

0 desafio da complexidade

Edgar Mendoza

Departamento de Astronomia

IAG, Universidade de São Paulo

emendoza@usp.br, emr1918@gmail.com

Astronomia ao meio-dia

14/09/2017

intro

○○○○○○○

dois casos

○○○○○

tempo de conversão

○○○○

complexidade

○○○○○

Index

Dos átomos às moléculas

Dois casos

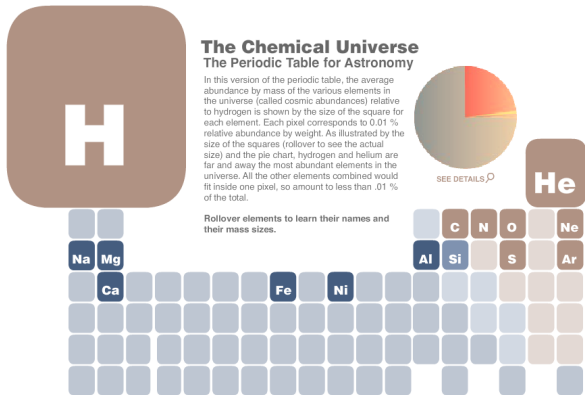
tempo de conversão

complexidade a vista

Um caminho trilhado: dos átomos às moléculas

Tabela periódica e abundâncias

1. Imagem do CHANDRA X-ray Observatory.
http://http://chandra.harvard.edu/resources/flash/periodic_tables.html
2. 1976 Ref. Chemistry, Vol 49, No. 3, p17-18



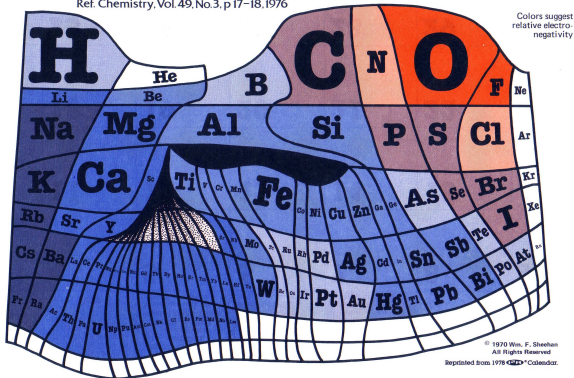
Um caminho trilhado: dos átomos às moléculas

Tabela periódica e abundâncias

1. Imagem do CHANDRA X-ray Observatory.
http://http://chandra.harvard.edu/resources/flash/periodic_tables.html
2. 1976 Ref. Chemistry, Vol 49, No. 3, p17-18

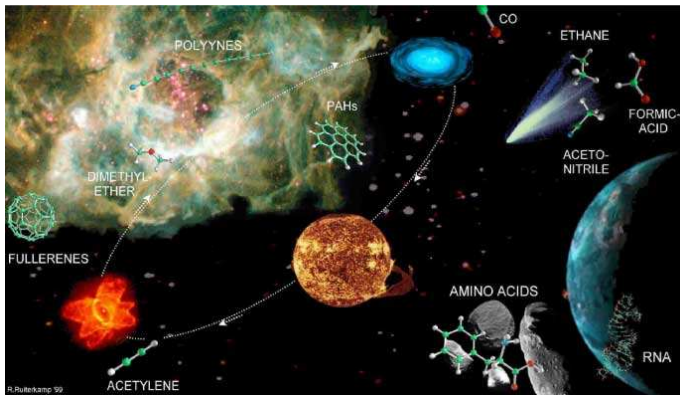
The Elements According to Relative Abundance

A Periodic Chart by Prof. Wm. F. Sheehan, University of Santa Clara, CA 95053
Ref. Chemistry, Vol. 49, No. 3, p 17-18, 1976



Um caminho trilhado: dos átomos às moléculas

Tudo que pode surgir de uns quantos elementos...



©2000 R. Ruiterkamp

<http://home.strw.leidenuniv.nl/~pascale/astrochemistry.html>

Um caminho trilhado: dos átomos às moléculas

-Criar correlações entre essas unidades, criar ordem a partir dos movimentos caóticos que se originam no estado de equilíbrio-

Fragmento do livro *tão somente uma ilusão* (Ilya Prigogine)



<https://www.edge.org/response-detail/27023>

Um caminho trilhado: dos átomos às moléculas

-Criar correlações entre essas unidades, criar ordem a partir dos movimentos caóticos que se originam no estado de equilíbrio-

Fragmento do livro *tão somente uma ilusão* (Ilya Prigogine)

2017 : WHAT SCIENTIFIC TERM OR CONCEPT OUGHT TO BE MORE WIDELY KNOWN?

In the News [15] | Contributors [206] | View All Responses [206]



Steven Pinker

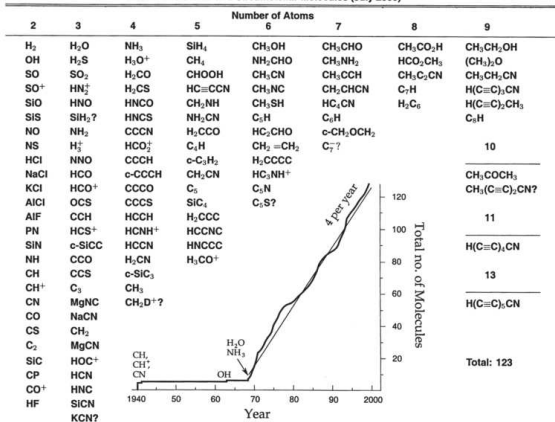
Johnstone Family Professor, Department of Psychology, Harvard University; Author, The Sense of Style

The Second Law of Thermodynamics

<https://www.edge.org/response-detail/27023>

H, C, N, O, P, S

Known Interstellar and Circumstellar Molecules (July 2000)

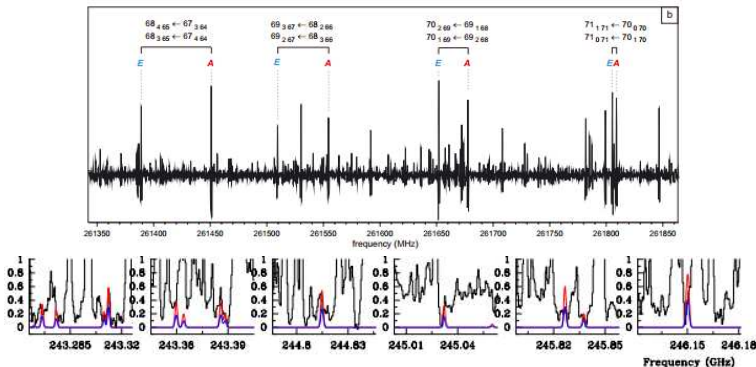


Microwave and laser spectroscopy of carbon chains and rings.
From the journal: Chem. Soc. Rev., 2001, 30, 177 -185

Uma tabela atualizada incluindo moléculas extragalácticas pode ser encontrada em
<https://www.astro.uni-koeln.de/cdms/molecules>

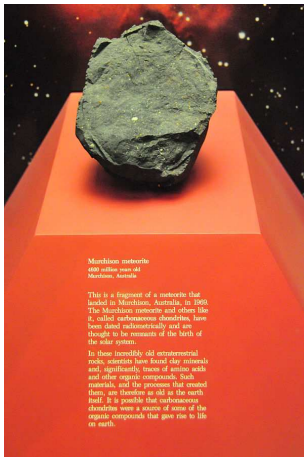
Espectros no laboratório, espectros com telescópios

Catálogos como JPL, CDMS e NIST¹ reúnem centenas de frequências, as quais são obtidas através de métodos teóricos e/ou experimentais.
 Busca por emissão de $\text{CH}_3\text{C}=\text{OOCH}=\text{CH}_2$ em Orion KL



Referência: Kolesniková et al. 2015. A&A, 577, A91

¹<http://www.astro.uni-koeln.de/cdms/> and <https://spec.jpl.nasa.gov/ftp/pub/catalog/catform.html> and <https://physics.nist.gov/cgi-bin/micro/table5/start.pl>

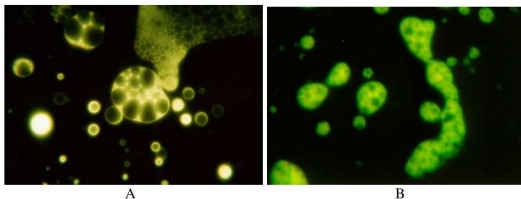


Um *delivery* espacial (e especial)

Murchison meteorite specimen at the National Museum of Natural History (Washington)

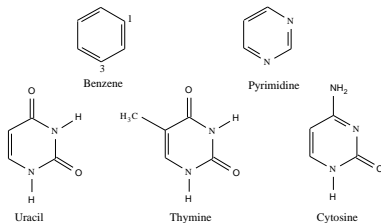
Imagem tomada de Wikipedia

Meteorito Murchison: um caso particular



Fluorescência do (a) meteorito Murchison e (b) de gelos interestelares (laboratório) (Allamandola & Hudgins 2003)

Table 1. Nucleobases identificadas no meteorito Murchison (Glavin et al. 2004, Martins et al. 2008).



Estrutura molecular de nucleobases.

Nucleobase	Concentração (ppb)
Adenine	204
Cytosine	< 11
Thymine	< 255
Guanine	< 16
Uracil	145
Hipoxanthine	232
Xanthine	356

Index

Dos átomos às moléculas

Dois casos

tempo de conversão

complexidade a vista

-Reconhecer a complexidade, encontrar os instrumentos para descrevê-la e efetuar uma releitura dentro do contexto atual do ser com a natureza-

Fragmento do livro *tão somente uma ilusão* (Ilya Prigogine)

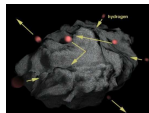
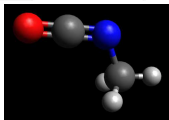
eso1718pt-br — Nota de imprensa científica

ALMA descobre ingrediente da vida em torno de estrelas bebês do tipo solar

8 de Junho de 2017



O ALMA observou estrelas como o Sol numa fase muito inicial da sua formação e descobriu traços de isocianato de metila – um bloco constituinte da vida. Esta é a primeira vez que se detecta esta molécula prebiótica em protostrelas do tipo solar, isto é estrelas do tipo da protoestrela que deu origem ao Sol e consequentemente ao Sistema Solar. Esta descoberta ajuda os astrónomos a entenderem melhor a origem da vida na Terra.



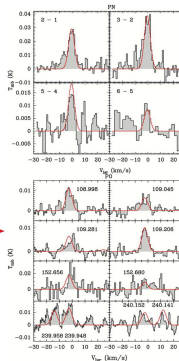
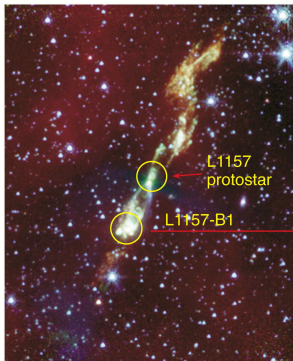
1. Em astroquímica, moléculas orgânicas complexas são essas com mais de 6 átomos onde pelo menos um deve ser C
2. Complexidade molecular → abundância, diversidade, coerência

A região de choque L1157-B1

Molecular complexity with the ASAI Large Program

PIs: B. Lefloch & R. Bachiller

Astrochemical Surveys At IRAM



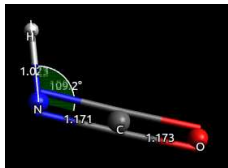
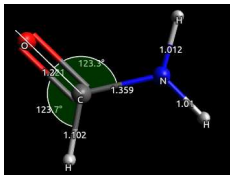
Linhas de PN e PO detectadas em L1157-B1

Lefloch, Vastel, Viti, Jimenez-Serra, Codella, Podio, Ceccarelli, Mendoza, Lepine & Bachiller (2016) MNRAS, 462, 3937.

Imagem tomada de

<http://www.iram-institute.org/EN/news/2017/143.html> (NASA/Spitzer)

estruturas minimalistas: NH_2CHO e HNCO



pre-biotic chemistry



?

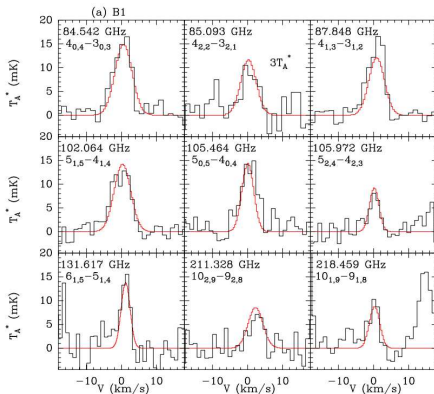
→

time
conditions
building blocks
entropy
...



estruturas minimalistas: NH_2CHO e HNC O Detecção de NH_2CHO e HNC O com ASAI protoestelares

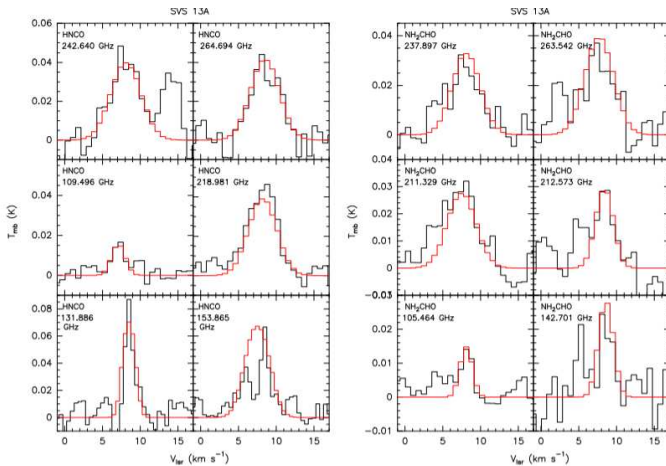
1. O caso de L1157-B1 (Mendoza et al. 2014)
2. Identificação numa amostra de regiões protoestelares (López-Sepulcre et al. 2015)



estruturas minimalistas: NH_2CHO e HNC O

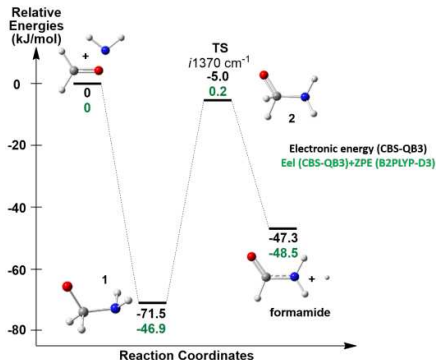
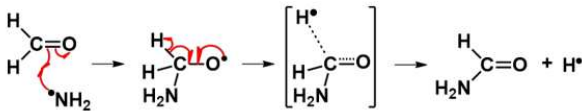
Deteção de NH_2CHO e HNC O com ASAI protoestelares

1. O caso de L1157-B1 (Mendoza et al. 2014)
2. Identificação numa amostra de regiões protoestelares (López-Sepulcre et al. 2015)



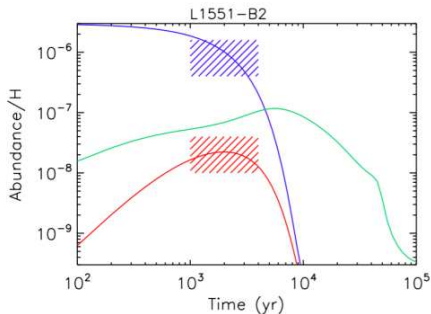
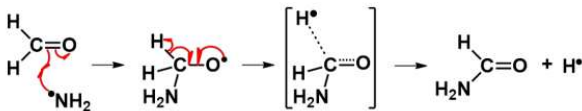
Formação de NH₂CHO em fase gasosa

Estudo considerando energia e cinética química (Barone et al. 2015. MNRAS, 453, L31)



Formação de NH_2CHO em fase gasosa

Estudo considerando energia e cinética química (Barone et al. 2015, MNRAS, 453, L31)



intro
○○○○○○○

dois casos
○○○○○

tempo de conversão
○○○○

complexidade
○○○○○

Index

Dos átomos às moléculas

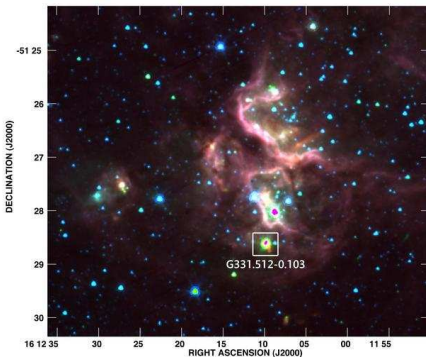
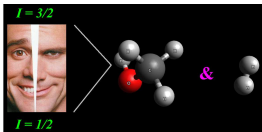
Dois casos

tempo de conversão

complexidade a vista

A assinatura espectral do metanol (CH_3OH)

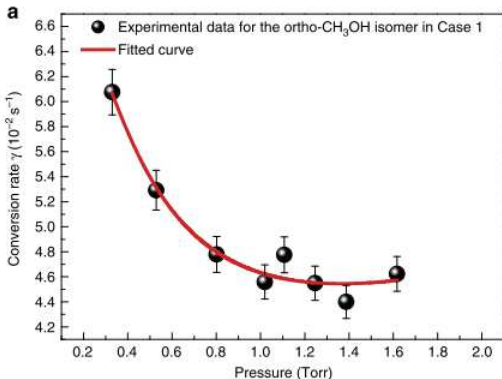
A orientação dos spins do metanol define se a molécula é *orto* ou *para*. Tal característica aparece nos espectros.



O Meio Interestelar como laboratório de prova

Processos de conversão de spin

1. Em fase gasosa (ver Sun, Ge, & Zheng 2015. Nat. Commun. 6:6877)
2. Em gelos (ver Lee et al. 2006. Science, 311, 365)



O Meio Interestelar como laboratório de prova

Processos de conversão de spin

1. Em fase gasosa (ver Sun, Ge, & Zheng 2015. Nat. Commun. 6:6877)
2. Em gelos (ver Lee et al. 2006. Science, 311, 365)

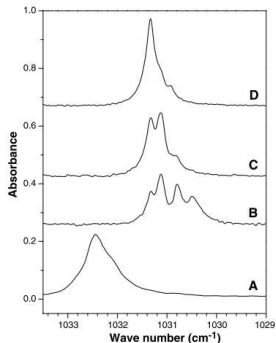
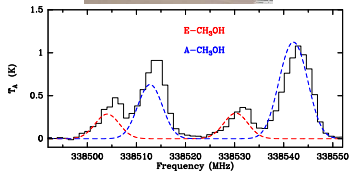


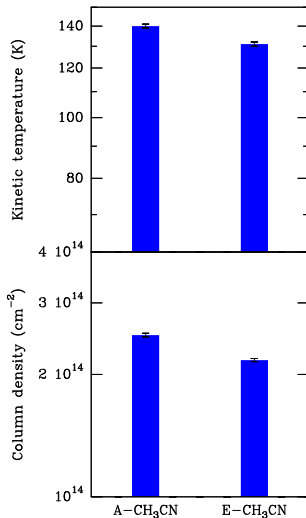
Fig. 1. Partial IR absorption spectra of the C–O stretching mode of matrix-isolated CH_3OH . (A) $\text{CH}_3\text{OH}/\text{Ne}$ (1/5000). (B) $\text{CH}_3\text{OH}/p\text{-H}_2$ (1/5000) after deposition. (C) Annealing of $\text{CH}_3\text{OH}/p\text{-H}_2$ for 2 hours at 5 K. (D) Sample in (B) after 70 hours in darkness at 3.5 K. For each acquisition of spectral data, 200 scans corresponding to a resolution of 0.05 cm^{-1} were accumulated. The acquisition process took ~ 1 hour, during which time the sample was held at 3.5 K.

O caso de G331



✓ Observações feitas com APEX
(Mendoza in prep.)

<http://www.apex-telescope.org/pictures/>



Equilíbrio e tempo das populações orto e para

1. E/A - CH_3CN em TMC-1 (Minh et al. 1993. A&A, 267, 229)
2. E/A - CH_3OH em objetos estelares jovens (Wirström et al. 2011. A&A, 533, A24)

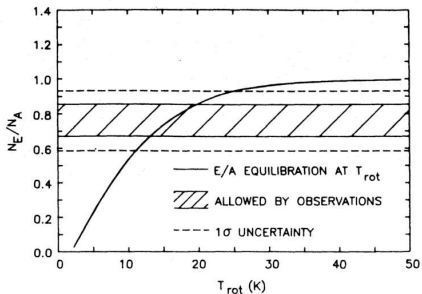


Fig. 2. Abundance ratio for E -type relative to A -type CH_3CN . Solid curve is Boltzmann distribution at temperature T_{rot} , corresponding to an equilibrium population distribution. Hatched area corresponds to the ratio consistent with present observations, under various assumptions (see text), with 1σ measurement uncertainty indicated by dashed lines

Equilíbrio e tempo das populações orto e para

1. E/A - CH_3CN em TMC-1 (Minh et al. 1993. *A&A*, 267, 229)
2. E/A - CH_3OH em objetos estelares jovens (Wirström et al. 2011. *A&A*, 533, A24)

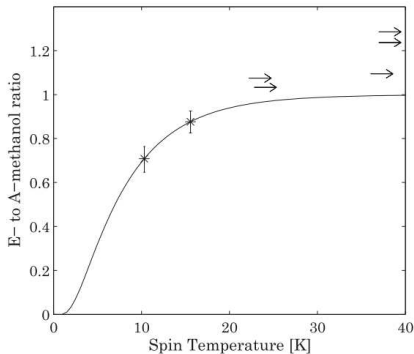


Fig. 7. The equilibrium E- to A- methanol ratio as a function of nuclear spin temperature (solid curve). Ratios <1 observed towards our sources are plotted as stars according to this relation, errorbars indicating effect of a 10% difference in the assumed T_{ex} for A-methanol. Horizontal arrows represent sources where ratios >1 according to the y-scale, and are drawn from the equivalent spin temperature of the lower errorbar.

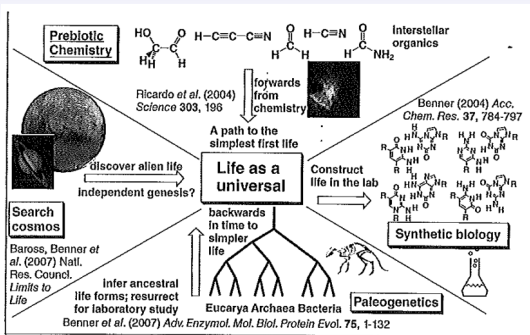
Index

Dos átomos às moléculas

Dois casos

tempo de conversão

complexidade a vista

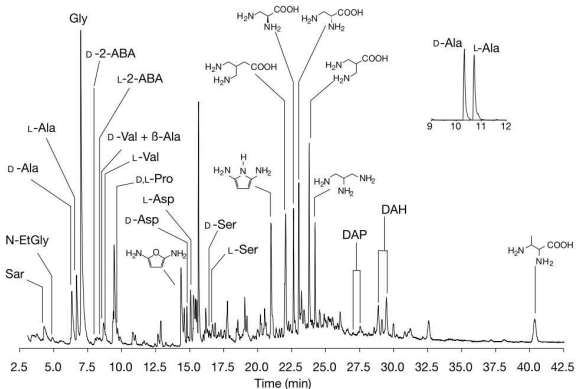


(Benner et al. 2011)

- Whitesides Research Group <http://gmwgroup.harvard.edu/>
- Hanczyc Lab, laboratory for Artificial Biology <http://www.martinhanczyc.com/>

simetria e flutuações: aminoácidos em gelos

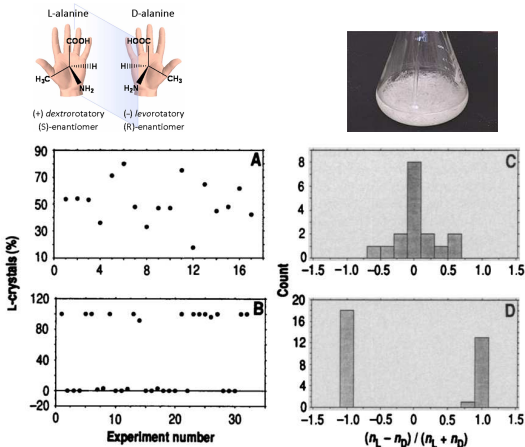
1. Gelo de composição: $\text{H}_2\text{O}:\text{CH}_3\text{OH}:\text{NH}_3:\text{CO}:\text{CO}_2 = 2:1:1:1:1$
2. Temperatura = 12 K. Irradiação com fótons UV



Muñoz-Caro et al. 2002. Nature, 416, 403

simetria e flutuações: aminoácidos em gelos

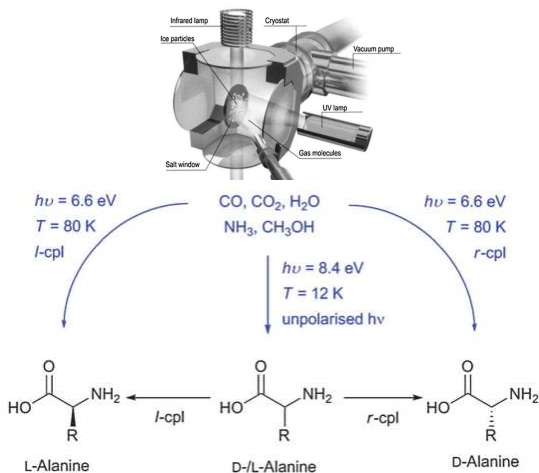
Material genético: aminoácidos (L) e açúcares (D)
(ver Sintra-Grilo et al. 2010, Evans et al. 2012)



Kondepudi et al. 1990. Science, 250, 975

Excesso enantiomérico terrestre

Origem da assimetria: Síntese ou degradação de aminoácidos por fótons UV polarizados (Evans et al. 2012, Modica et al. 2014)



-A matéria em equilíbrio é cega, fora dele percebe as minúsculas diferenças essenciais para a construção paulatina de sistemas altamente coerentes e complexos-

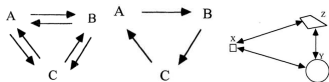
Fragmento do livro *Tão somente uma ilusão?* de Ilya Prigogine



Experimental Models of Primitive Cellular Compartments: Encapsulation, Growth, and Division. Hanczyc, Fujikawa & Szostak. 2003, *Sci*, 5645, 618

em resumo: molecular complexity

Uma contribuição importante seria a do estudo de processos de condução térmica, difusão e reações químicas para o MI



$$R_f = k_f a_x a_y \quad R_r = k_r a_z^2$$

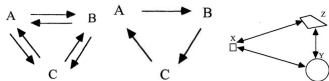
$$\frac{1}{V} \frac{dS}{dt} = R(R_f - R_r) \ln \left(\frac{R_f}{R_r} \right) \geq 0$$

Modern Thermodynamics. D. Kondepudi & I. Prigogine 1998



em resumo: molecular complexity

Uma contribuição importante seria a do estudo de processos de condução térmica, difusão e reações químicas para o MI



$$R_f = k_f a_x a_y \quad R_r = k_r a_z^2$$

$$\frac{1}{V} \frac{dS}{dt} = R(R_f - R_r) \ln \left(\frac{R_f}{R_r} \right) \geq 0$$

Modern Thermodynamics. D. Kondepudi & I. Prigogine 1998

