

## Proposition de thèse – Année 2022

**Thématique : Nanogouttes en conditions extrêmes**

**Sujet de thèse :** Compétition entre les processus de thermalisation dans des nanosystèmes moléculaires en conditions extrêmes

**Directeur de thèse :** Michel Farizon

**Téléphone :** +33 4 72 44 84 01

**Email :** [m.farizon@ip2i.in2p3.fr](mailto:m.farizon@ip2i.in2p3.fr)

**Adresse :** IP2I Lyon – Bureau 506  
Domaine Scientifique de la Doua – Bât. Paul Dirac  
4 rue Enrico Fermi – 69622 Villeurbanne Cedex - France

### Description du travail demandé :

La question de l'origine du vivant est un sujet largement interdisciplinaire nécessitant l'étude de nombreuses étapes intervenant à des échelles de temps et d'espace très variées : la formation des noyaux atomiques, des molécules inorganiques, des molécules précurseurs organiques, la formation des briques élémentaires du vivant et la formation en conditions abiotiques des polymères fonctionnels nécessaires à l'apparition du vivant primitif. Avec le développement de l'instrumentation astrophysique, une phase nouvelle d'observation a été ouverte notamment avec le télescope Atacama Large Millimeter/Submillimeter Array (ALMA) et de nombreuses molécules complexes sont observées dans l'espace, dans des contextes variés. L'enjeu de la compréhension des mécanismes de leur formation dépasse la seule question de l'origine du vivant. Dans ce contexte, le projet DIAM (Dispositif d'Irradiation de nanosystèmes moléculaires) construit à l'Institut de Physique des deux infinis de Lyon (IP2I) cible les premières étapes de la formation des briques élémentaires du vivant en conditions astrophysiques. L'objectif est l'investigation de situations modèles —des agrégats ou nanogouttes moléculaires d'intérêt astrophysique isolés en phase gazeuse— en couplant des mesures expérimentales (IP2I/DIAM-IN2P3) et des développements théoriques (Liphy-INP) de manière à caractériser l'influence de l'environnement : faible densité, basses températures, et irradiation.

Les résultats obtenus récemment sur ce dispositif ont mis en évidence que les premières étapes de la formation des aérosols atmosphériques sont favorisées par la présence de pyridine, molécule produite en abondance par l'activité humaine [1]. Grâce à l'apport de simulations de dynamique moléculaire statistique (LIPhy), nous avons montré comment une impureté hydrophobe comme la pyridine modifie les propriétés de thermalisation. En comparant aux résultats antérieurs sur des nanogouttes d'eau pure [2-5], l'évaporation de molécules d'eau s'est avérée beaucoup plus lente pour des nanogouttes dopées avec une impureté hydrophobe, montrant que ces contaminants favorisent les premières étapes de la nucléation des aérosols atmosphériques. Ce type d'approche est pertinent dans le contexte astrophysique en lien avec la question de la formation des molécules prébiotiques : observer et modéliser la relaxation dans des nanosystèmes moléculaires sous irradiation en conditions extrêmes contribue à la compréhension de milieux complexes présents dans le contexte astrophysique.

L'implantation d'une source de nanogouttes de gaz rare sur le dispositif DIAM doit permettre d'étendre les travaux déjà entrepris sur les molécules d'intérêt prébiotique aux environnements ultra-froids afin d'aborder sous différents angles les questions scientifiques d'importance en astrochimie et en physique de l'atmosphère. Une nanogoutte de gaz rare intervient ici comme une sorte de nanocryostat permettant d'étendre le champ des observations sur la relaxation post-irradiation de systèmes moléculaires d'intérêt astrophysique. Le point ici est d'observer la relaxation de nanosystèmes d'intérêt astrophysique déposés dans ce nanocryostat après irradiation. L'objectif principal de ce travail de thèse sera d'observer la compétition entre les processus de thermalisation dans des nanosystèmes modèles d'importance dans le contexte astrophysique. Les produits formés lors de la réactivité intra-agrégat seront identifiés et les canaux de production seront quantifiés. Différentes situations modèles variées seront étudiées pouvant aller jusqu'à la formation de polypeptides lors de réaction de polymérisation à basse température. Les agrégats moléculaires envisagés sont de différentes natures : eau, méthanol, pyridine, etc.

Ce sujet de thèse, alliant expérience et modélisation, s'inscrit dans le domaine de l'astrophysique de laboratoire s'appuyant sur des développements en physique auprès des accélérateurs, spectrométrie de masse, sources d'ions, méthodes d'analyse de données multiparamétriques de la physique de hautes énergies, techniques de simulations, physique moléculaire, etc.

[1] L. Feketeová, et al., Proc. Natl. Acad. Sci. (2019) DOI: 10.1073/pnas.1911136116 [2] H. Abdoul-Carime et al., Angew. Chem. Int. Ed. 54, 14685 (2015)

[3] F. Calvo et al., Eur. Phys. J. D 71, 110 (2017)

[4] F. Berthias et al., Phys. Chem. Chem. Phys. 20, 18066 (2018)

[5] F. Berthias et al., J. Chem. Phys. 149, 084308 (2018)