

## Chemie

Der Nobel-Preis für Chemie geht 2013 an Martin Karplus (Université de Strasbourg und Harvard University), Michael Levitt (Stanford University) und Arieh Warshel (University of Southern California) „für die Entwicklung von Multiskalenmodellen für komplexe chemische Systeme“. Die von den Preisträgern ausgearbeiteten Methoden kombinieren klassische und quantenmechanische Theorie. Warshel und Levitt hatten am Weizmann Institute of Science eine Technik entwickelt, mit der große biologische Moleküle modelliert werden können. Karplus und seine Gruppe an der Harvard University wollten Computerprogramme schreiben, die mithilfe der Quantentheorie chemische Reaktionen simulieren. Als Warshel als Postdoc in Karplus' Labor kam, arbeiteten sie gemeinsam an einem Programm, das mit einer Kombination aus klassischen und quantenchemischen Ansätzen die Spektren planarer Moleküle berechnet. Damit schufen sie die Grundlage für die Verwendung hybrider Methoden zum Modellieren komplexer Systeme; ihr Ansatz wurde später von Levitt und Warshel auf das Modellieren einer enzymatischen Reaktion erweitert. Der Einsatz quantmechanischer/molekulärmechanischer Methoden (QM/MM) in biomolekularen Reaktionen wurde in der *Angewandten Chemie* erst vor wenigen Jahren in einem Aufsatz behandelt.<sup>[1]</sup>

**Martin Karplus** studierte an der Harvard University und promovierte 1953 bei Linus Pauling am California Institute of Technology. Nach einem Postdoktorat bei Charles Coulson an der University of Oxford (1953–1955) lehrte und forschte er an der University of Illinois, der Harvard University und der Columbia University. Derzeit ist er Professeur conventionné an der Université de Strasbourg und emeritierter Theodore Richards Professor für Chemie an der Harvard University. Sein Interesse gilt der elektronischen Struktur, Geometrie und Dynamik von chemisch und biologisch interessanten Molekülen.<sup>[2]</sup>

**Michael Levitt** studierte am King's College London und erhielt seinen Doktortitel 1971 vom MRC Laboratory of Molecular Biology (LMB) und von der University of Cambridge. Nach einem Postdoktorat bei Shneior Lifson am Weizmann Institute of Science (1972–1974) und einer Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am LMB (1974–1979) ging er 1980 ans Weizmann Institute of Science. 1987 wurde er Professor für Strukturbioologie an der Stanford University. Sein Forschungsschwerpunkt ist der Einsatz von physikalischen, biologischen und Computermethoden für die Vorhersage von Proteinstrukturen.

**Arieh Warshel** studierte am Technion und am Weizmann Institute of Science, an dem er 1969 bei Shneior Lifson promovierte. Nach einem Postdoktorat bei Martin Karplus an der Harvard University kehrte er ans Weizmann Institute zurück und arbeitete auch am LMB (1972–1976). 1976 wechselte er an die University of Southern California und ist nun Distinguished Professor of Chemistry and Biochemistry. Er befasst sich mit der biophysikalischen Chemie, darunter mit Computersimulationen biologischer Moleküle.<sup>[3]</sup>

## Physik

Der Nobel-Preis für Physik wird 2013 Peter W. Higgs (University of Edinburgh) und François Englert (Université Libre de Bruxelles) für Arbeiten verliehen, in denen sie eine Theorie dafür entwickelten, wie Partikel Masse erhalten. Diese Theorie, die für das Standardmodell der Teilchenphysik entscheidend ist, wurde von den beiden Preisträgern 1964 unabhängig voneinander vorgeschlagen (Englert arbeitete dabei mit seinem inzwischen verstorbenen Kollegen Robert Brout zusammen) und 2012 mit der Entdeckung des Higgs-Bosons bestätigt.

## Medizin oder Physiologie

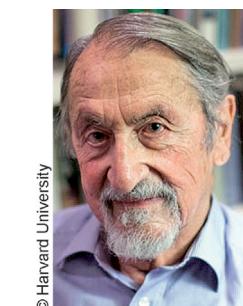
Mit dem Nobel-Preis für Medizin oder Physiologie werden 2013 James E. Rothman (Yale University), Randy W. Schekman (University of California, Berkeley) und Thomas C. Südhof (Stanford University) „für ihre Entdeckungen zu den Transportprozessen in Zellen“ geehrt. Rothman entschlüsselte, wie Vesikel an ihre Zielstrukturen andocken und mit ihnen verschmelzen, Schekman identifizierte die genetische Grundlage der zellulären Transportsysteme, und Südhofs Arbeit an den Nervenzellen im Gehirn trug zum Verständnis dafür bei, wie Vesikel zur Freigabe ihres Inhalts veranlasst werden.

[1] H. M. Senn, W. Thiel, *Angew. Chem.* **2009**, *121*, 1220; *Angew. Chem. Int. Ed.* **2009**, *48*, 1198.

[2] a) C. M. Dobson, A. Šali, M. Karplus, *Angew. Chem.* **1998**, *110*, 908; *Angew. Chem. Int. Ed.* **1998**, *37*, 868; b) H. Guo, Q. Cui, W. N. Lipscomb, M. Karplus, *Angew. Chem.* **2003**, *115*, 1546; *Angew. Chem. Int. Ed.* **2003**, *42*, 1508.

[3] a) M. P. Frushicheva, A. Warshel, *ChemBioChem* **2012**, *13*, 215; b) S. C. L. Kamerlin, J. Florián, A. Warshel, *ChemPhysChem* **2008**, *9*, 1767.

DOI: 10.1002/ange.201308806



M. Karplus

© Harvard University



M. Levitt

© S. Fisch



A. Warshel