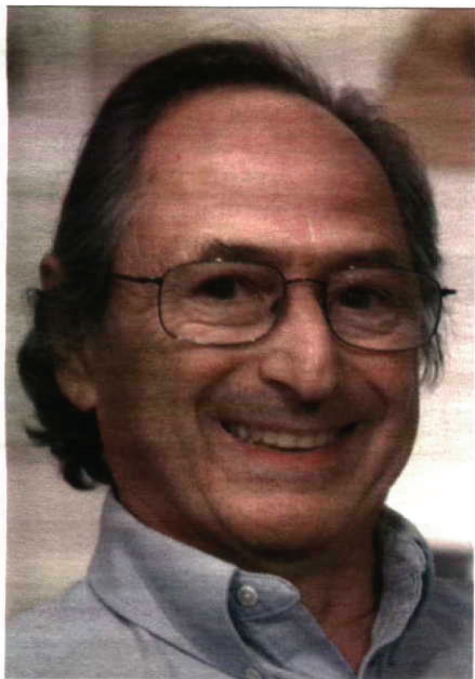
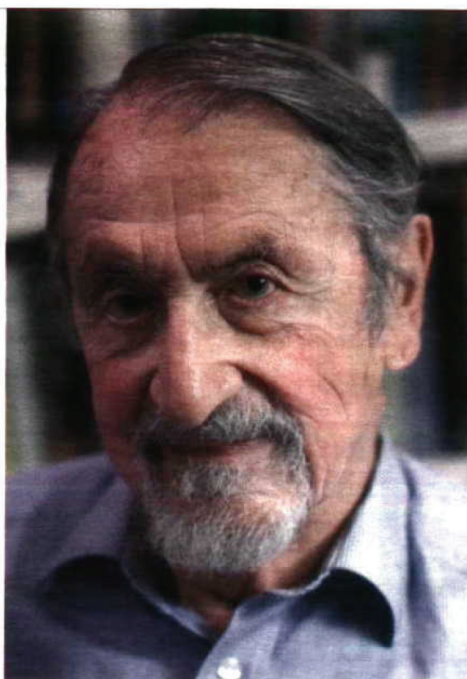


Nobel da Química para a fusão que tornou o computador o melhor amigo do tubo de ensaio

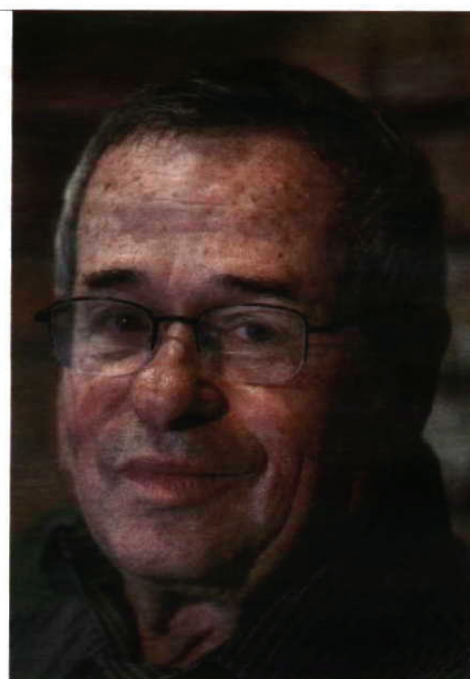
Em Portugal, a ciência de Karplus, Levitt e Warshel não é desconhecida: no ITQB, ocupa 15 investigadores e computadores que somam 2200 cores, a laborar 24 horas



Michael Levitt, da Universidade de Stanford



Martin Karplus, da Universidade de Estrasburgo



Arieh Warshel, da Universidade da Califórnia

MARTA F. REIS
marta.reis@ionline.pt

No anos 70, antes dos computadores terem uma fracção da capacidade de processamento que têm hoje, Arieh Warshel, Martin Karplus e Michel Levitt conseguiram arranjar uma forma de resolver um dilema da química: conseguir simular o comportamento de moléculas complexas vitais para se pensar em novos remédios ou tecnologias. Além de terem de ser capazes de replicar a organização de milhares ou milhões de átomos, teriam de recriar as reacções químicas que se sucedem em fracções de milissegundos. Os três investigadores foram ontem laureados com o Nobel da Química pelo salto que permitiu tornar o computador numa ferramenta da química moderna, permitindo simular processos e reduzindo as necessidades de experimentação, poupando assim tempo e recursos.

Em comunicado, a Academia Real das Ciências lembrou que vários prémios Nobel no passado distinguiram cientistas capazes de modelar sistemas moleculares. O trabalho destes investigadores vai mais longe, ao permitir criar em ambiente virtual moléculas complexas como proteínas e o seu comportamento, o que implicou combinar em linguagem informática os princípios da física clássica com os da física

quântica. Tudo resultou dos encontros entre Warshel e Levitt no Instituto Weizman e na Universidade de Cambridge e de Karplus e Warshel na Universidade de Harvard. Os três criaram algoritmos capazes de transportar para linguagem binária o mundo físico dos átomos que constituem toda a vida, com as suas diferentes arquitecturas consoante a molécula e suas características esquisitas, previstas pela física quântica, como estar em diferentes estados ao mesmo tempo (o famoso paradoxo do gato de Schrödinger, morto e vivo ao mesmo tempo, que ilustra que neste campo elementar é possível estar-se em dois estados em simultâneo).

Se os algoritmos são complexos para leigos, Cláudio Soares, director do Instituto de Tecnologia Química e Biológica da Universidade Nova de Lisboa e coordenador de um laboratório que se dedica a modelar proteínas com recurso às ferramentas que começaram a ser desenvolvidas pelos laureados, contou ao *i* que nada disto é ciência desconhecida por cá. "Com o trabalho deles, passámos a conseguir simular as reacções complexas que permitem que as nossas células executem os seus processos. Antes deles, ninguém conseguir tratar proteínas ou ADN em computador. Tínhamos a experimentação, mas não havia métodos de prever a realidade." Soares explica que este avanço permite

fazer pesquisas mais precisas, mais rápidas e menos dispendiosas. "Hoje arriscaria que quase todos os medicamentos têm uma fase que passam por desenho molecular e simulação informática", diz. Os investigadores podem modificar uma molécula que encontram na natureza no computador e testá-la num alvo concreto, seja uma proteína num tumor ou bactéria que queiram travar. "Não acredito que estas experiências venham a substituir o trabalho de laboratório, mas são ferramentas que estão lado a lado. É experimentação computacional", diz.

No ITQB, há dois grupos de investigação e 15 cientistas dedicados a esta ciência de fusão. Soares conta que, no seu caso, foi o encontro perfeito. Quando optou pela licenciatura em bioquímica, estava indeciso com informática. No seu laboratório, têm hoje uma capacidade de processamento que soma 2200 cores de computação, qualquer coisa como 550 computadores convencionais. Funcionam 24 horas por dia, mas o investigador admite que poderiam contar com muito mais: "Nas biociências, ao contrário do que já acontece na física, ainda não existe na Europa e particularmente em Portugal, muita tradição de se usarem supercomputadores partilhados. Temos tudo instalado no ITQB, o que é um grande investimento." E tem alguma molécula preferida?, perguntamos. "Se me está a perguntar por que molécula estou mais apaixonado, é uma pergunta difícil", diz. Mas lá selecciona uma: a proteína hemaglutinina, usada pelo vírus da gripe para se ligar às células humanas e causar a doença. Simular o seu comportamento em computador, experiência sem necessidade de bata que poderá contribuir para novos medicamentos, envolve simular mais de um quarto de milhão de átomos. Já há medicamentos para a gripe, dizemos. "Mas não sabemos muito bem como funcionam e não são muito eficazes", responde.

105

Total de laureados com o Nobel da Química desde 1901, apenas quatro mulheres

918

mil euros. Prémio que os laureados vão dividir, após a entrega a 10 de Dezembro