



Contribution ID: 122

Type: **Orale**

Synthèse prébiotique d'acides aminés : simulations par dynamique moléculaire *ab initio*.

Thursday, 11 July 2019 09:30 (15 minutes)

La structure des êtres vivants repose essentiellement sur des architectures supramoléculaires ou des polymères constitués d'unités simples appartenant elles-mêmes à un petit nombre de familles de molécules (lipides, acides aminés et nucléiques...).

La transition du biotique à l'abiotique a donc dû mobiliser une soupe prébiotique où de tels "building blocks" étaient abondants.

La formation de ces building blocks à partir de composés encore plus simples, présents dans le milieu prébiotique, est étudiée par la chimie prébiotique, domaine dont le coup d'envoi a été donné par la célèbre expérience de Miller (Science, 1953).

Il est depuis couramment admis que la voie dite de Strecker (Eur. J. Org. Chem., 1854) est celle permettant l'apparition des acides aminés, bien que l'existence d'autres scénarii est très sérieusement envisagée par d'autres auteurs (Saitta et al., PNAS, 2015 ; Koga et al., Sci. Rep., 2017).

Nous avons donc cherché à évaluer la synthèse de Strecker numériquement. Nous avons tiré parti des approches de l'équipe (Pietrucci et al., PNAS, 2015), associant la dynamique moléculaire *ab initio* en milieu explicite à des techniques d'« enhanced sampling ». Ces choix méthodologiques, bien qu'exigeants numériquement, permettent de rendre compte à la fois du réarrangement des liaisons covalentes lors de la synthèse, mais aussi des détails d'effets de milieu complexes ayant prouvé encore récemment leur importance dans le domaine prébiotique (Barge et al., PNAS, 2019).

Choix de session parallèle

5.4 Physique et origines de la vie

Primary author: MAGRINO, Theo (Sorbonne Université)

Co-authors: SAITTA, A. Marco (Sorbonne Université); Dr PIETRUCCI, Fabio (Sorbonne Université)

Presenter: MAGRINO, Theo (Sorbonne Université)

Session Classification: Séance Parallèle