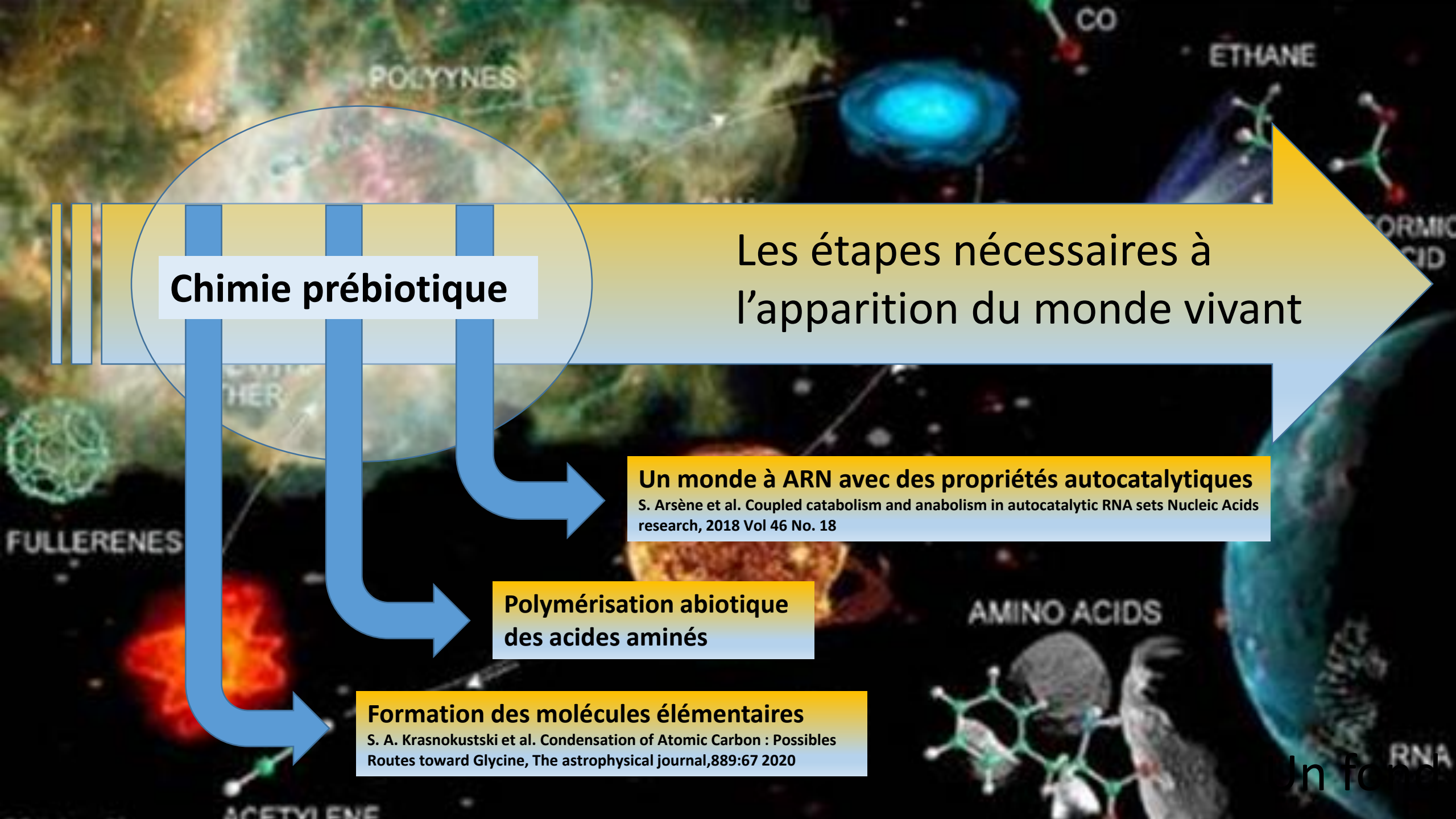
Réactivité en conditions extrêmes

Enjeux relatifs aux toutes premières étapes nécessaires à l'apparition de la vie

Projet Défi origine MITI 2018-2020
Formation de molécules prébiotiques en conditions extrêmes
MOLEXTR

Laboratoire de Géologie de Lyon
Terre planètes Environnement



Chimie prébiotique

Les étapes nécessaires à l'apparition du monde vivant

Un monde à ARN avec des propriétés autocatalytiques

S. Arsène et al. Coupled catabolism and anabolism in autocatalytic RNA sets Nucleic Acids research, 2018 Vol 46 No. 18

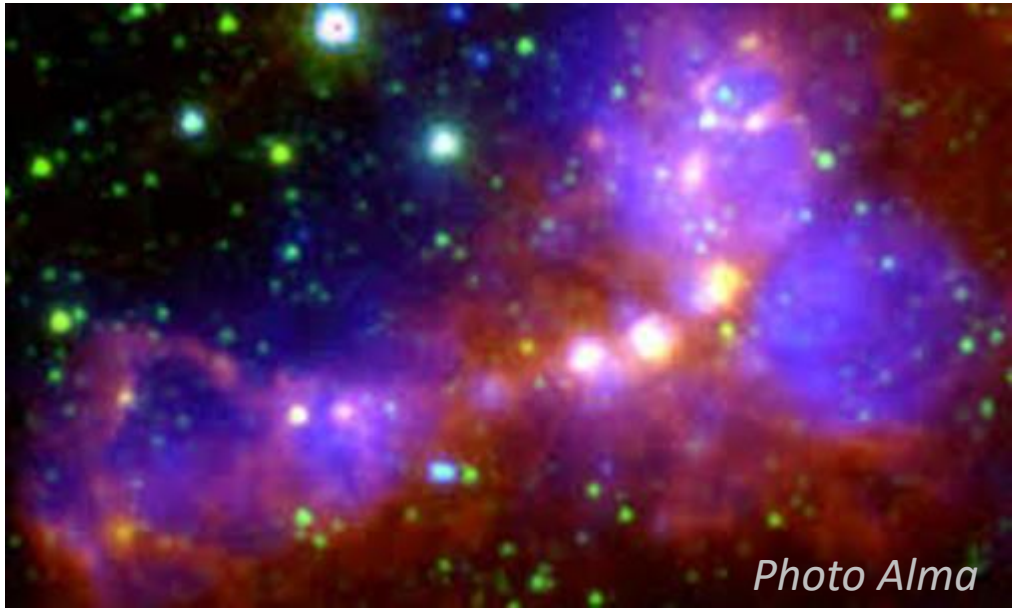
Polymérisation abiotique des acides aminés

Formation des molécules élémentaires

S. A. Krasnokustski et al. Condensation of Atomic Carbon : Possibles Routes toward Glycine, The astrophysical journal,889:67 2020

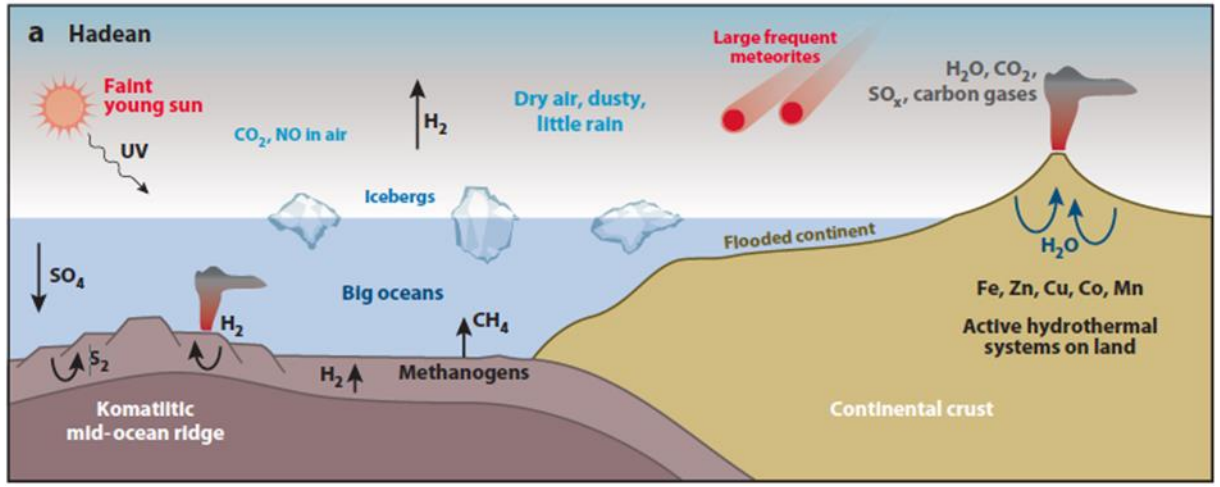
Formation de molécules prébiotiques en conditions extrêmes
MOLEXTR

Différentes conditions sont étudiées pour comprendre et modéliser l'émergence des molécules prébiotiques et de leurs interactions.



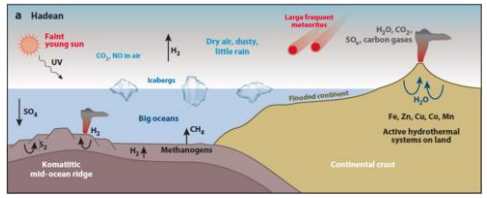
Des molécules formées en environnement astrophysique et apportées sur terre par les météorites et comètes

Des molécules formées sur terre



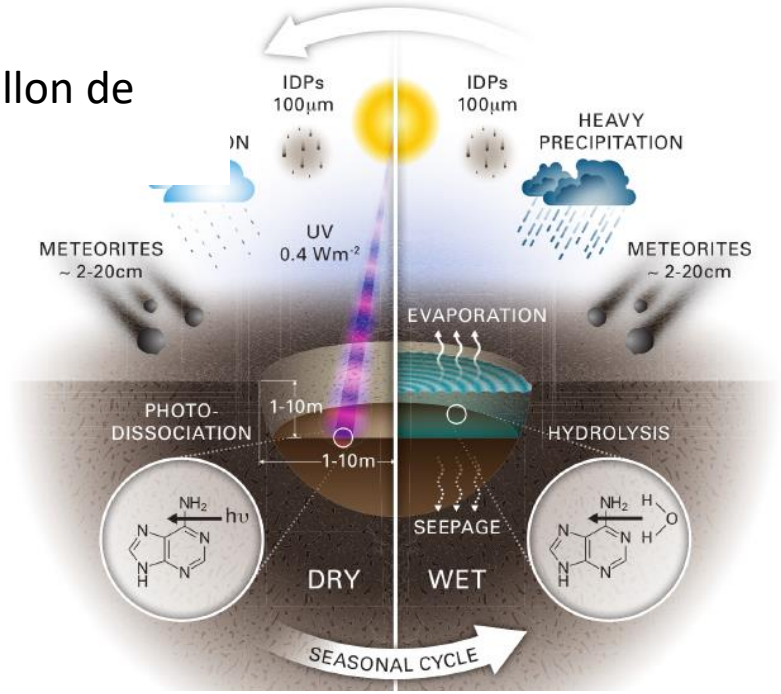
Représentation de l'environnement terrestre hadéen, d'après Arndt & Nisbet (2012)

Un point commun : des réactifs en conditions extrêmes et une dynamique hors équilibre associée à différentes voies de réaction.

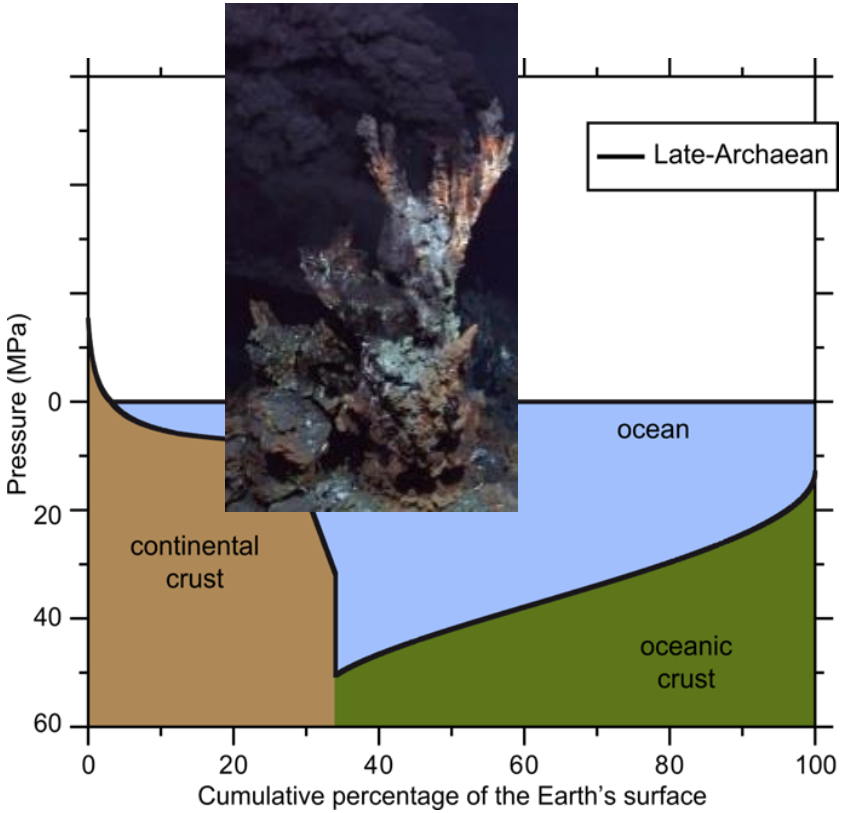


Des molécules formées sur terre

Le bouillon de culture



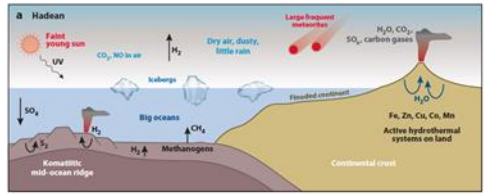
Les conditions hydrothermales



PNAS Origin of the RNA world: The fate of nucleobases in warm little ponds PNAS October 24, 2017 114 (43) 11327-11332

ACS EARTH AND SPACE CHEMISTRY Spontaneaous polymerisation of Glycine under Hydrothermal conditions ACS Earth Space Chem. 2019,3,1669-1677

nature REVIEWS Abiotic synthesis of amino acids in the recesses of the oceanic lithosphere Nature volume 564, pages59–63(2018)

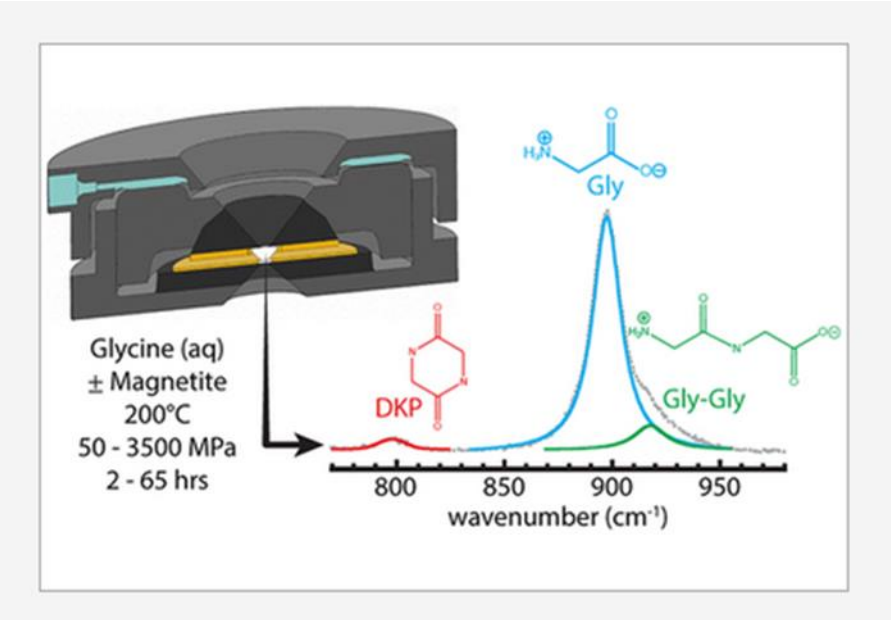


Des molécules formées sur terre

Spontaneaous polymerisation of Glycine under Hydrothermal conditions ACS Earth Space Chem. 2019,3,1669-1677

Isabelle Daniel et collaborateurs

Laboratoire de Géologie de Lyon
Terre planètes Environnement



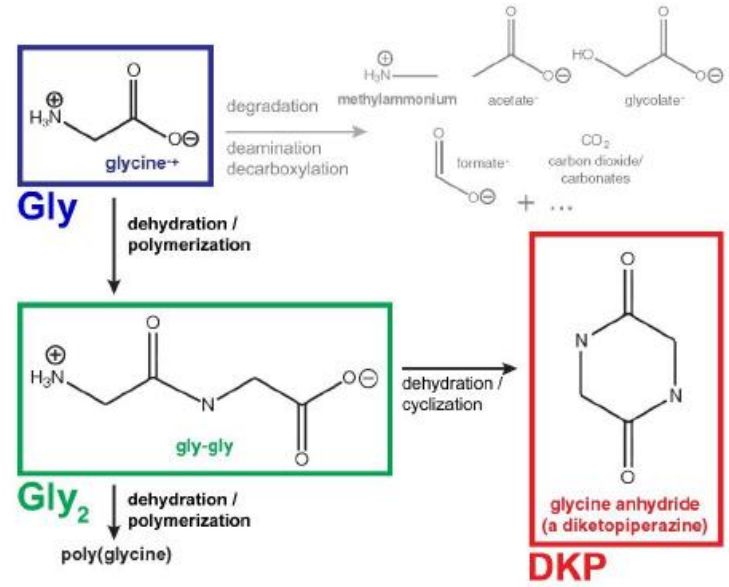
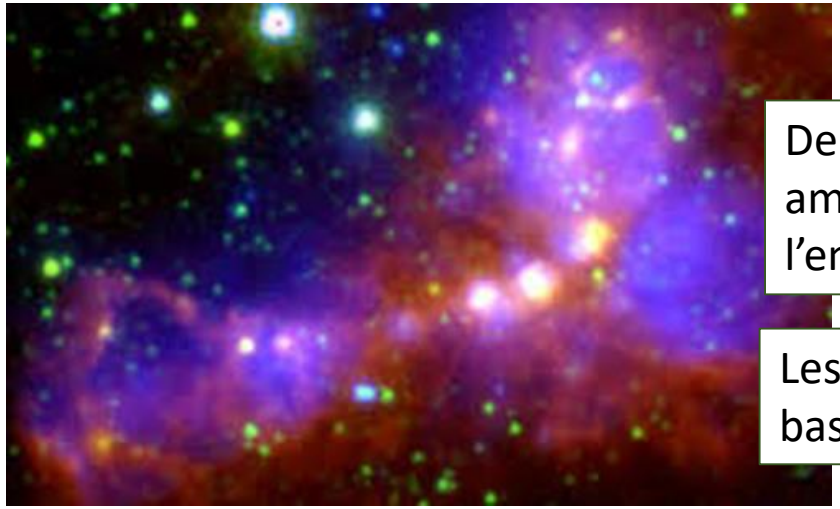


Fig. S1. Schematic reaction pathways of glycine, with polymerization and degradation products. Modified after Cox and Seward [4].

Observation de la réaction de polymérisation/déhydration de la glycine en conditions hydrothermales

Des molécules formées en environnement astrophysique

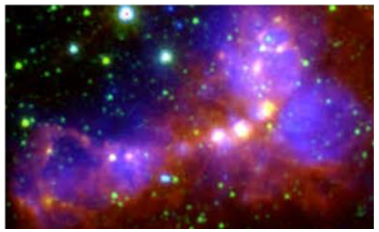


De nombreuses molécules organiques incluant les acides aminés et les nucléotides peuvent être formées dans l'environnement astrophysique

Les molécules dans l'environnement astrophysique : basses températures et irradiation

Des réactifs solvatés dans une nanogoutte froide soumise à une forte excitation ultra-rapide

- Une énergie déposée localement dans une molécule sur des temps très courts.
- La thermalisation dans ces nanogouttes moléculaires froides suite à ce dépôt d'énergie met en jeu une compétition entre évaporation d'une ou plusieurs molécules de la nanogoutte et la formation de nouvelles molécules

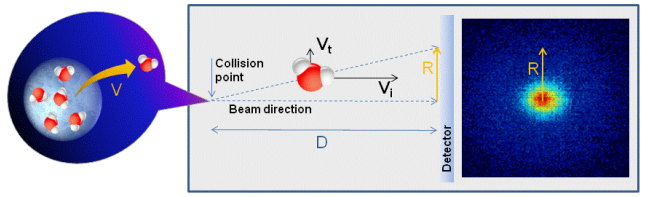


Sonder la thermalisation dans une nanogoutte

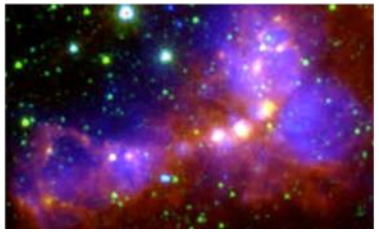
- Un goutte à goutte pour observer nanogoutte par nanogoutte la thermalisation dans des millions de nanogouttes
- Des nanogouttes contenant un nombre contrôlé de molécules
- Observation de la thermalisation dans une fenêtre de temps court : 200ns
- Mesure de la distribution de vitesse des molécules évaporées : une sonde de la thermalisation

DIAM : *la méthode COINTOF-VMI*

F. Berthias et al. Rev. Sci. Instrum. ***2017****, 88, 083101*
C. Teyssier et al. Rev. Sci. Instrum. ***2014****, 85, 015118*
G. Bruny et al. Rev. Sci. Instrum. ***2012****, 83, 013305*

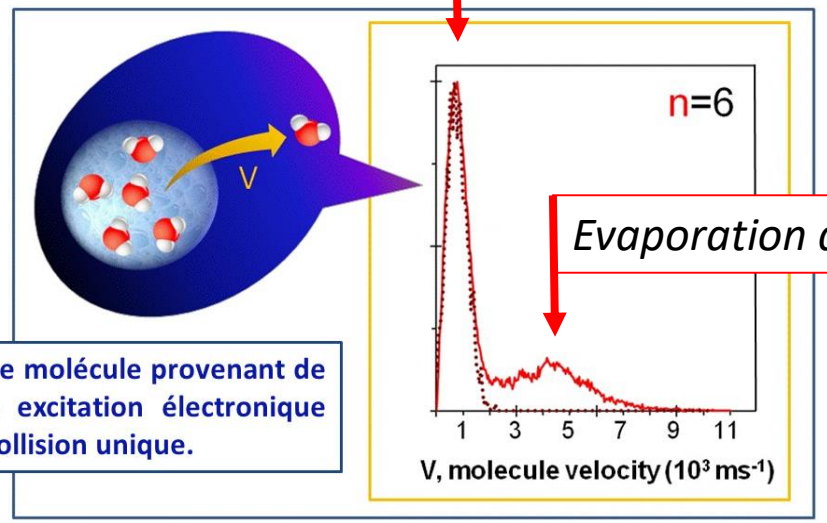


Articulée à DFT et Dynamique moléculaire statistique
(*Florent Calvo, LIPhy – Grenoble*)



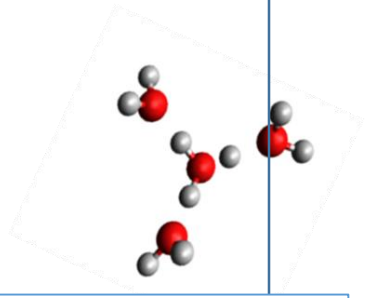
Evaporation non ergodique dans les nanogouttes d'eau

Evaporation type Maxwell-Boltzmann



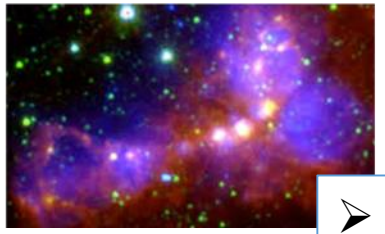
Evaporation à haute vitesse

Evaporation d'une molécule provenant de $H^+(H_2O)_{n=6}$ après excitation électronique induite par une collision unique.

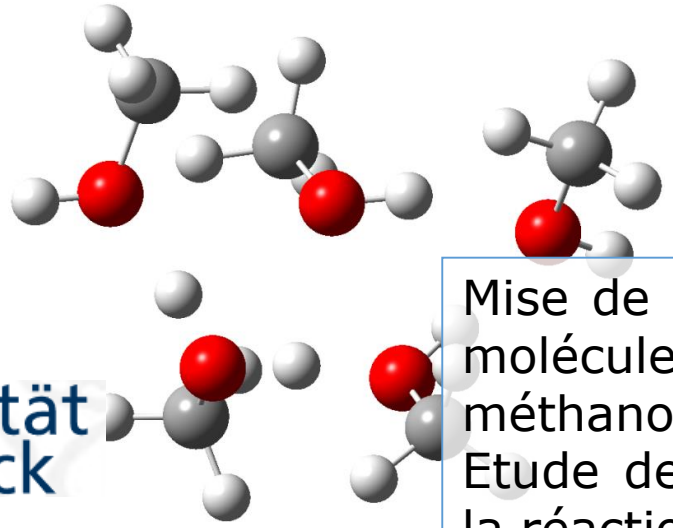


Velocity of a Molecule Evaporated from a Water Nanodroplet: Maxwell–Boltzmann Statistics versus Non-Ergodic Events, Angew. Chem. Int. Ed. 2015, 54, 14685 –14689.

Dans le cas du tétramère (4 molécules) à 100K avant excitation électronique d'une molécule : Pour 30% des événements, on observe l'évaporation à haute vitesse avant complète redistribution de l'énergie dans la l'ensemble de la nanogoutte



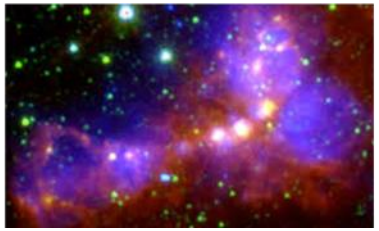
- *Récemment ALMA a observé en dehors de notre galaxie des molécules organiques relativement complexes comme le méthanol et le dimethyl ether.*
- *La présence des nuages de méthanol est, par ailleurs, le reflet d'une remarquable persistance au rayonnement cosmique.*



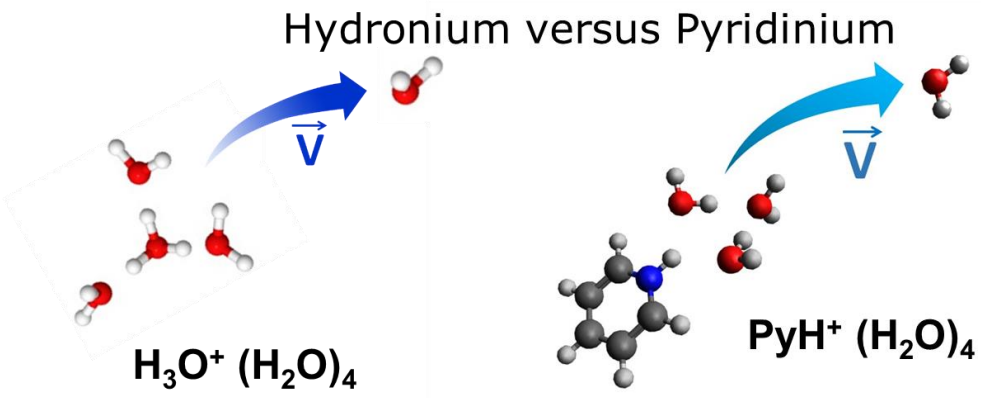
Thermalisation dans une nanogoutte de méthanol

Mise de la formation du dimethyl ether par élimination d'une molécule d'eau lors de la thermalisation d'une nanogoutte de méthanol.
Etude de la compétition entre évaporation d'une molécule et la réaction d'élimination d'une molécule d'eau.

Laboratoire de Géologie de Lyon
Terre planètes Environnement



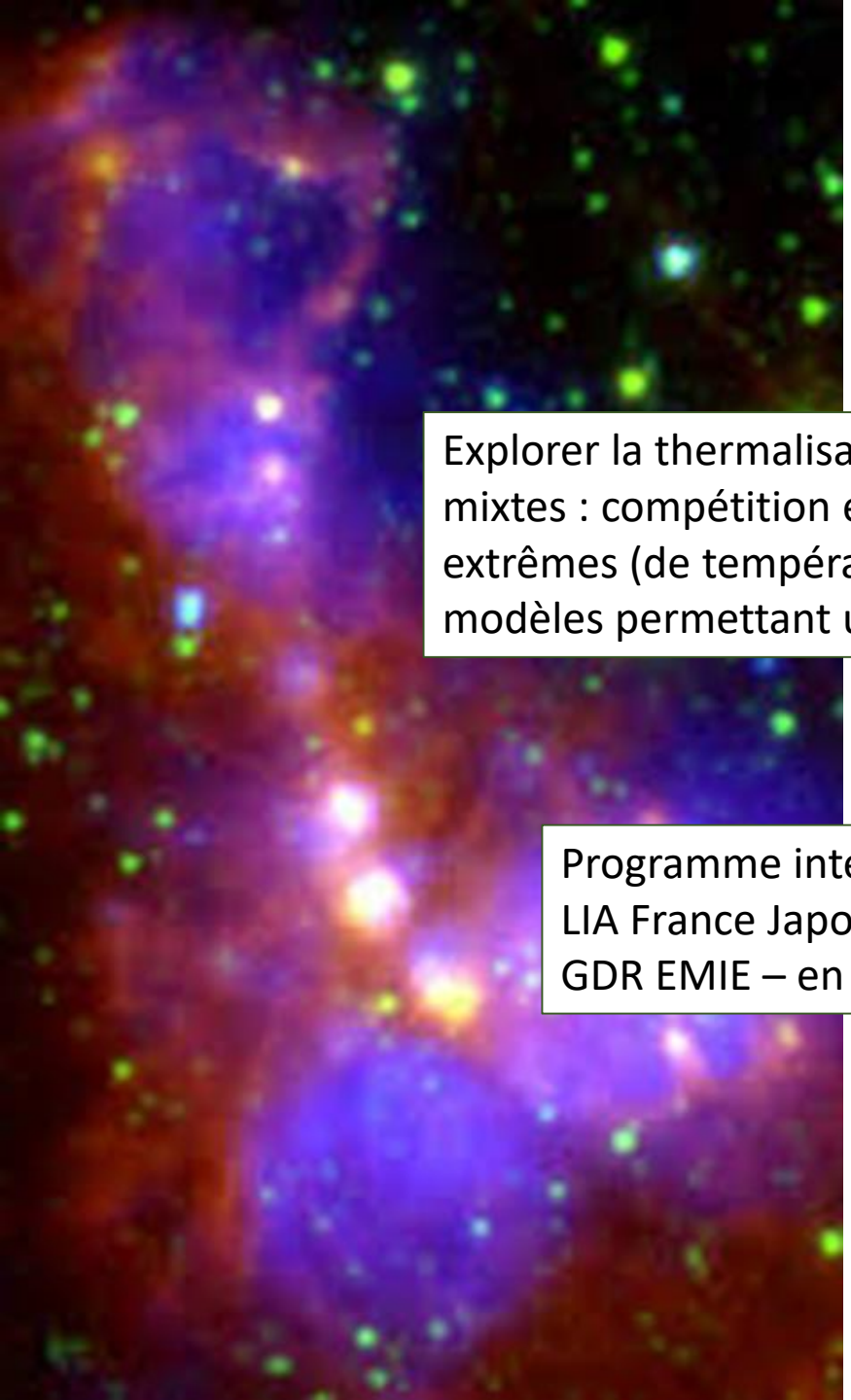
Thermalisation dans des nanogouttes mixtes eau-pyridine



Le pyridinium, un des ions les plus abondants dans la stratosphère, était considéré comme inactif.

Mise en évidence du rôle de la pyridine dans les premières étapes de la formation des aérosols.

PNAS *Impact of a hydrophobic ion on the early stage of atmospheric aerosol formation* **PNAS 2019 116 (45) 22540-22544**



Priorité du master projet DIAM Origine IN2P3

Explorer la thermalisation dans des nanogouttes moléculaires mixtes : compétition évaporation versus réactivité en conditions extrêmes (de température et d'irradiation) en ciblant des systèmes modèles permettant une étude combinée expérience et théorie.

Besoins structurants

Programme inter-instituts IN2P3-INSU
LIA France Japon (intégrer la collaboration IP2I-AMO RIKEN)
GDR EMIE – en renouvellement