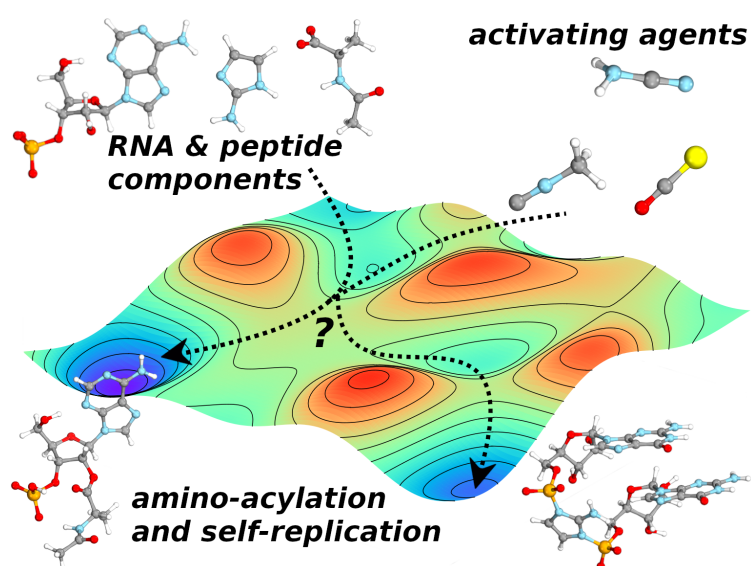


Ten projekt zapewni zrozumienie na poziomie molekularnym sposobu, w jaki prebiotyczne mieszaniny molekuł bioorganicznych mogą wykorzystać energię chemiczną do ewolucji w kierunku złożoności i procesów chemicznych przypominających życie. Organizmy żywe wymagają stałego dopływu energii do utrzymania swoich podstawowych funkcji, takich jak kopiowanie materiału genetycznego czy synteza białek. Komórki osiągają to na przykład poprzez rozkład cukrów i magazynują pozyskaną energię w postaci trójfosforanu adenozy (ATP), uniwersalnego nośnika energii dla życia. Jest to jednak możliwe tylko przy wsparciu złożonej maszyny enzymatycznej, która nie była obecna przed powstaniem życia. Dlatego ostatnio proponowane scenariusze dotyczące wczesnego metabolizmu uwzględniały bardziej reaktywne, choć mniej stabilne, wysokoenergetyczne cząsteczki organiczne z potrójnymi wiązaniami o wysokiej energii. Niemniej jednak wykazano, że te magazynujące energię i aktywujące cząsteczki mają niską selektywność i dużą skłonność do degradacji poprzez hydrolizę. Co najważniejsze, ich mechanizm działania, jak również związane z nim termodynamika i kinetyka, pozostają w dużej mierze niejasne, a szczegółowe badania na poziomie molekularnym są konieczne, aby zrozumieć, jaka forma minimalnego metabolizmu mogła napędzać wczesną molekularną ewolucję.

W tym projekcie wykorzystam dokładne metody chemii kwantowej do zbadania molekularnych mechanizmów działania takich wysokoenergetycznych cząsteczek, a także prebiotycznie prawdopodobnych reakcji, które mogłyby umożliwić ich powstawanie. W tym przypadku chemia obliczeniowa posłuży jako molekularny mikroskop, który pozwoli odkryć wewnętrzne działanie pozyskiwania i magazynowania energii przez układy prebiotyczne. W szczególności (1) zbadamy, jaki rodzaj prebiotycznego paliwa molekularnego mógłby



podtrzymywać samoreplikację polimerów informacyjnych, takich jak RNA oraz syntezę peptydów. Konstruuując sieci reakcji chemicznych i symulując ich działanie w czasie, dowiemy się, jakie modyfikacje tych sieci reakcji mogą wpłynąć na proporcje i selektywność produktów. (2) Wyjaśnimy również mechanizm powstania amido-trifosforanów aminonukleozydów w warunkach prebiotycznych i zbadamy ich skłonność do polimeryzacji. Niedawno wykazano, że takie trifosforowane analogi monomerów RNA są osiągalnymi prebiotycznie formami aktywowanych bloków budulcowych, które potencjalnie mogą umożliwić samoreplikację materiału genetycznego. Co więcej, (3) wyjaśnimy chemiczne szlaki reakcyjne prowadzące do wysokoenergetycznych cząsteczek zawierających grupy cyjankowe w ośrodkach międzygwiazdowych. W tym przypadku będziemy badać procesy fotoindukowane i reakcje rodnikowe, które są odpowiedzialne za powstawanie tak złożonych cząsteczek organicznych w warunkach astrochemicznych.

Wyniki tych prac obliczeniowych pozwolą nam ustalić ogólne zasady wykorzystania i magazynowania energii chemicznej przez układy prebiotyczne. Wyjaśnienie takich zasad w oparciu o termodynamikę, kinetykę i mechanizmy molekularne ułatwi zrozumienie chemii, która może dać początek prymitywnym formom życia we wszechświecie i zaoferuje lepiej uzasadnione hipotezy dotyczące potencjalnych biosygnatur w Układzie Słonecznym i poza nim. Takie spostrzeżenia będą szczególnie cenne i aktualne, biorąc pod uwagę niedawne wystrzelenie łazika Perseverance i Kosmicznego Teleskopu Jamesa Webba, a także planowaną misję DAVINCI na Wenus, z których wszystkie mają na celu zbadanie rodzajów chemii mogącej dać początek życiu poza Ziemią.