



# Appunti di Fisica '15 & Dottorato di Ricerca in Fisica

24 luglio ore 10:30  
Sala seminari, CNR-IPCFC

## Approcci *ab-initio* alla chimica prebiotica

### Prof. A. Marco Saitta

(Institut de Minéralogie, de Physique des Matériaux et de Cosmochimie, Université Pierre et Marie Curie - Sorbonne, Paris, France)

Tutti gli organismi viventi, dai batteri all'uomo, sono formati dagli stessi componenti basilari, costituiti principalmente da amminoacidi, acidi grassi, basi azotate e zuccheri, il cui peso molecolare raramente supera 200. Quel che differenzia molto gli organismi dal punto di vista chimico è il modo in cui questi componenti basilari si compongono in strutture maggiori, per lo più polisaccaridi, proteine, lipidi e acidi nucleici. Questa notevole singolarità risale all'inizio stesso della vita e trasmette un messaggio centrale il cui significato fu inizialmente accennato da Charles Darwin nel diciannovesimo secolo e ripreso teoricamente da Oparin e Haldane a cavallo degli anni '20 nella loro teoria sull'evoluzione chimica. Solo dopo il 1953 ciò che era stato ipotizzato trovò conferma nell'esperimento di Miller-Urey, con il quale fu dimostrata la formazione spontanea di un certo numero di amminoacidi partendo da molecole inorganiche semplici, riproducendo in laboratorio le condizioni dominanti in una terra primordiale. In seguito all'esperienza di Miller-Urey, numerosi esperimenti simili sono stati condotti al fine di comprenderne la sistematicità e come la variazione delle proporzioni dei reagenti di base potesse influire sui prodotti finali. Nessuno di questi, però, aveva a disposizione gli strumenti necessari per indagare in dettaglio i meccanismi tramite i quali la formazione di amminoacidi potesse essere avvantaggiata rispetto alle più stabili e certamente semplici molecole inorganiche. A questo riguardo, oggi la simulazione numerica da principi primi rappresenta un potentissimo strumento di indagine adatto allo studio di tutti quei meccanismi microscopici che stanno alla base dei processi che hanno portato all'origine della vita sulla terra.

Nella prima parte del seminario verranno introdotti due metodi computazionali che si prestano particolarmente all'indagine dei fenomeni base della chimica prebiotica. Nella

seconda metà del seminario, invece, si discuterà dei principali risultati ottenuti negli ultimi anni applicando questi approcci teorico-computazionali e dei possibili sviluppi futuri.

<http://sites.google.com/site/AppuntiDiFisicaMessina/>