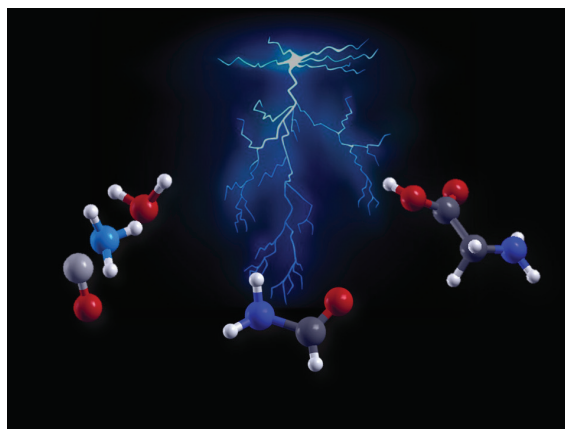


Fabriquer des acides aminés dans une soupe primordiale numérique

Pour comprendre comment les premières molécules complexes se sont formées, deux physiciens ont simulé, à l'échelle atomique, les réactions entre les éléments simples de l'atmosphère terrestre primitive.

En 1953, l'américain Stanley Miller montrait qu'il était possible d'obtenir des molécules complexes, tels des acides aminés, en soumettant des molécules simples à un champ électrique intense. C'était le début de la chimie prébiotique et de la recherche de l'origine du vivant. Cependant, il est difficile de suivre toutes les étapes des réactions chimiques qui conduisent à la formation de molécules complexes dans de telles expériences. A. Marco Saitta, professeur à l'Institut de minéralogie, de physique des matériaux et de cosmochimie (UPMC/CNRS/IRD/MNHN), et Franz Saija, de l'Istituto per i Processi Chimico-Fisici/CNR en Italie, ont simulé à l'échelle atomique les réactions de l'expérience de Miller.

Pour son expérience, Miller avait rassemblé dans une enceinte ce qu'on pensait à l'époque être la composition de l'atmosphère de la Terre primitive, un mélange gazeux de méthane, d'ammoniac, d'eau et de d'hydrogène. Les diverses réactions en chaîne entre ces éléments ont conduit à la formation, entre autres, de glycine. La nécessité d'une source d'énergie est un point essentiel à ce type d'expériences : une décharge électrique simulant un éclair atmosphérique comme dans l'expérience de Miller, un rayonnement ultraviolet sur Terre ou dans l'espace, une source hydrothermale comme on en trouve au fond des océans ou encore des collisions de météorites. Dans tous les cas, il est difficile de retracer précisément les réactions qui ont lieu. A.M. Saitta et F. Saija ont modélisé ces réactions à l'échelle atomique pour pouvoir suivre précisément les différentes étapes et évaluer le rôle du champ électrique.



Vue d'artiste de l'effet d'un éclair ou d'un champ électrique intense sur de molécules simples (à gauche : eau, ammoniac, monoxyde de carbone), produisant d'abord de la formamide (au centre) et ensuite l'acide aminé le plus simple, la glycine (à droite).

Ces simulations numériques consistent à résoudre les équations quantiques qui régissent la structure électronique des atomes du système. En modélisant le mouvement des atomes, les chercheurs déterminent les forces entre les atomes, les liaisons qui sont formées, celles qui sont rompues et les nouveaux composés produits. Pour optimiser le temps de calcul, les deux physiciens se sont donc intéressés à un petit nombre de molécules en solution. Ils ont aussi découpé le processus en différentes étapes élémentaires, ce qui leur permet de suivre précisément la formation d'intermédiaires réactionnels. Ils ont augmenté progressivement la valeur du champ électrique pour déterminer les conditions nécessaires pour former des acides aminés. Ils ont ainsi mis en évidence qu'il faut un champ de 50 mégavolts par centimètre pour que les réactions s'amorcent. Si cette valeur semble importante à l'échelle macroscopique, de tels champs existent à l'échelle microscopique, en particulier à la surface de minéraux.

Grâce à leur méthode, A.M. Saitta et F. Saija ont confirmé qu'il est possible de produire de la glycine à partir de composés simples comme l'oxygène, l'ammoniac et le monoxyde de carbone. En revanche, ils montrent que le processus est plus complexe que ce que les chimistes pensaient jusqu'à présent et qui reposait sur la synthèse de Strecker. Dans cette dernière, les molécules de l'atmosphère produisent, dans un premier temps, du formaldéhyde et du cyanure d'hydrogène. Puis ces deux molécules vont interagir avec l'ammoniac pour donner un aminonitrile qui va se transformer en glycine. Dans le modèle numérique d'A.M. Saitta et F. Saija, les premiers intermédiaires de réaction sont le formamide et l'acide formique. En partant d'un mélange d'eau, d'ammoniac, de méthane, de monoxyde de carbone et de diazote, ce sont des molécules de formamide et d'acide formique qui sont synthétisées lorsque les chercheurs appliquent le champ électrique externe. Le formamide et l'acide formique interagissent et forment de l'hydroxyglycine qui, après plusieurs transformations, devient une molécule de glycine.

Le champ électrique externe joue plusieurs rôles : il augmente les chances de rencontre des molécules et permet d'abaisser l'énergie nécessaire pour certaines réactions. D'autres expériences de synthèses de molécules complexes, par exemple lors de simulations d'impacts de météorites, présentent des traces de formamide et d'acide formique. Ainsi, le processus chimique décrit par A.M. Saitta et F. Saija pourrait se réaliser dans différents environnements prébiotiques. Enfin, l'approche de ces physiciens ouvre des perspectives intéressantes pour l'étude de processus électrochimiques par la simulation numérique.

Référence

«Miller experiments in atomistic computer simulations.»

A. M. Saitta et F. Saija

PNAS, 2014

Contact

Marco Saitta : Marco.Saitta@impmc.upmc.fr