

#SCIENCES

L'émergence de la vie à partir de molécules simples

A. Marco Saitta, PREX Physique à Sorbonne Université - Fabio Pietrucci, MCF Physique à Sorbonne Université
 Andrea Perez-Villa, Postdoc à Sorbonne Université, (financement Labex MATISSE) / Institut de Minéralogie,
 de Physique des Matériaux et de Cosmochimie (IMPMC) - UMR 7590 Sorbonne Université, CNRS, MNHN, IRD



Marco Saitta,
 PREX Physique
 à Sorbonne Université
 UMR 7590 Sorbonne
 CNRS, MNHN, IRD

Les origines de la vie représentent un domaine de recherche, intrinsèquement pluridisciplinaire, au croisement de la géologie, de la chimie, de la biologie, mais aussi des mathématiques, de la physique et de l'astrophysique. En 1871 Charles Darwin exprima pour la première fois l'hypothèse que la vie aurait pu surgir « *in a warm little pond, with all sorts of ammonia and phosphoric salts, lights, heat, electricity* », formulant ainsi l'idée désormais bien connue de « *soupe primordiale* ».

Depuis Darwin, de nombreuses hypothèses ont été formulées pour expliquer l'émergence, à partir de molécules simples, de

la complexité du vivant, notamment les aspects d'autoréplication, d'hérédité, de métabolisme. Nombre de questions sont toujours controversées et débattues, et aujourd'hui, force est de constater que la difficulté d'expliquer l'émergence et la complexité du vivant persiste à plusieurs échelles, tout particulièrement au niveau le plus microscopique.

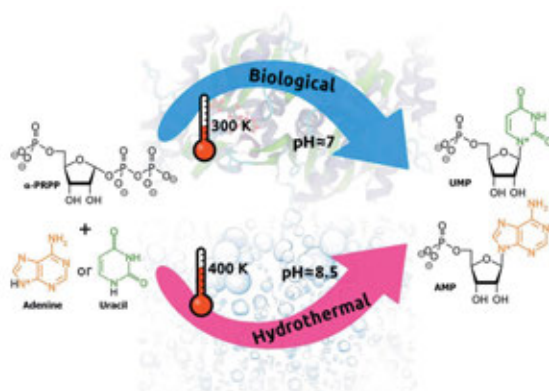
Un exemple emblématique est le nucléotide (de l'ARN ou de l'ADN), la brique élémentaire des molécules responsables de la transmission des caractères héréditaires. De nombreuses approches expérimentales et théoriques ont étudié comment le processus de polymérisation des nucléotides d'ARN a pu se produire sur la Terre primitive, par exemple le rôle des surfaces minérales, la présence de sels ou de lipides, l'existence de cycles de mouillage/séchage, etc.

Cependant, les mécanismes microscopiques de synthèse spontanée du nucléotide d'ARN en conditions prébiotiques restent toujours inconnus. En particulier, la faible stabilité du cycle du ribose à l'hydrolyse, sous conditions hydrothermales notamment, demeure une question non résolue, de grande importance dans le domaine d'études des origines de la vie.

Dans ce projet, réalisé grâce à une allocation « GENCI – Curie » pour un montant total d'environ 5,5 millions d'heures CPU, nous avons étudié des réactions chimiques prébiotiques des ribonucléotides, en collaboration avec des équipes expérimentales de Sorbonne Université. Dans cette étude, nous appliquons des méthodes de chimie quantique et de dynamique moléculaire en combinaison avec des techniques d'accélération des processus lents et détermination de l'énergie libre, comme la métadynamique et l'umbrella sampling.

Nous avons exploré la réactivité du métabolite 5-phosphoribosyl-1-pyrophosphate (abrégé en PRPP) qui agit comme un précurseur de nucléotides dans les systèmes biologique/enzymatiques actuels.

Nous avons modélisé cette molécule en présence de bases azotées, purines et pyrimidines, dans un environnement prébiotique plausible tel que des conditions hydrothermales (lagunes chaudes) pour explorer la voie de synthèse des ribonucléotides. Nous avons obtenu des profils d'énergie libre et avons dévoilé un mécanisme de réaction par lequel les nucléotides d'ARN se forment avec succès. Ce travail est actuellement en évaluation dans PNAS.



FORMATION DE NUCLEOTIDES À PARTIR DU PHOSPHORIBOSYL PYROPHOSPHATE (PRPP), UN PRECURSEUR BIOLOGIQUE, ET DE BASES AZOTÉES PURINE/PYRIMIDINE : COMPARAISON ENTRE LE MÉCANISME BIOLOGIQUE ACTUEL ET LE CHEMIN PRÉBIOTIQUE SUPPOSÉ EN CONDITIONS HYDROTHERMALES. LES ORGANISMES VIVANTS UTILISENT DES ENZYMES POUR EFFECTUER CETTE SYNTHÈSE QUE NOUS SIMULONS EN CONDITIONS PRÉBIOTIQUES.