



## МОДЕЛИРОВАНИЕ ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ, ВЕДУЩИХ К ЗАРОЖДЕНИЮ ЖИЗНИ

**Айтымова Анна Владимировна**

Аспирант, Казахский национальный университет имени аль-Фараби  
Казахстан, Алматы

### Аннотация

Статья посвящена анализу и моделированию химических процессов, рассматриваемых в качестве основы для зарождения жизни на ранней Земле. Рассматриваются ключевые концепции пребиотической химии, механизмы синтеза органических молекул в абиотических условиях, а также современные экспериментальные и теоретические модели, позволяющие реконструировать возможные сценарии химической эволюции. Особое внимание уделяется роли энергетических факторов, каталитических поверхностей и самоорганизации молекулярных систем.

**Ключевые слова:** зарождение жизни, пребиотическая химия, химическая эволюция, моделирование, абиогенный синтез, самоорганизация.

### Введение

Проблема происхождения жизни является одной из фундаментальных в современном естествознании и находится на стыке химии, биологии, физики и наук о Земле. Несмотря на значительный прогресс в понимании молекулярных основ живых систем, вопрос о том, каким образом из простых неорганических соединений могли сформироваться первые самовоспроизводящиеся химические структуры, остаётся открытым.

Современные научные подходы рассматривают зарождение жизни как результат длительного процесса химической эволюции, протекавшего в специфических условиях ранней Земли. В рамках данного подхода особую роль играет моделирование химических процессов, позволяющее выявить возможные пути образования биомолекул и оценить их устойчивость в абиотической среде.

Целью настоящей статьи является систематизация и анализ основных моделей химических процессов, ведущих к зарождению жизни, а также оценка их теоретической и экспериментальной обоснованности.

## **Пребиотическая химия как основа зарождения жизни**

Пребиотическая химия формирует теоретический фундамент исследований происхождения жизни и изучает реакции, происходившие в отсутствие биологических катализаторов. В центре данного направления находятся процессы синтеза органических соединений из простых неорганических веществ, широко распространённых в первичной атмосфере и гидросфере Земли.

Особое значение имеют реакции образования аминокислот, сахаров, азотистых оснований и жирных кислот, поскольку именно эти соединения составляют структурную и функциональную основу современных биологических систем. Экспериментальные данные свидетельствуют о том, что многие из этих молекул могут формироваться спонтанно при воздействии энергии различной природы, включая электрические разряды, ультрафиолетовое излучение и тепловые градиенты.

Пребиотическая химия также рассматривает вопросы стабильности и накопления органических молекул. Без механизмов концентрации и защиты от разрушения даже успешно синтезированные соединения не могли бы участвовать в дальнейшей химической эволюции. В этом контексте особую роль играют локальные среды, такие как лагуны, гидротермальные системы и минеральные поверхности.

## **Модели абиогенного синтеза органических соединений**

Абиогенный синтез органических соединений является ключевым этапом химической эволюции и активно моделируется в лабораторных и вычислительных условиях. Классические эксперименты показали принципиальную возможность образования биологически значимых молекул в условиях, не требующих участия живых организмов.

Современные модели отходят от упрощённых схем и учитывают геохимическое разнообразие ранней Земли. Рассматриваются как восстановительные, так и слабоокислительные среды, различные источники энергии и широкий спектр реакционных путей. Это позволяет сформировать более реалистичную картину химических процессов, предшествовавших появлению жизни.

Компьютерное моделирование абиогенного синтеза используется для анализа больших реакционных сетей, оценки вероятностей образования конкретных соединений и выявления доминирующих путей химической эволюции. Такие подходы существенно расширяют возможности интерпретации экспериментальных данных.

## **Роль каталитических поверхностей и минеральных матриц**

Минеральные поверхности рассматриваются как ключевой фактор, обеспечивший направленность и эффективность пребиотических химических реакций. Их роль заключается не только в катализе, но и в пространственной организации молекул, что способствует формированию устойчивых структур.

Глинистые минералы, сульфиды железа и никеля, а также оксиды металлов могли выполнять функции природных реакторов, концентрируя органические соединения и снижая энергетические барьеры реакций. Модели взаимодействия органических молекул с минеральными матрицами демонстрируют возможность селективного синтеза и накопления сложных соединений.

Данный подход позволяет объяснить переход от случайного набора молекул к упорядоченным химическим системам, обладающим элементами функциональной специализации.

## **Самоорганизация и формирование протобиологических систем**

Самоорганизация рассматривается как один из ключевых механизмов, обеспечивших переход от неупорядоченной совокупности химических соединений к устойчивым протобиологическим системам. В контексте происхождения жизни данный термин обозначает способность химических систем спонтанно формировать упорядоченные структуры и функциональные связи за счёт внутренних взаимодействий и потоков энергии, без наличия внешнего управляющего агента.

В пребиотических условиях самоорганизация проявлялась в виде формирования пространственно и функционально организованных молекулярных ансамблей. Особое значение придаётся образованию липидных агрегатов, способных к самосборке в водной среде. Такие структуры, включая мицеллы и везикулы, создавали примитивные компартменты, внутри которых могли протекать химические реакции с повышенной эффективностью. Компартментализация рассматривалась как критически важный шаг, обеспечивший локализацию реакционных процессов и защиту молекул от внешних деструктивных факторов.

Другим важным направлением исследований являются автокаталитические циклы — системы реакций, в которых продукты одной реакции ускоряют протекание последующих. Теоретические модели показывают, что автокаталитические сети способны к самоподдержанию, экспоненциальному росту концентраций и конкурентному отбору, что сближает их с примитивными формами метаболизма. Такие системы рассматриваются как возможные предшественники биохимических циклов, характерных для живых организмов.

Значительное внимание уделяется моделированию примитивных метаболических сетей, основанных на простых органических и неорганических реакциях.

В рамках данных моделей анализируется возможность возникновения устойчивых реакционных путей, способных сохраняться в условиях внешних флуктуаций. Поддержание неравновесного состояния, постоянный приток энергии и наличие механизмов регуляции рассматриваются как необходимые условия устойчивой самоорганизации.

Теоретические и вычислительные исследования демонстрируют, что при определённых параметрах среды, таких как концентрация реагентов, температурные градиенты и наличие каталитических поверхностей, самоорганизация является не исключением, а статистически вероятным результатом эволюции сложных химических систем. Это позволяет рассматривать зарождение жизни не как уникальное событие, а как закономерный этап развития материи при наличии подходящих условий.

### **Методологические подходы к моделированию химической эволюции**

Моделирование химической эволюции представляет собой совокупность методов, направленных на реконструкцию процессов, предшествовавших появлению первых живых систем. Современные исследования опираются на интеграцию экспериментальных данных, теоретических концепций и вычислительных технологий, что позволяет компенсировать ограниченность прямых эмпирических наблюдений.

Математическое моделирование используется для описания динамики реакционных сетей, оценки кинетических параметров и анализа устойчивости химических систем. Дифференциальные уравнения и стохастические модели позволяют учитывать влияние случайных флуктуаций, которые играли существенную роль в условиях ранней Земли. Такие подходы дают возможность выявить критические пороги, при которых система переходит от хаотического поведения к упорядоченным режимам.

Методы молекулярной динамики применяются для изучения взаимодействий между отдельными молекулами и их агрегатами. Они позволяют анализировать процессы самосборки, стабильность протобиологических структур и влияние внешних факторов, таких как температура и состав среды. Несмотря на вычислительную сложность, данные методы обеспечивают высокий уровень детализации и позволяют проверять гипотезы о механизмах самоорганизации на молекулярном уровне.

Сетевой анализ используется для исследования структуры и эволюции химических реакционных систем. Рассматривая реакции как элементы сложной сети, исследователи выявляют узловые соединения, доминирующие пути синтеза и механизмы устойчивости. Такой подход способствует пониманию того, каким образом простые химические процессы могли привести к формированию функционально сложных систем.

Несмотря на значительный прогресс, методологические подходы к моделированию химической эволюции сталкиваются с рядом ограничений. К ним относятся неопределённость исходных условий, неполнота экспериментальных данных и необходимость упрощения моделей. В связи с этим особое значение приобретает междисциплинарный подход, объединяющий химию, физику, геологию и биологию, что повышает надёжность интерпретации результатов и расширяет объяснительные возможности теории зарождения жизни.

## **Заключение**

Моделирование химических процессов, ведущих к зарождению жизни, представляет собой мощный инструмент реконструкции ранних этапов эволюции материи. Совокупность современных моделей указывает на то, что переход от неорганических соединений к протобиологическим системам является результатом длительного и многоуровневого процесса.

Несмотря на существующие методологические ограничения, дальнейшее развитие вычислительных методов и экспериментальных технологий открывает перспективы для более глубокого понимания механизмов зарождения жизни как на Земле, так и за её пределами.

## **Литература**

1. Oparin A.I. The Origin of Life. New York: Dover Publications, 1957.
2. Miller S.L., Urey H.C. Organic compound synthesis on the primitive Earth. Science, 1959.
3. Deamer D., Szostak J.W. The Origins of Life. Cold Spring Harbor Laboratory Press, 2010.
4. Hazen R.M. Genesis: The Scientific Quest for Life's Origin. Washington, 2005.
5. Russell M.J., Hall A.J. The emergence of life from iron monosulphide bubbles. Journal of the Geological Society, 1997.
6. Smith E., Morowitz H.J. The Origin and Nature of Life on Earth. Cambridge University Press, 2016.
7. Pross A. What is Life? How Chemistry Becomes Biology. Oxford University Press, 2012.