

Cel projektu

Celem tego projektu jest wyjaśnienie mechanizmów skomplikowanych reakcji fotochemicznych, inicjowanych przez ekspozycję cząsteczek chemicznych na światło słoneczne, które jak sądzimy mogły przyczynić się do syntezy cząsteczek budulcowych pierwszych żywych organizmów na Ziemi. Chociaż początki życia na Ziemi pozostają nieznane, najbardziej prawdopodobne hipotezy są wciąż testowane w wielu laboratoriach na całym świecie, w celu wyjaśnienia skomplikowanych sieci reakcji chemicznych od prostych prebiotycznych cząsteczek do biologicznych makrocząsteczek o skomplikowanej architekturze (kwasów nukleinowych, białek i lipidów). Badania takie są domeną chemii prebiotycznej – szybko rozwijającej się gałęzi chemii, która jest obecnie w centrum zainteresowania środowiska naukowego.

Najwcześniejsze oznaki życia datowane są na epokę Archaiku (od 4 do 2,5 miliarda lat temu), w okresie krótko po uformowaniu się skorupy ziemskiej, gdy warunki na powierzchni Ziemi były wyjątkowo nieprzyjazne dla cząsteczek organicznych, z których zbudowane są wszystkie żywe organizmy. Strumień ciepła z wnętrza Ziemi i aktywność wulkaniczna były znacznie wyższe niż obecnie, a światło słoneczne, w tym szkodliwe promieniowanie ultrafioletowe (UV), docierało do powierzchni Ziemi nie ekranowane przez warstwę ozonową, która powstała znacznie później (około miliarda lat temu), kiedy wczesne organizmy wodne zwane niebiesko-zielonymi algami zaczęły wykorzystywać energię słoneczną do rozszczepiania cząsteczek wody i dwutlenku węgla oraz łączenia ich w związki organiczne i tlen cząsteczkowy.

Według tzw. "Hipotezy świata RNA" pierwsze żywe organizmy opierały się na cząsteczkach RNA, które są w stanie przechowywać i replikować informację genetyczną i katalizować procesy metaboliczne. Cząsteczki RNA zbudowane są z łańcucha mniejszych cząsteczek organicznych zwanych nukleotydami, które są bardzo odporne na promieniowanie UV, pomimo iż większość cząsteczek organicznych jest bardzo podatna na uszkodzenia wywołane tym promieniowaniem. Dlatego sądzimy, że światło słoneczne mogło być silnym czynnikiem selektywnym, faworyzującym bardziej fotostabilne cząsteczki na wczesnych stadiach ewolucji chemicznej, która ostatecznie doprowadziła do powstania życia. Z drugiej strony promieniowanie UV było również niezwykle wydajnym i skoncentrowanym źródłem energii, pozwalającym na zachodzenie inaczej nie dostępnych reakcji chemicznych.

Głównym celem tego projektu jest zbadanie molekularnych mechanizmów fotostabilności wybranych cząsteczek, które są wiarygodnymi prebiotycznymi prekursorami nukleotydów i aminokwasów. Planujemy również wyjaśnić mechanizm reakcji fotoredukcji, który niedawno zaproponowano jako prebiologiczne syntetyczne połączenie pomiędzy RNA i DNA, które jest odpowiedzialne za przechowywanie informacji genetycznej we współczesnych organizmach żywych. Chociaż projekt ten opiera się na wynikach planowanych symulacji obliczeniowych, zostanie on przeprowadzony w ścisłej współpracy z grupą eksperymentalną prof. Dimitara Sasselova z Uniwersytetu Harvarda, która pozwoli na eksperymentalną weryfikację naszych przewidywań teoretycznych. Należy jednak podkreślić, że obecnie nie ma żadnych technik eksperymentalnych, które pozwoliłyby na szczegółowy wgląd w molekularne mechanizmy reakcji chemicznych. Taki wgląd jest możliwy jedynie dzięki zastosowaniu różnych technik eksperymentalnych w połączeniu z obliczeniami teoretycznymi.

Opis badań i spodziewanych efektów

Podczas realizacji projektu planujemy zastosować najnowocześniejsze metody molekularnej mechaniki kwantowej, które zostały wyprowadzone z pierwszych zasad i zapewniają wystarczającą dokładność, aby dostarczyć ilościowych informacji na temat molekularnych mechanizmów procesów fotochemicznych zachodzących w ultraszybkiej, sub-pikosekundowej skali czasowej. Wyniki obliczeń teoretycznych mogą pomóc w interpretacji wyrafinowanych femtosekundowych widm absorpcji przejściowej, rejestrowanych przez naszych kolegów z grupy Sasselova, które pozwalają śledzić w czasie zmiany struktury elektronowej cząsteczek po wzbudzeniu promieniowaniem UV. Ten wspólny wysiłek powinien nam pozwolić na zidentyfikowanie możliwych losów cząsteczek poddanych działaniu intensywnego promieniowania UV, wybranych do naszych badań ze względu na ich znaczenie dla wiarygodnych scenariuszy chemii prebiotycznej.

Główne cele tego projektu mają podstawowy charakter, jakim jest pogłębienie naszego zrozumienia procesów fotochemicznych, które mogły mieć znaczenie dla początków życia na Ziemi. Oczekiwane wyniki powinny jednak również poszerzyć naszą ogólną wiedzę na temat fotochemii i fotofizyki tiopochodnych nienasyconych związków organicznych (czyli związków zawierających atom siarki w ich strukturze molekularnej). Mamy wreszcie nadzieję, na wyjaśnienie aktywnej roli cząsteczek rozpuszczalnika w roztworze, które naszym zdaniem mogą otwierać niedostępne w inny sposób kanały reakcji fotochemicznych.