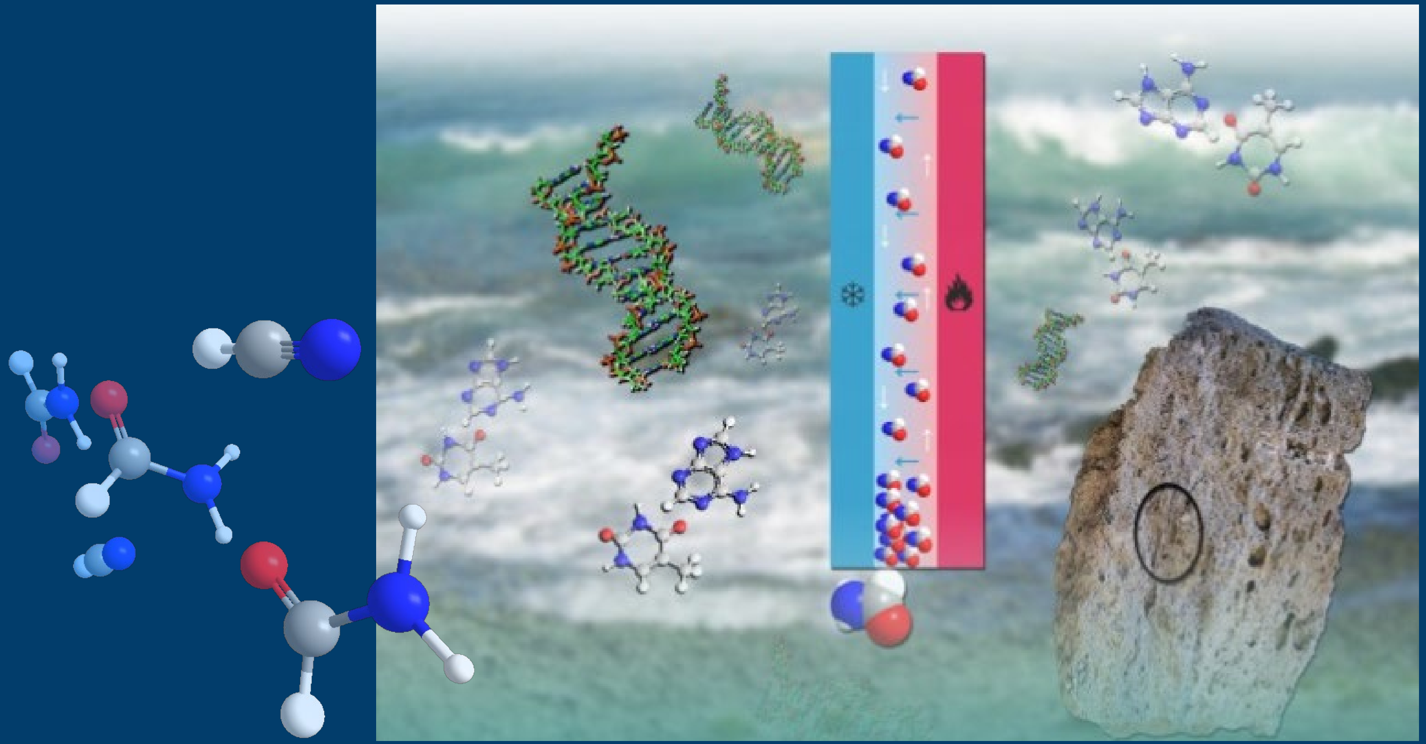
WIE KÖNNTE DAS LEBEN AUF DER ERDE ENTSTANDEN SEIN?

08.12.2022 I SIMONE WIEGAND

Doreen Niether

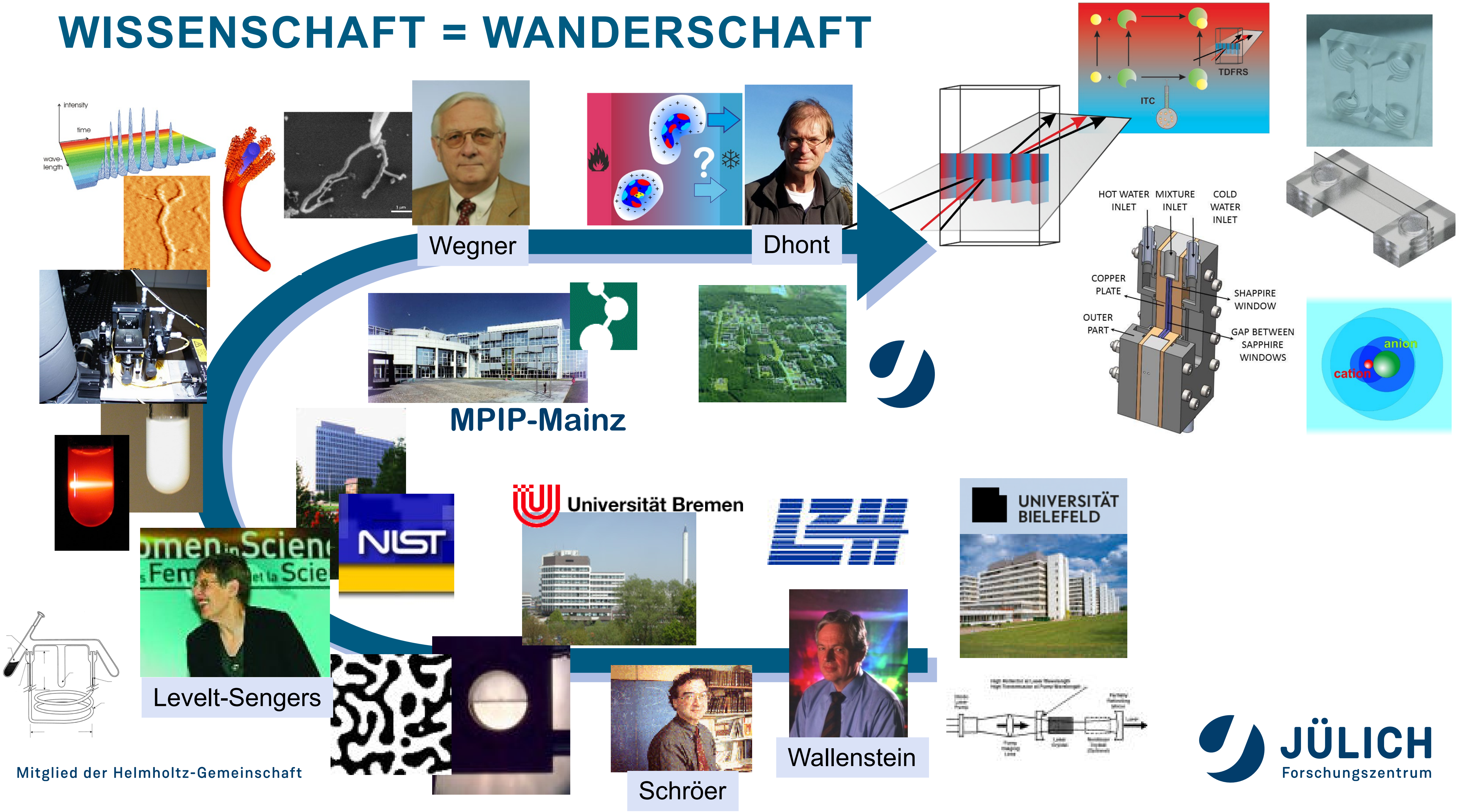
D. Afanasenkau



Mitglied der Helmholtz-Gemeinschaft

JÜLICH
Forschungszentrum

WISSENSCHAFT = WANDERSCHAFT


intensity
time
wave-
length
1 µm
TDFRS
ITC
HOT WATER
INLET
MIXTURE
INLET
COLD
WATER
INLET
COPPER
PLATE
SHAPPIRE
WINDOW
OUTER
PART
GAP BETWEEN
SAPPHIRE
WINDOWS
anion
cation
Universität Bremen
NIST
LZH
UNIVERSITÄT
BIELEFELD

Wegner

Dhont

MPIP-Mainz

Levelt-Sengers

Schröer

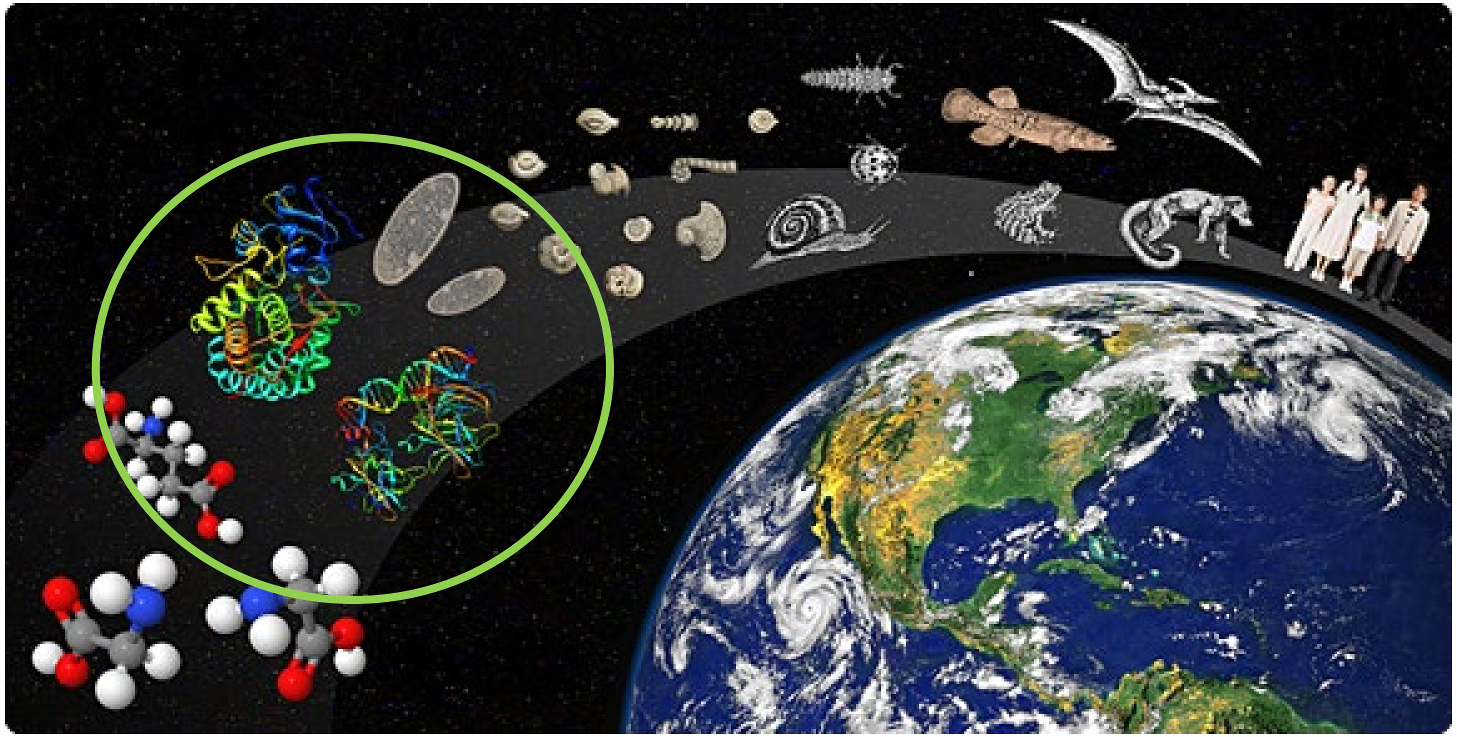
Wallenstein

Mitglied der Helmholtz-Gemeinschaft

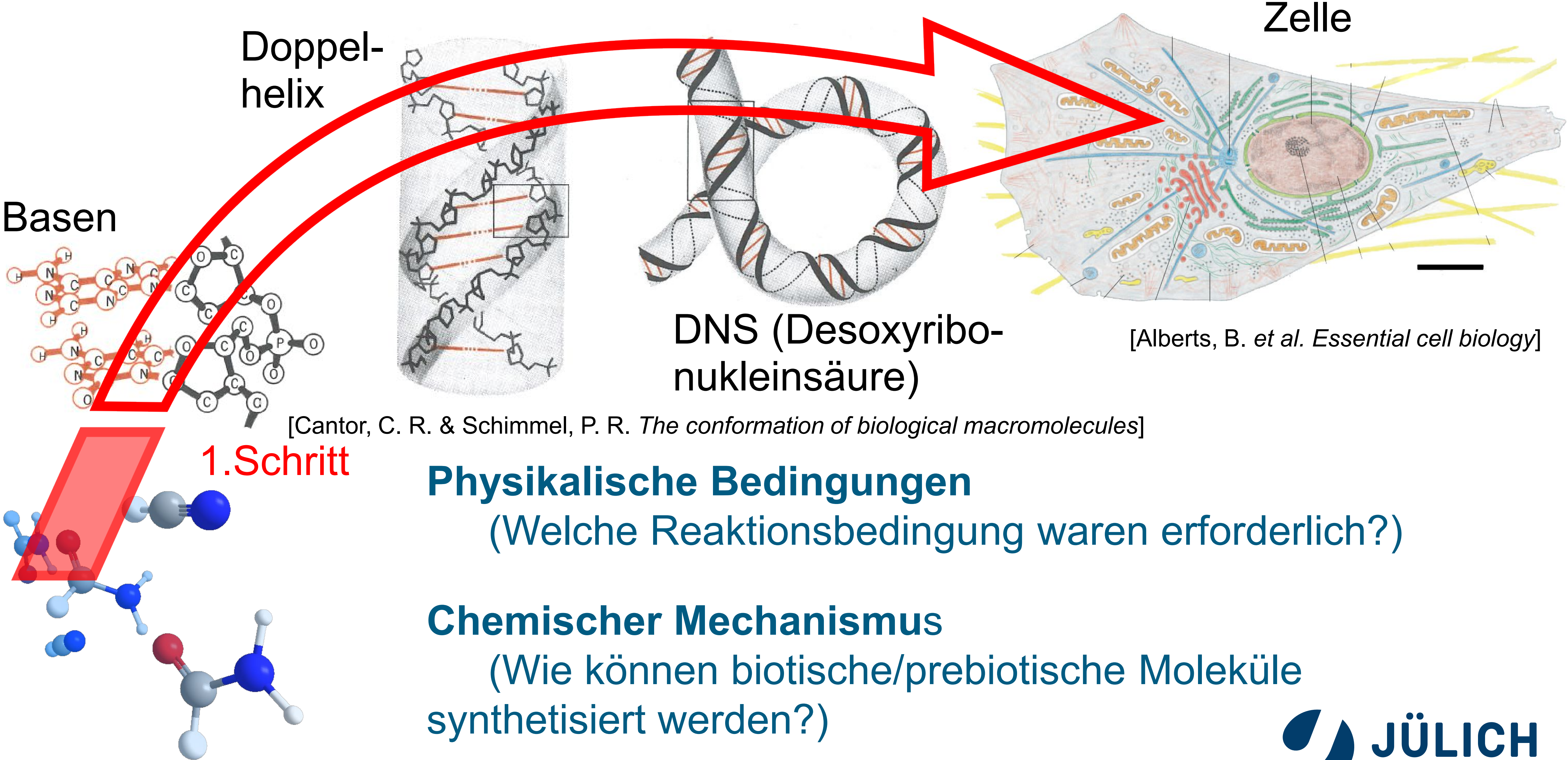
JÜLICH
Forschungszentrum

SUCHE NACH DEM URSPRUNG DES LEBENS

- Biologische Evolution: Entwicklung der komplexen Lebensformen aus einfachen Organismen
- Chemische Evolution: Synthese von organischen und Biomoleküle
- Aktuelle Forschung: Übergang von chemischer zu biologischer Evolution



VON PRÄBIOTISCHEN MOLEKÜLEN ZU ZELLEN


Zelle
Doppel-
helix
Basen
DNS (Desoxyribo-
nukleinsäure)
1.Schritt

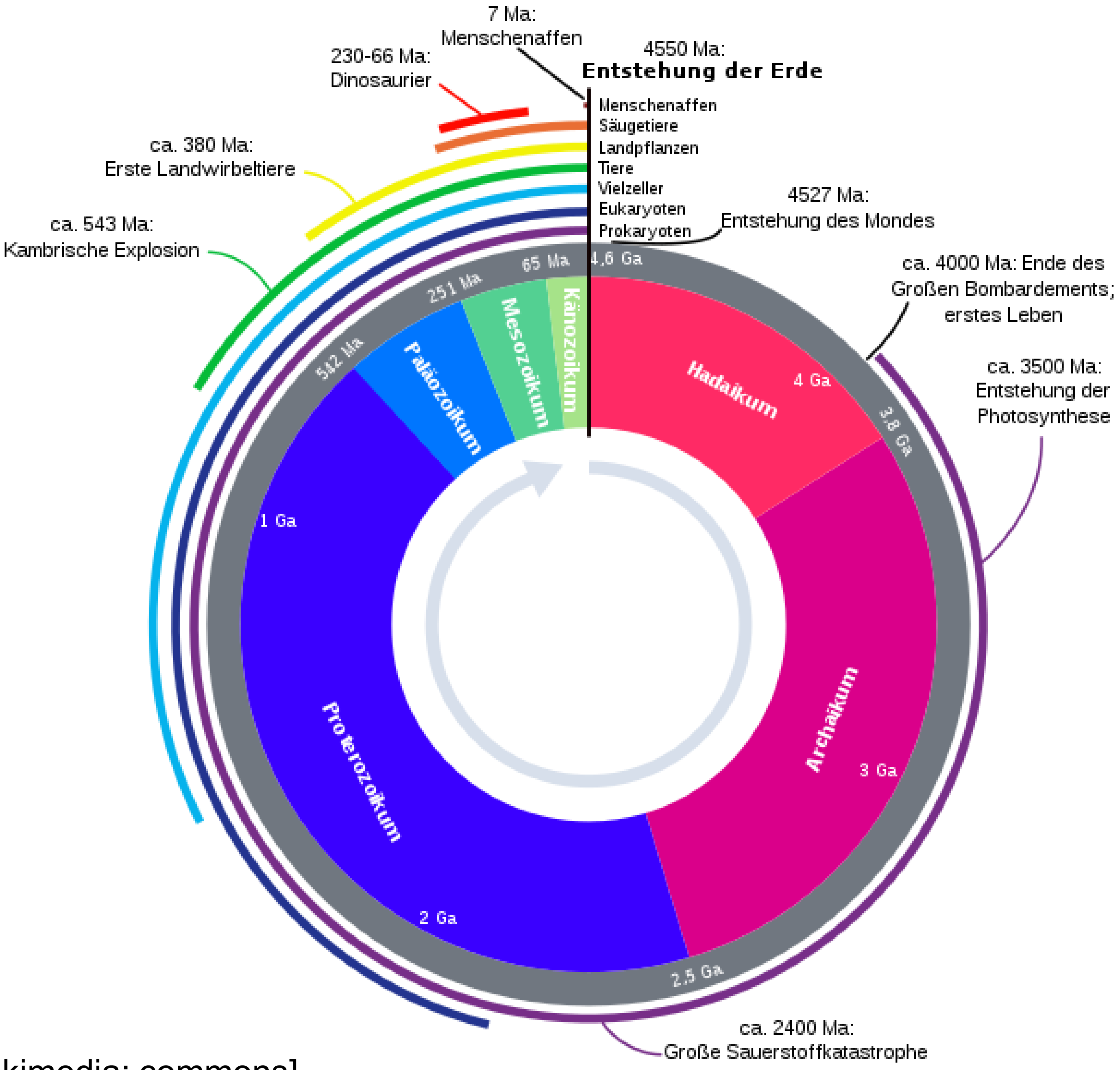
[Alberts, B. *et al. Essential cell biology*]

[Cantor, C. R. & Schimmel, P. R. *The conformation of biological macromolecules*]

Physikalische Bedingungen
(Welche Reaktionsbedingung waren erforderlich?)

Chemischer Mechanismus
(Wie können biotische/prebiotische Moleküle synthetisiert werden?)

ANFANG DER ERDE …


7 Ma:
Menschenaffen
230-66 Ma:
Dinosaurier
4550 Ma:
Entstehung der Erde
Menschenaffen
Säugetiere
Landpflanzen
Tiere
Vielzeller
Eukaryoten
Prokaryoten
ca. 380 Ma:
Erste Landwirbeltiere
ca. 543 Ma:
Kambrische Explosion
4527 Ma:
Entstehung des Mondes
ca. 4000 Ma: Ende des
Großen Bombardements;
erstes Leben
ca. 3500 Ma:
Entstehung der
Photosynthese
65 Ma
4,6 Ga
251 Ma
542 Ma
Känozoikum
Mesozoikum
Paläozoikum
Hadaikum
4 Ga
3,8 Ga
1 Ga
Proterozoikum
Archaikum
3 Ga
2 Ga
2,5 Ga
ca. 2400 Ma:
Große Sauerstoffkatastrophe

[Wikimedia: commons]

Erdalter: 4.550.000.000 Jahre

Erdumfang ca. 40.000.000 m

Annahme: 1 Jahr entspricht 1 m

ca. 114 mal die Erde umrunden

https://www.spiegel.de/wissenschaft/mensch/die-eng-umschlungene-erde-raetsel-der-woche-a-1176309.html

Menschen: 300.000 Jahre

ca. 300 km (Jülich – Heidelberg)

Essen
erpen
Düsseldorf
Deutsch
Jülich
Köln
Frankfurt
am Main
uxemburg
N
Heidelberg
Karlsruhe
Map data ©202

JÜLICH
Forschungszentrum

….WANN GAB ES EINZELLER UND WASSER?

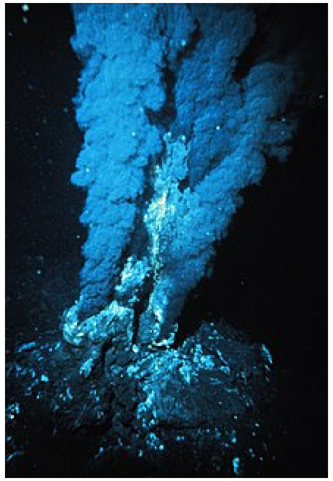
“Here we describe putative fossilized microorganisms that are at least 3,770 million and possibly 4,280 million years old …”

„Hier beschreiben wir mutmaßlich versteinerte Mikroorganismen, die mindestens 3.770 Millionen und möglicherweise 4.280 Millionen Jahre alt sind …“

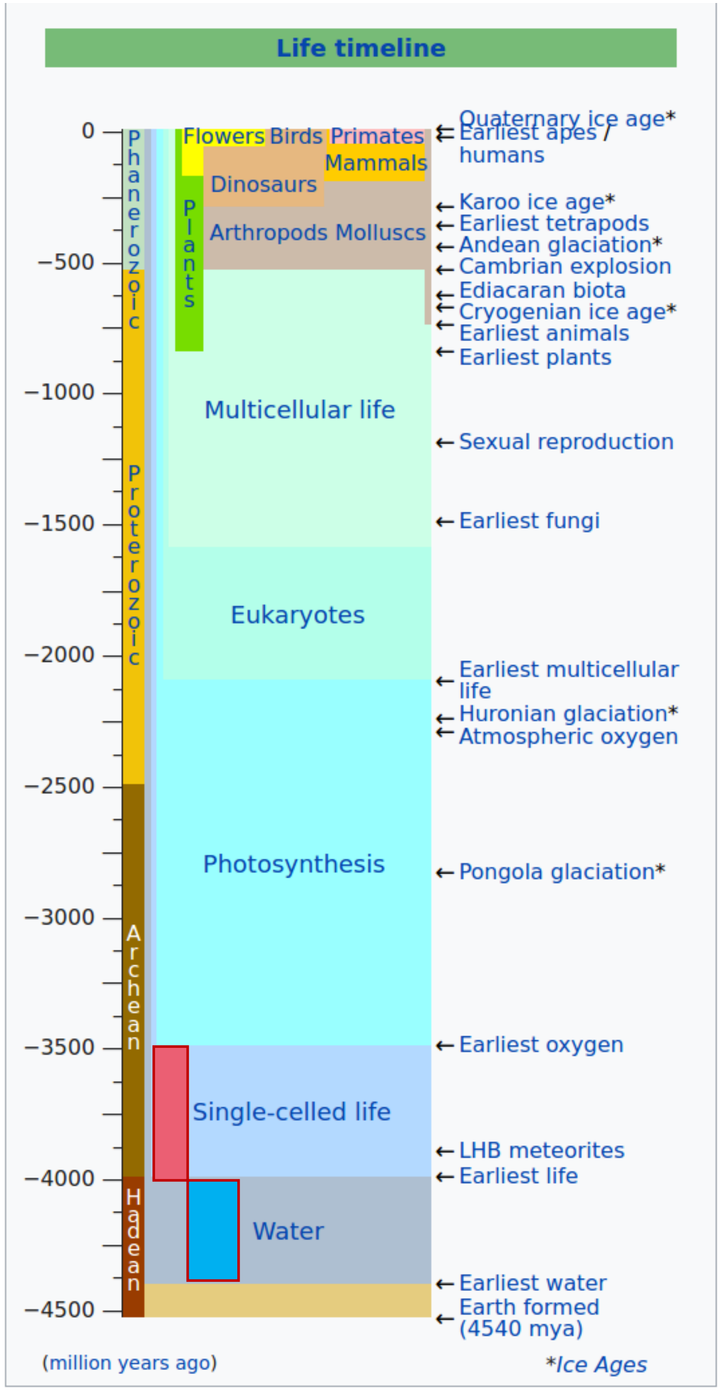
[Dodd, M.S., et al., *Evidence for early life in Earth's oldest hydrothermal vent precipitates.* Nature, **543** (2017) 60]

Wasser gab vermutlich schon etwa 350 Millionen Jahre früher

ca. 8,8 mal die Erde umrunden



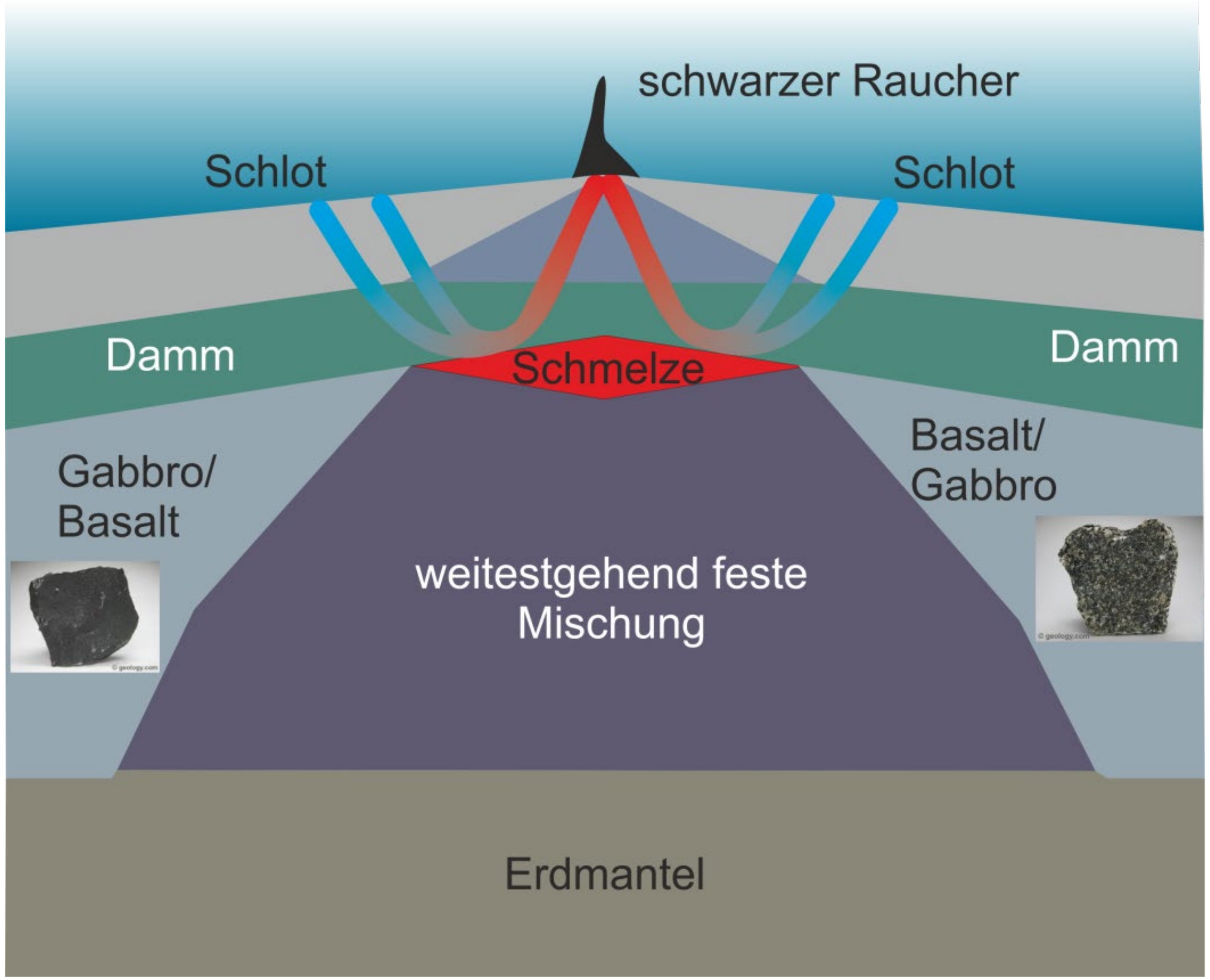
https://de.wikipedia.org/wiki/Raucher_(Hydrothermie)



https://www.rhetos.de/html/bilder/erdgeschichte.htm

SCHWARZE UND WEISSE RAUCHER

Große *T*-Gradienten zwischen, **heiße Lava** and **kaltes Meer**


schwarzer Raucher
Schlot
Schlot
Damm
Schmelze
Damm
Gabbro/
Basalt
Basalt/
Gabbro
weitestgehend feste
Mischung
Erdmantel

*"…**hydrothermal vents dominate surface…**"*

[J. I. Lunine, Phil. Trans. Roy. Soc. B: Biological Sciences, 361 (2006) 1721-1731]

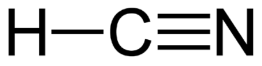
*"… **higher temperatures at depth in the rocks** and **sharp gradients around hydrothermal events** have highly existed …."*

*"However, life likely **arose in or around rocks rather** than photosynthetically at the surface."*

[N. H. Sleep, Cold Spring Harbor Perspectives in Biology, **2** (2010) a002527.]

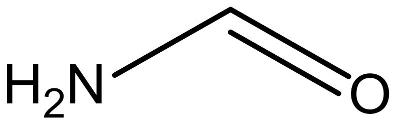
CHEMISCHE SUBSTANZEN AUF DER FRÜHEN ERDE

“Die häufigste organische Verbindung mit drei Atomen in interstellarer Umgebung ist Blausäure HCN, die häufigste anorganische Verbindung ist Wasser H2O. Die Kombination der beiden führt zur Bildung von Formamid H2NCOH.”



Blausäure (HCN) .. niedriger Siedepunkt (~26°C)

oberhalb von 0.03-0.3wt% ist die Polymerisierung von HCN zu Oligomeren stärker als die Hydrolyse



Formamid (H_2NCOH) .. hoher Siedepunkt(~210°C)

Abschätzung ergeben, dass die Polymerisierung zu Oligomeren oberhalb von 3-33% bevorzugt ist.

[R. Saladino et al., Physics of Life Reviews, 9 (2012) 84-104.
R. A. Sanchez et al., Journal of Molecular Biology, 30 (1967) 223-253.
S. Miyakawa, H. J. Cleaves and S. L. Miller, Origins of Life and Evolution of the Biosphere, 32 (2002) 195-208.]

FORMAMID AUF DER FRÜHEN ERDE

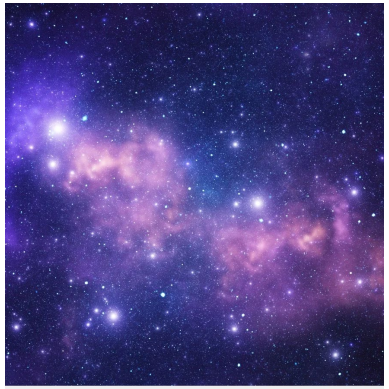
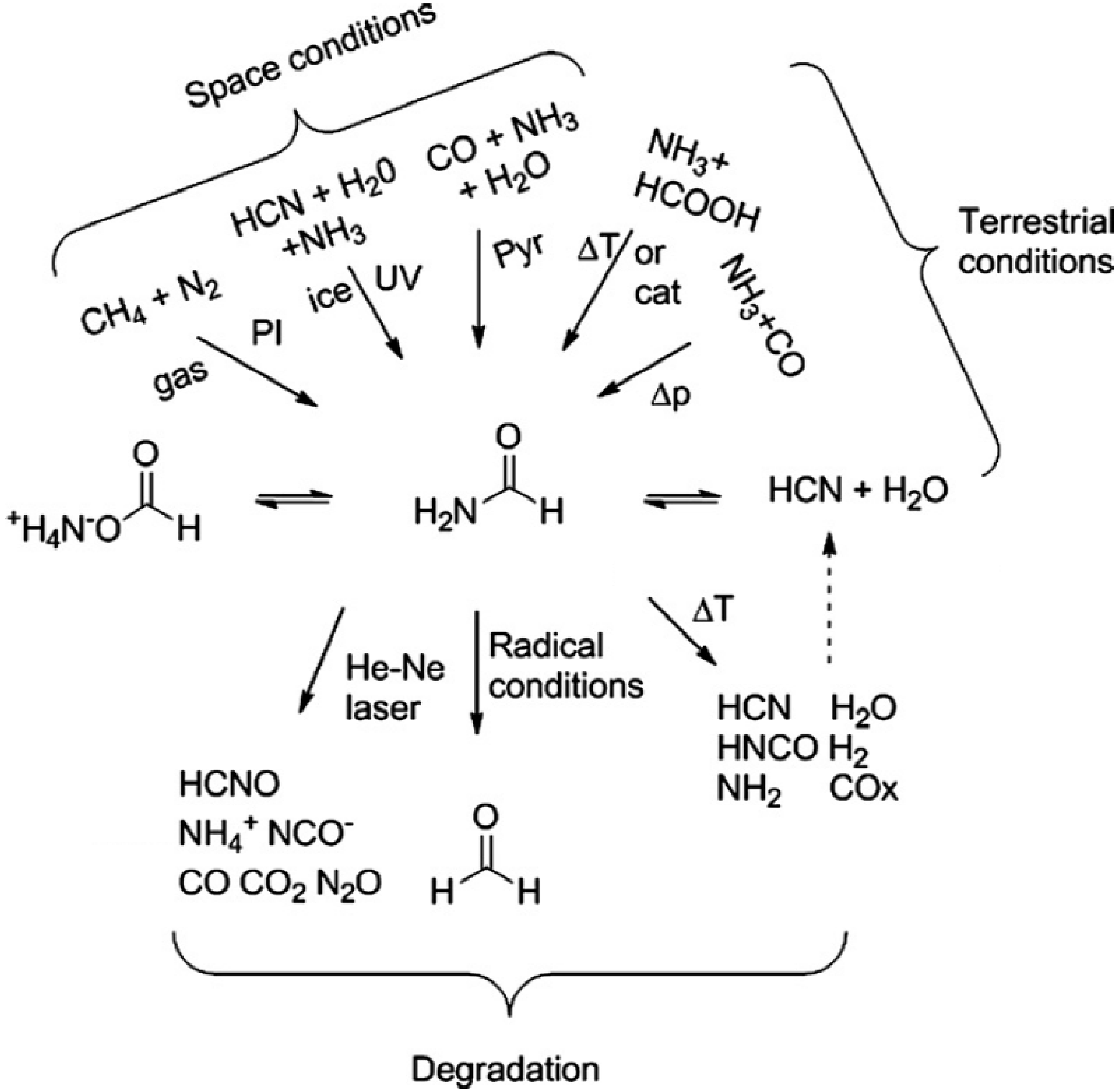


Foto: iStock/sololos



Space conditions
CH$_4$ + N$_2$
gas
PI
HCN + H$_2$0 +NH$_3$
ice
UV
CO + NH$_3$ + H$_2$O
Pyr
NH$_3$+ HCOOH
ΔT/ or cat
NH$_3$+CO
Δp
Terrestrial conditions
$^+$H$_4$N$^-$O H
H$_2$N H
HCN + H$_2$O
He-Ne laser
Radical conditions
ΔT
HCNO
NH$_4^+$ NCO$^-$
CO CO$_2$ N$_2$O
H H
HCN H$_2$O
HNCO H$_2$
NH$_2$ COx
Degradation

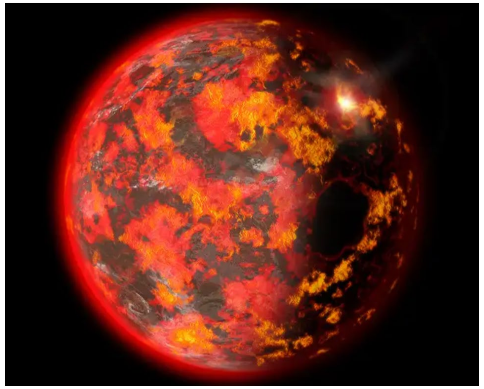


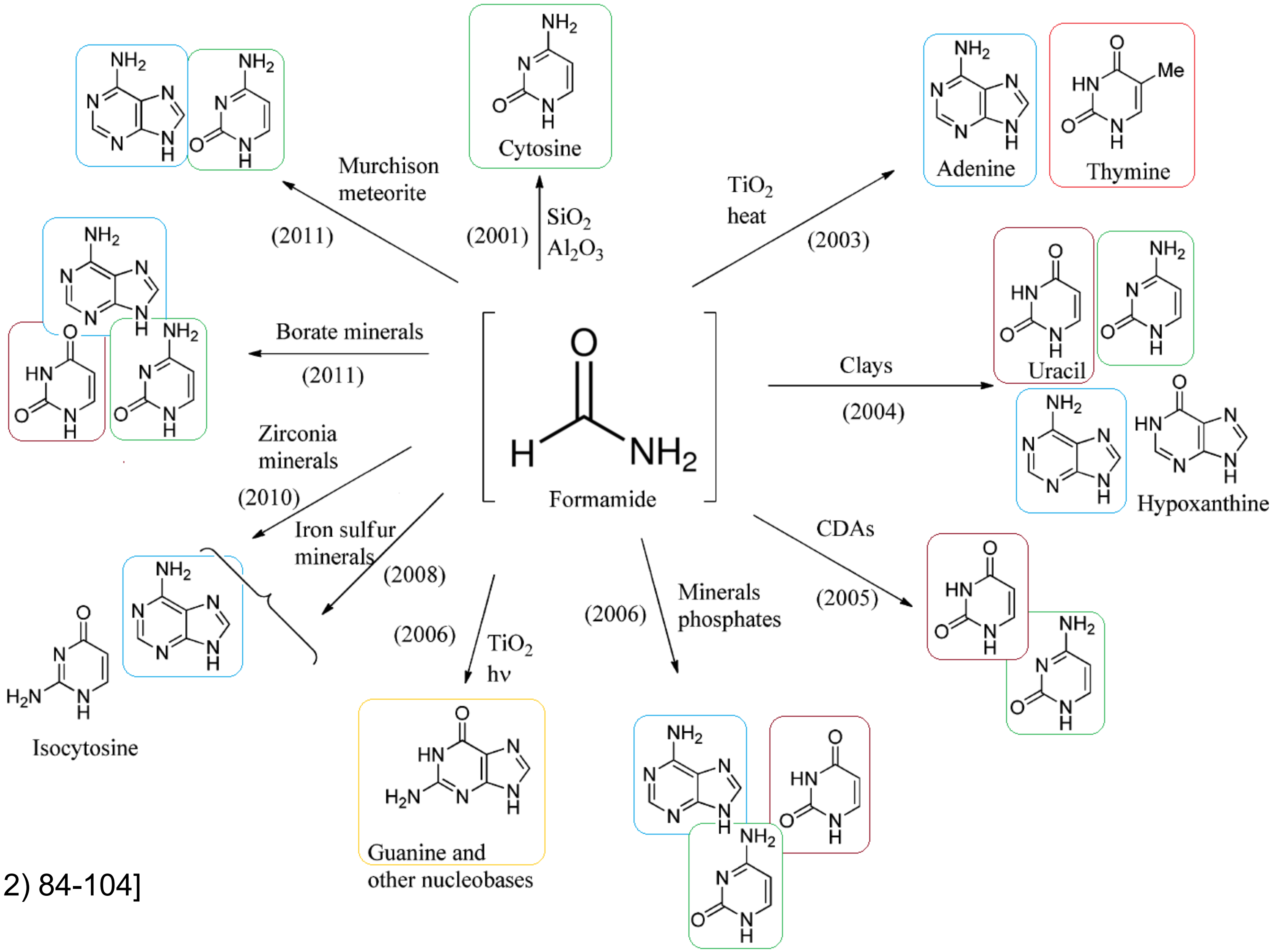
Foto: Shutterstock / Diego Barucco

[R. Saladino et al./ Physics of Life Reviews 9 (2012) 84-104]

FORMAMID – EIN WEGBEREITER FÜR LEBEN

Ausgangsstoff für abiotische Synthese von

- Präbiotische Nukleobasen
- Carbonsäuren
- Aminosäuren


Murchison meteorite
(2011)
Cytosine
(2001)
SiO_2
Al_2O_3
TiO_2
heat
(2003)
Adenine
Thymine
Borate minerals
(2011)
Clays
(2004)
Uracil
Hypoxanthine
Zirconia minerals
(2010)
Formamide
Iron sulfur minerals
(2008)
CDAs
(2005)
Isocytosine
(2006)
TiO_2
hν
(2006)
Minerals phosphates
Guanine and other nucleobases

Bausteine für die Desoxyribonukleinsäure (DNS)

[R. Saladino et al./ Physics of Life Reviews 9 (2012) 84-104]

KONZENTRATIONSPROBLEM

Frühe Erde

Labor

10^{-7} wt% = 1mg Formamid in 1000kg Wasser
10^{-3} wt% =10mg Formamid in 1kg Wasser

niedrige Konzentrationen
Ozean ~w=10^{-7} wt%
flacher See ~w=10^{-3} wt%

[http://www.ineffableisland.com/2015/10/life-on-earth-likely-started-41-billion.html]

Anreicherung

hohe Konzentrationen
(w=50 - 100 wt%)

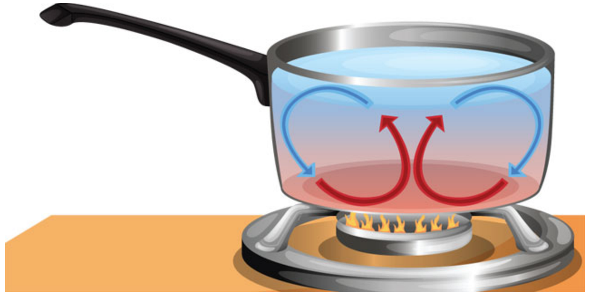
[http://www.visualchem.in/nozzle-cleaning-method/]

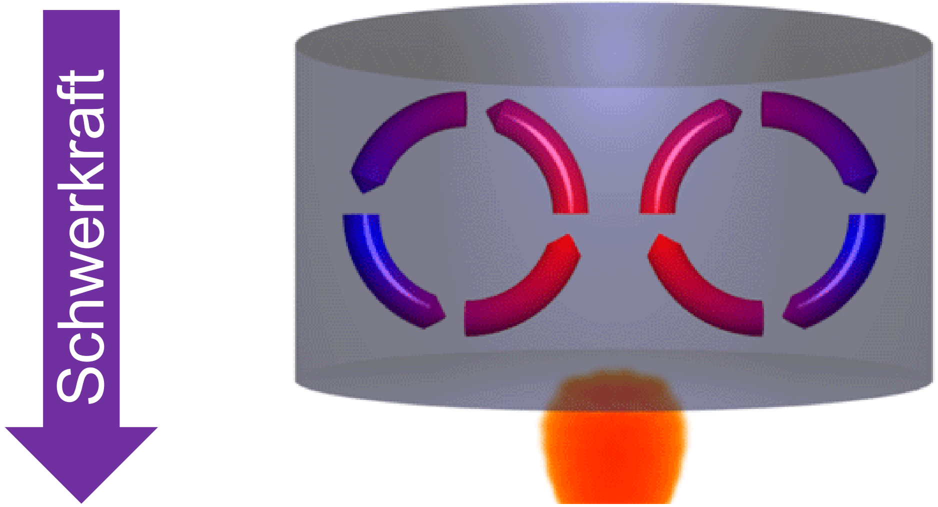
KONVEKTION
+
THERMODIFFUSION

KONVEKTION

Transportmechanismus in Gasen und Flüssigkeiten abhängig von

- Dichte,
- Viskosität,
- Wärmekapazität
- thermische Leitfähigkeit





Temperaturunterschied

verschiedene Dichten

kalte (dichtere) Flüssigkeit sinkt ab, warme Flüssigkeit steigt auf

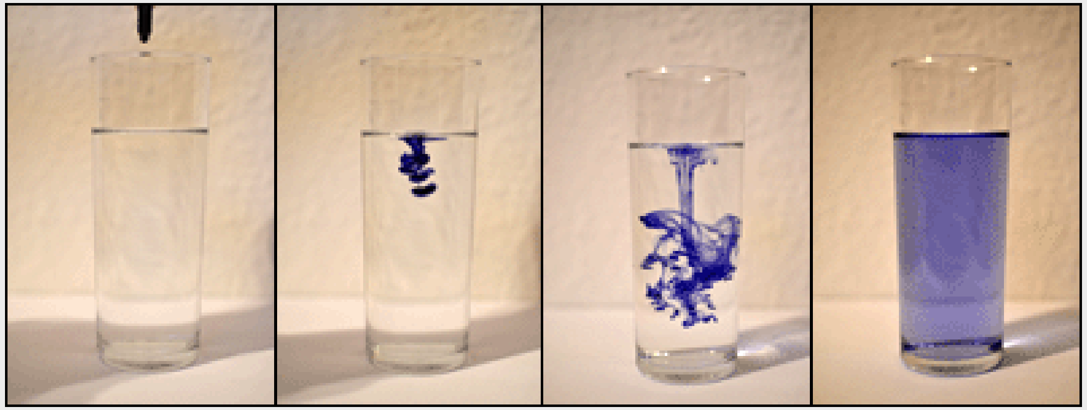
Kreisförmiger Fluss (Konvektionsrollen)

Animation by Oni Lukos, Wikimedia Commons

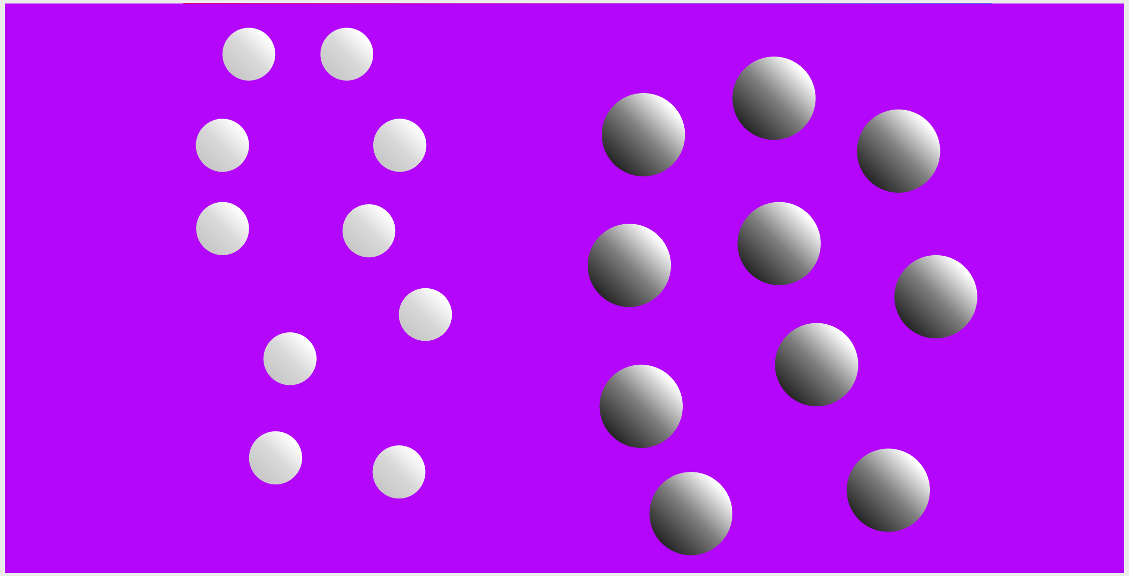
WAS PASSIERT OHNE TEMPERATUR GRADIENT?

Diffusion

Bewegung von Teilchen hervorgerufen durch einen Konzentationsgradienten



Copyright © 2010-2017 Biologie-schule.de



$$\vec{j} = -D\vec{\nabla} w$$

D - Diffusionskoeffizient,
w - Gewichtsbruch,
$\vec{j}$ - Fluss,

WAS PASSIERT MIT TEMPERATUR GRADIENT?

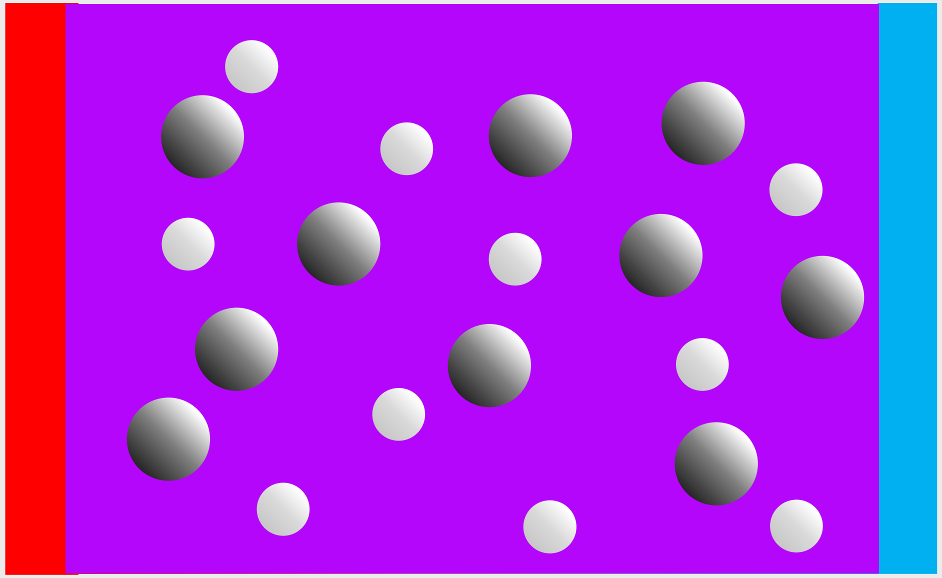
Thermodiffusion oder Thermophorese

UND Bewegung der Partikel induziert durch einen Temperaturgradienten

$$\vec{j} = -D\vec{\nabla} w - w(1-w) D_T \vec{\nabla} T$$

Stationärer Zustand $\vec{j} = 0$

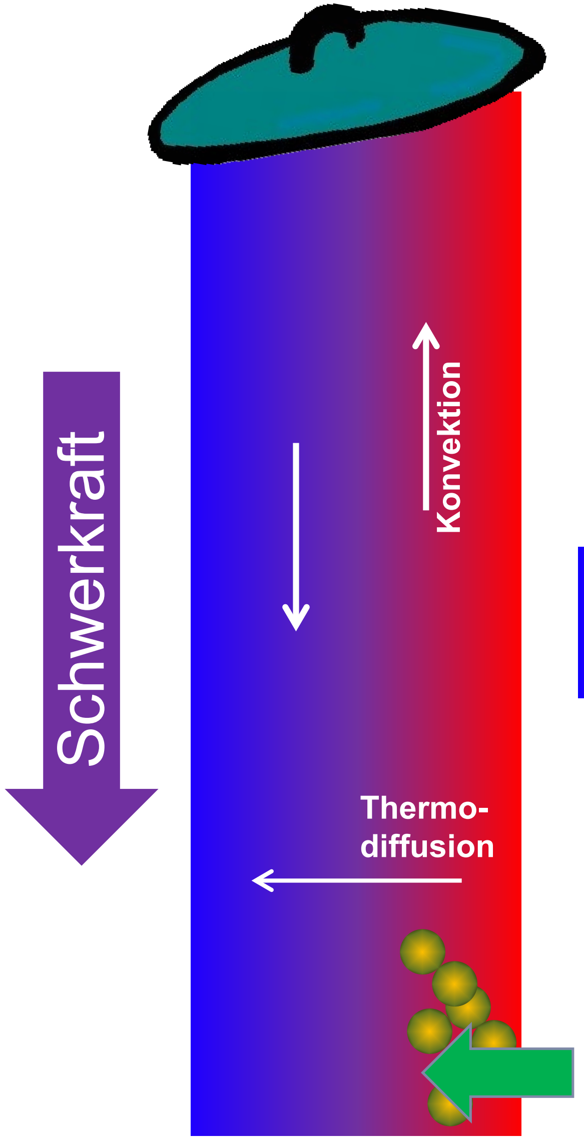
$$S_T \equiv \frac{D_T}{D} \propto \frac{\Delta w}{\Delta T}$$

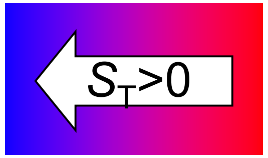


D_T - Thermodiffusionskoeffizient,
T – Temperatur
S_T –Soretkoeffizient

KONVEKTION & THERMODIFFUSION

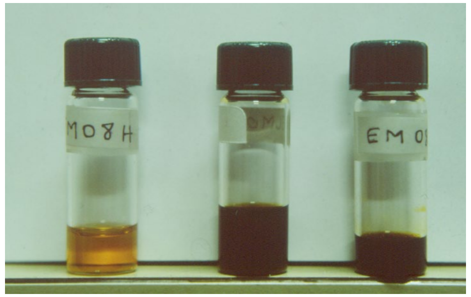
Anreicherung in einer Thermogravitationssäule


Schwerkraft
Konvektion
Thermo-
diffusion

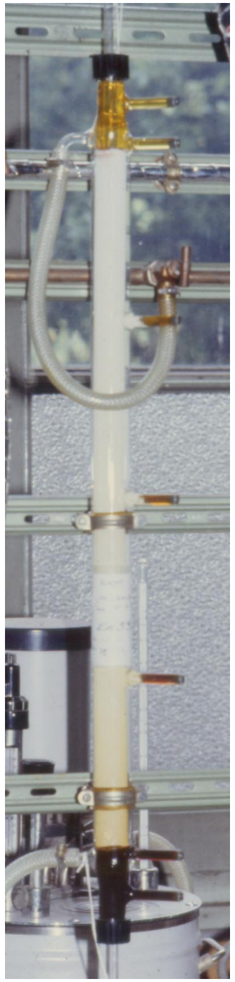


schwerere Komponente
(geht nach kalt)

Anreicherung der schwereren
Komponente am Boden der Säule

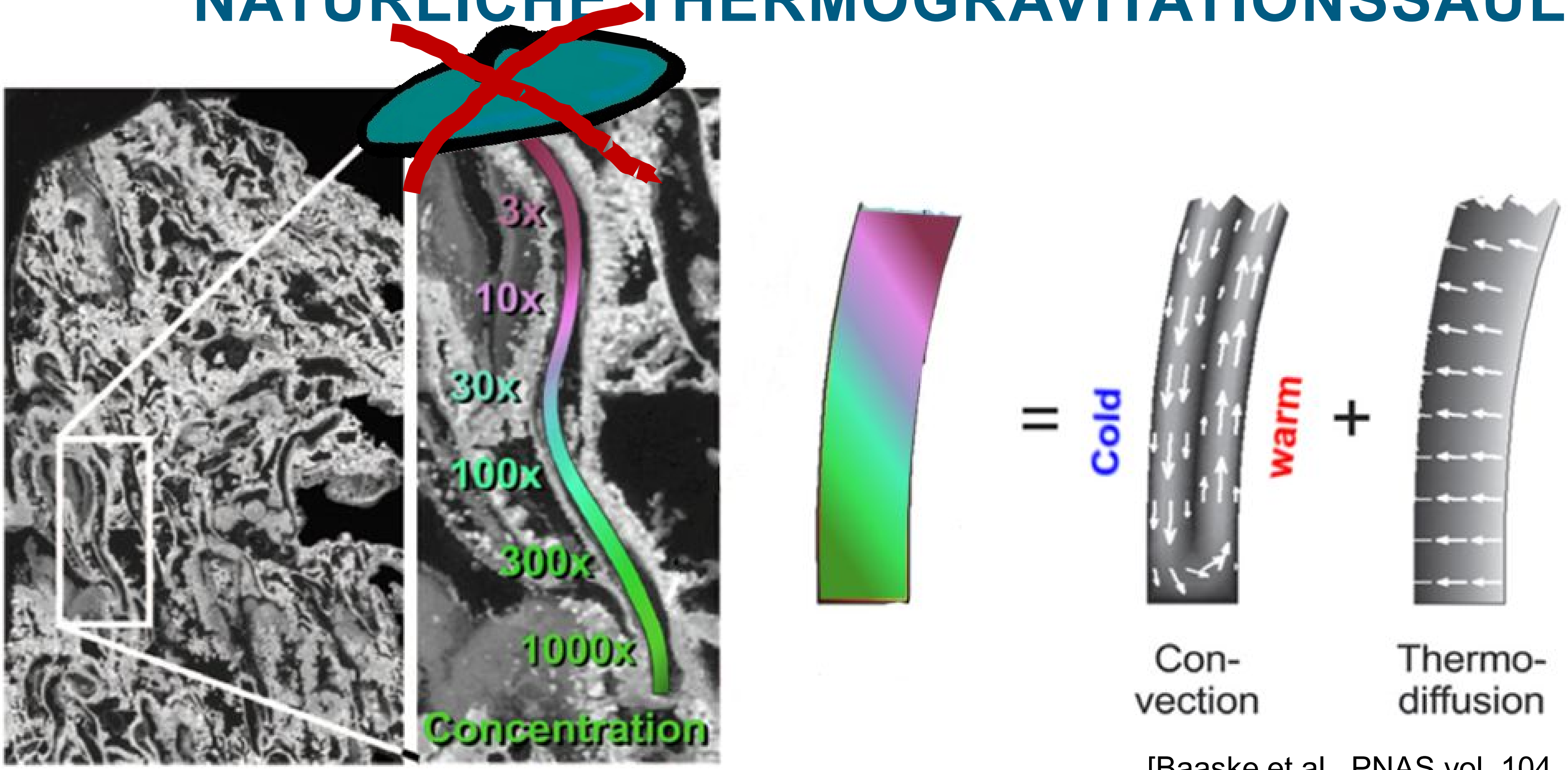


Erdölfraktionen



Courtesy: P. Costesèque

NATÜRLICHE THERMOGRAVITATIONSSÄULE


3x
10x
30x
100x
300x
1000x
Concentration
=
Cold
warm
+
Con-
vection
Thermo-
diffusion

[Baaske et al., PNAS vol. 104, no. 22, 9349 (2007)]

Ausgangssituation:

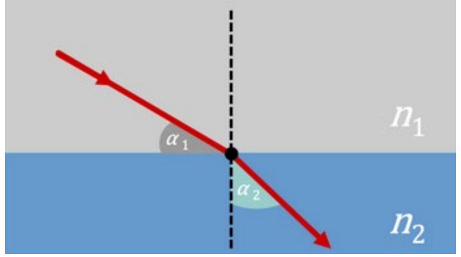
- poröses Gestein in der Nähe von hydrothermalen Ausbruchkanälen
- gleich Prinzip wie **Thermogravitationssäule**, aber offen (Materie kann einfließen)

UNSERE ZIELE

- Messung von $S_T(w,T)$ von Formamid/Wasser
- $S_T(w,T)$ in Simulationen verwenden, um herauszufinden, ob die Anreicherung für Formamid generell funktioniert?
- Können ausreichend hohe Konzentrationen erreicht werden?

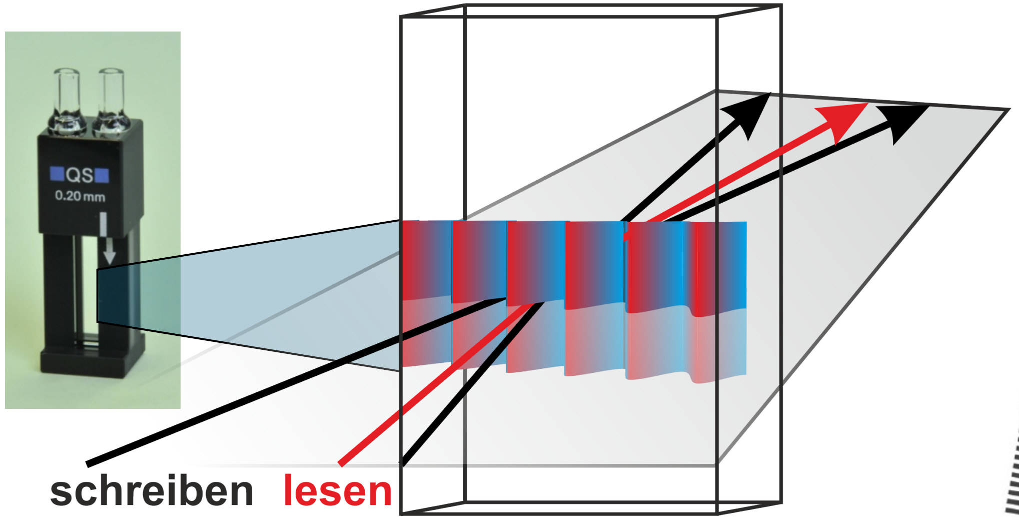
WIE MESSEN WIR?

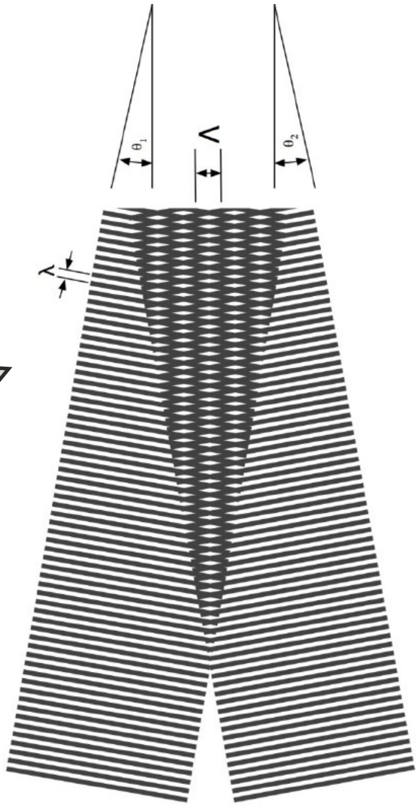
Brechungsindexgitter

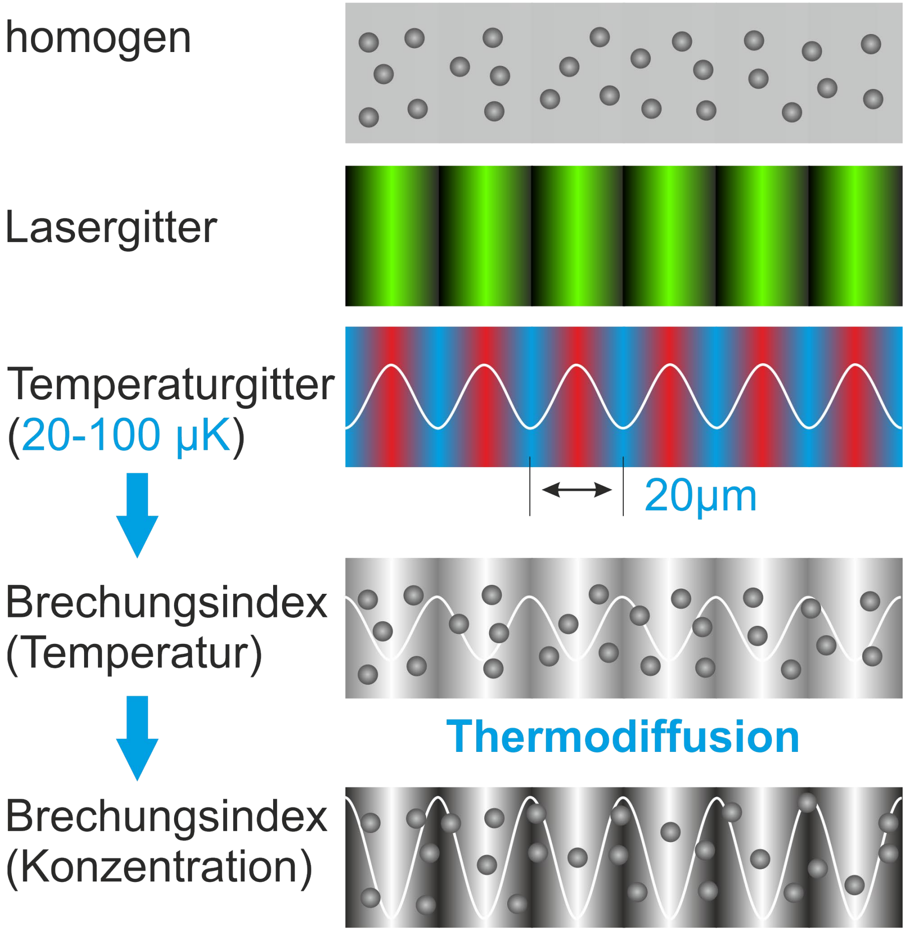

n_1
α_1
α_2
n_2

© Studyflix

Meßgröße: Intensität des gebeugten Auslesestrahls


QS
0.20 mm
schreiben
lesen


θ_1
Λ
θ_2
λ



homogen

Lasergitter

Temperaturgitter
(20-100 µK)

20µm

Brechungsindex
(Temperatur)

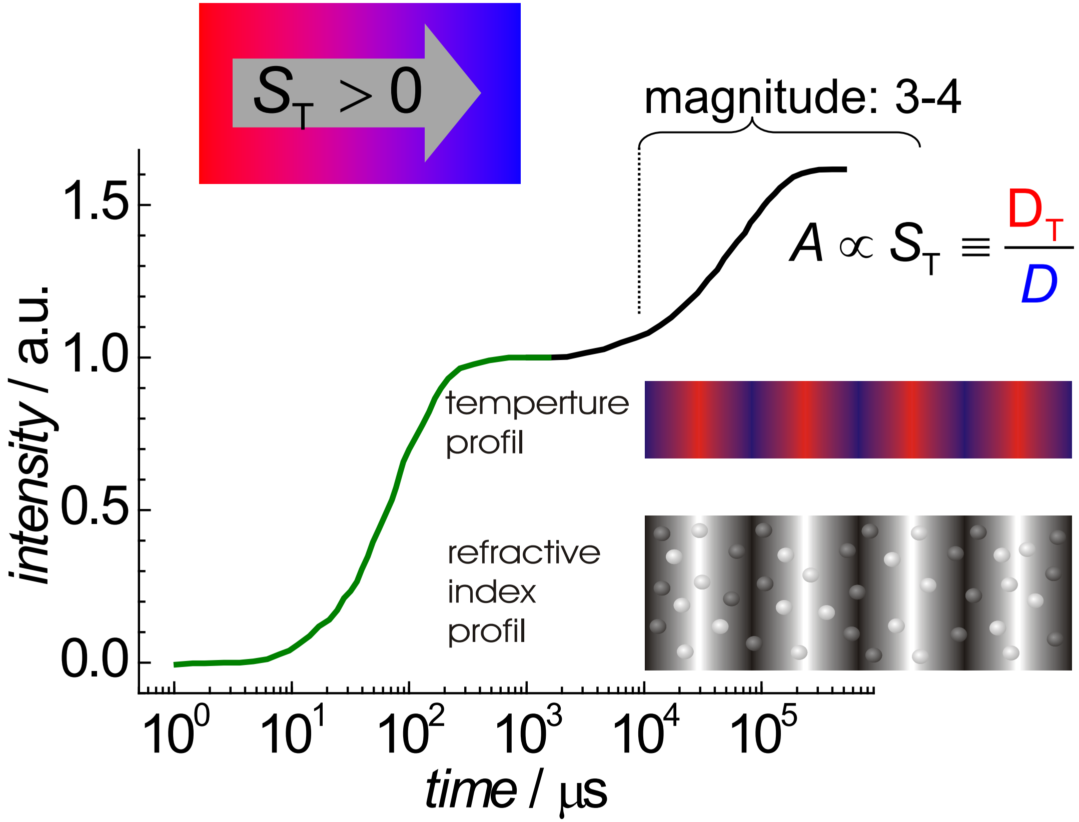
Thermodiffusion

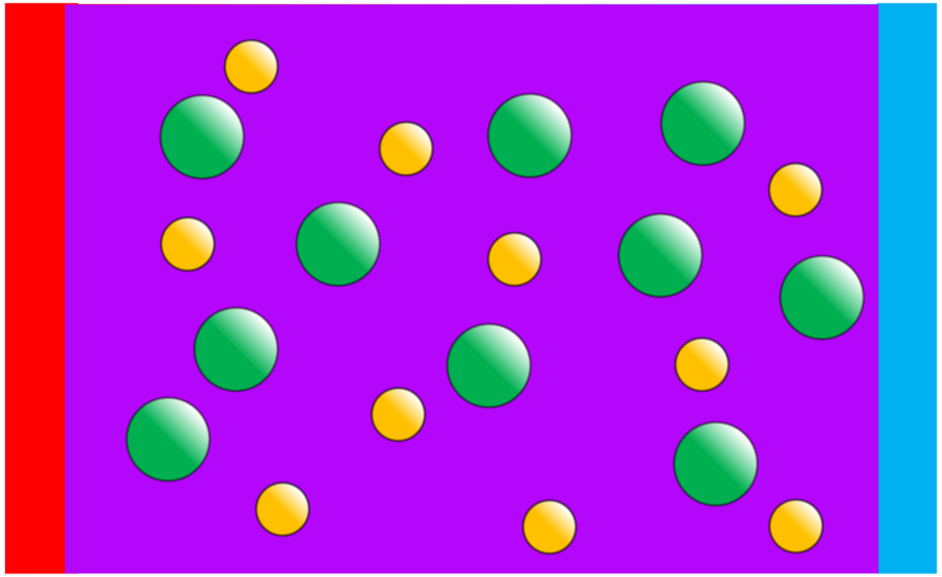
Brechungsindex
(Konzentration)

IR-TDFRS: MEASUREMENT SIGNAL

Molekül mit höhereren Brechungsindex bewegt sich nach kalt.

$$\vec{j} = \underbrace{-D\nabla w}_{\text{mischen}} - \underbrace{w\left(1-w\right)D_T\nabla T}_{\text{trennen}}$$



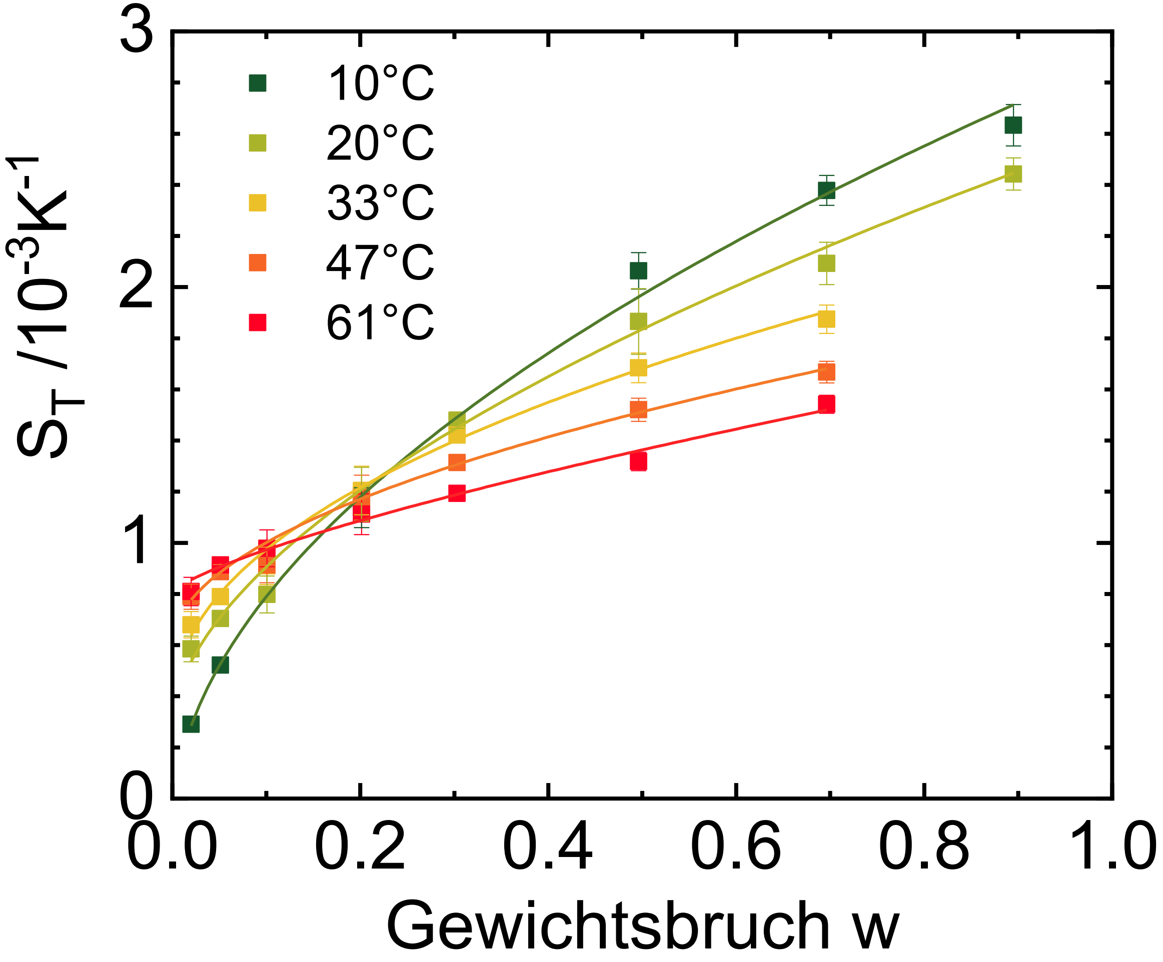


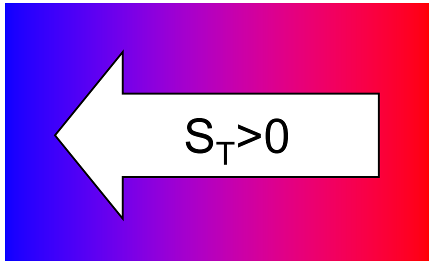
Brechungsindexprofil

[S. Wiegand et al., J Phys Chem B 111, 14169 (2007)]

THERMODIFFUSION VON FORMAMID IN WASSER

Experimentelle Ergebnisse



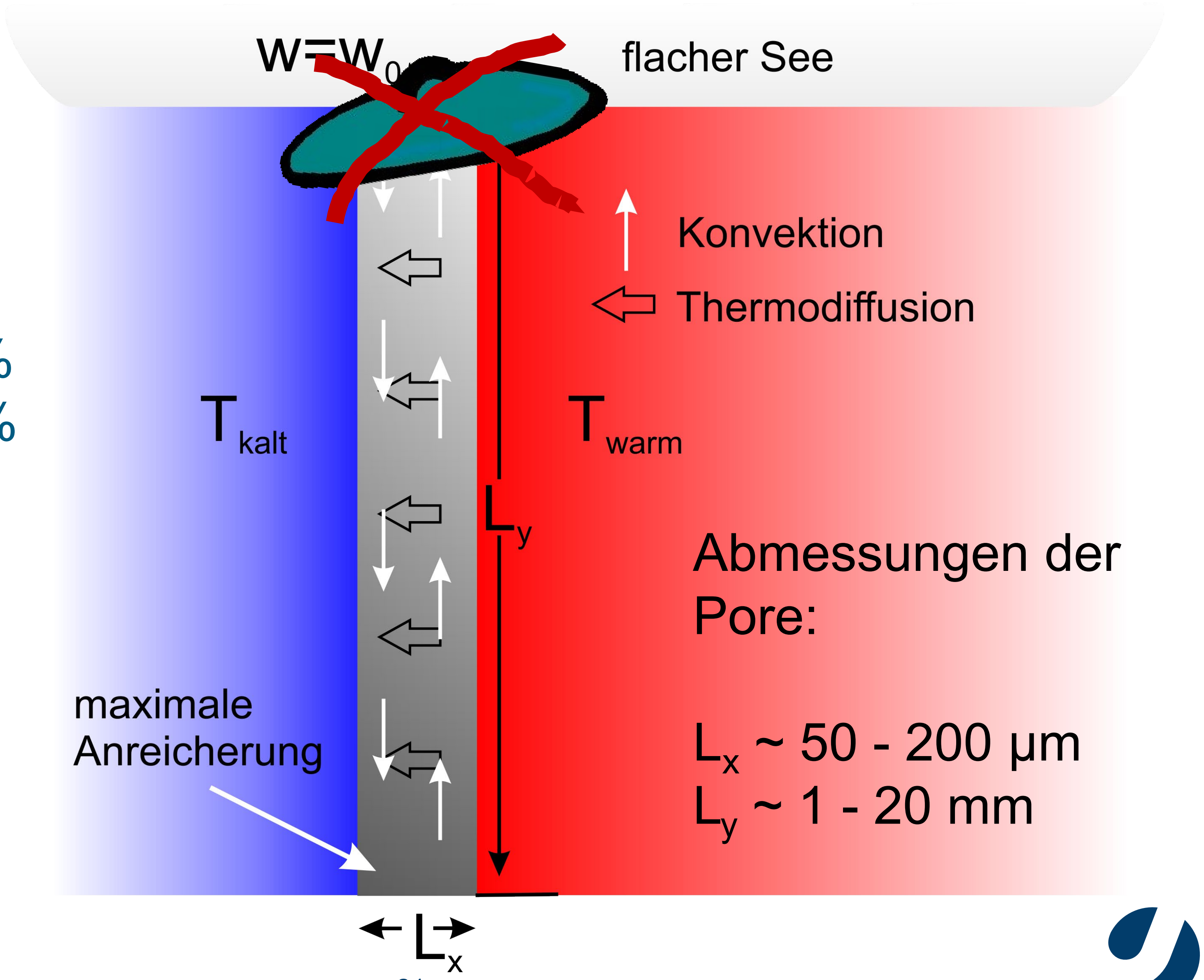


Formamid geht nach kalt

Selbstverstärkender Effekt

SIMULATION WITH COMSOL

Konzentration in
Ozean $\sim 10^{-7}$ wt%
Flacher See $\sim 10^{-3}$ wt%



$w = w_0$
flacher See
Konvektion
Thermodiffusion
T_{kalt}
T_{warm}
L_y
maximale Anreicherung
L_x

Abmessungen der Pore:

$L_x \sim 50 - 200\ \mu m$
$L_y \sim 1 - 20$ mm

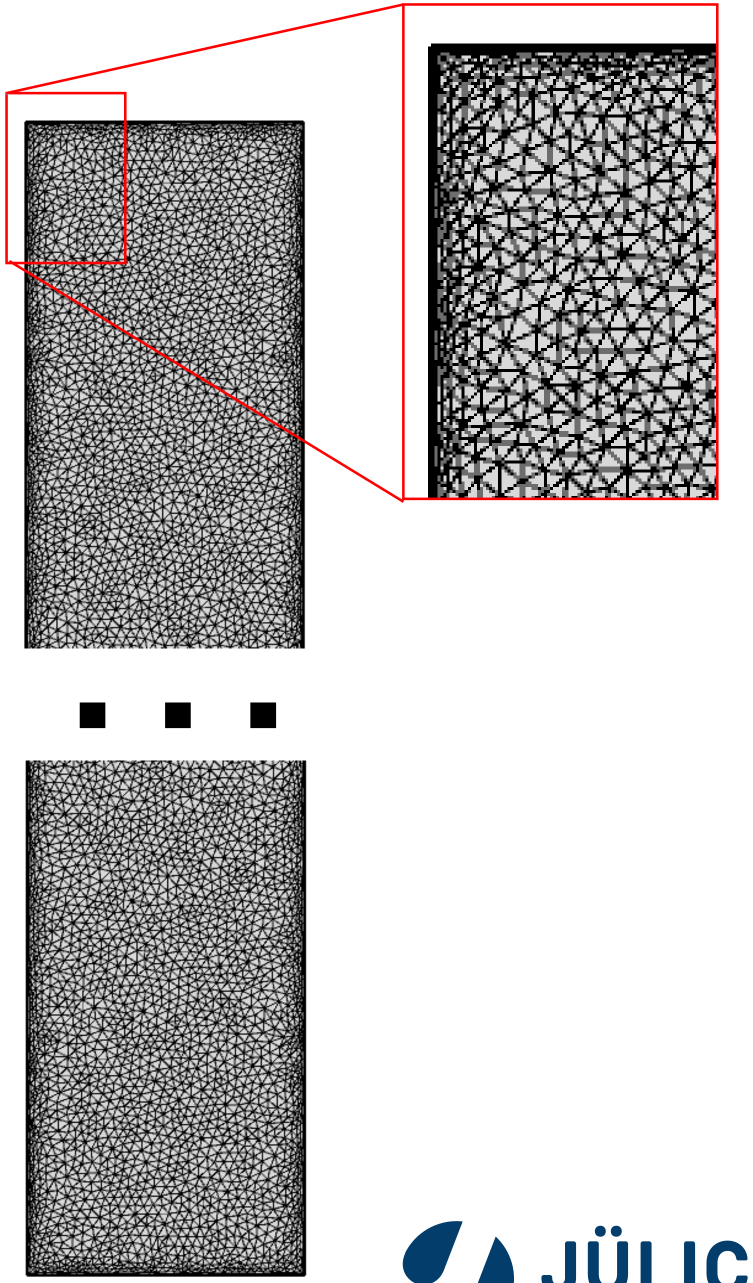
Simulation mit COMSOL

Temperatur- und Konzentrations-abhängige Eigenschaften von Formamid/Wasser:

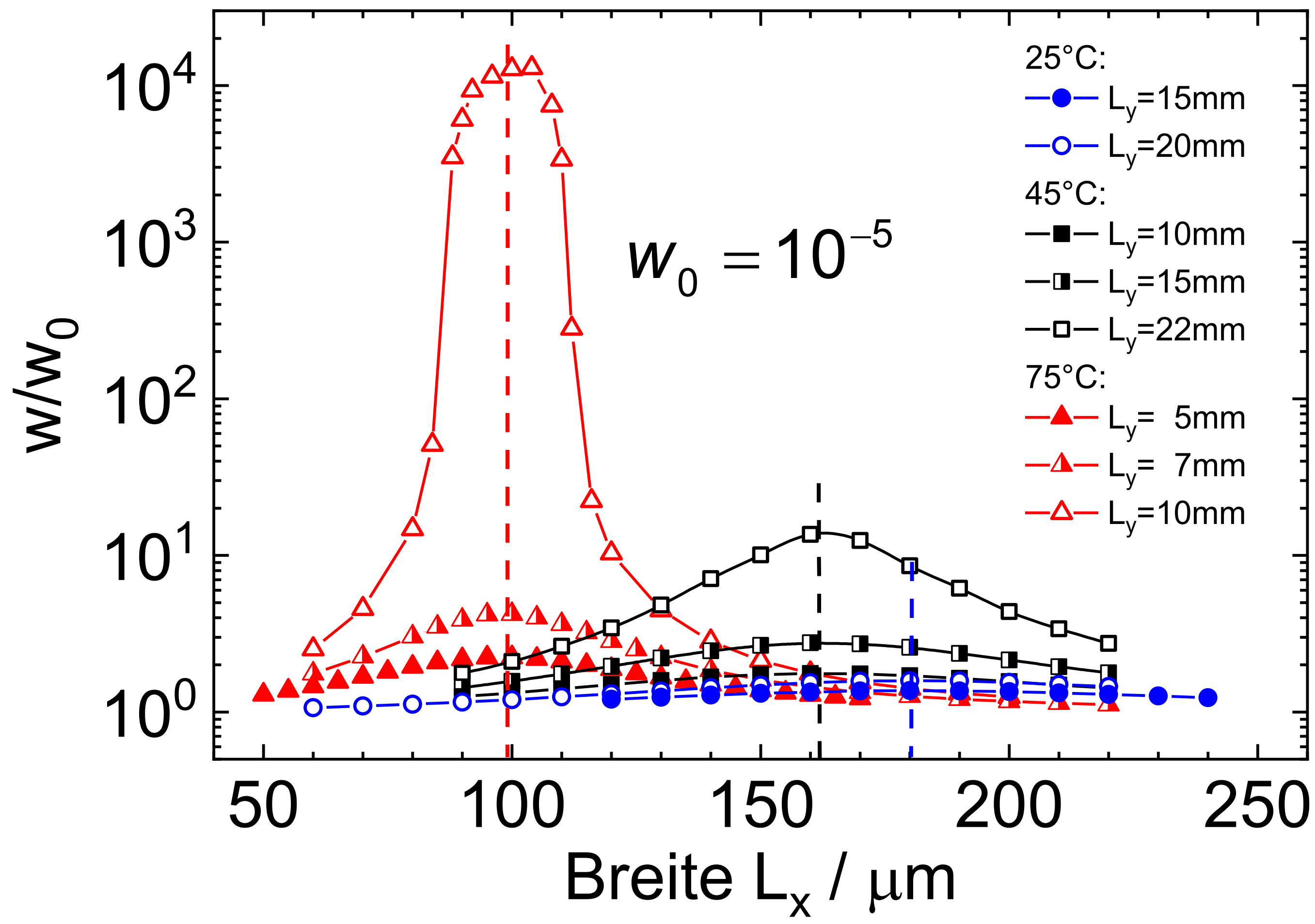
- Soret Koeffizient
- Dichte
- Viskosität
- Wärmekapazität
- Thermische Leitfähigkeit

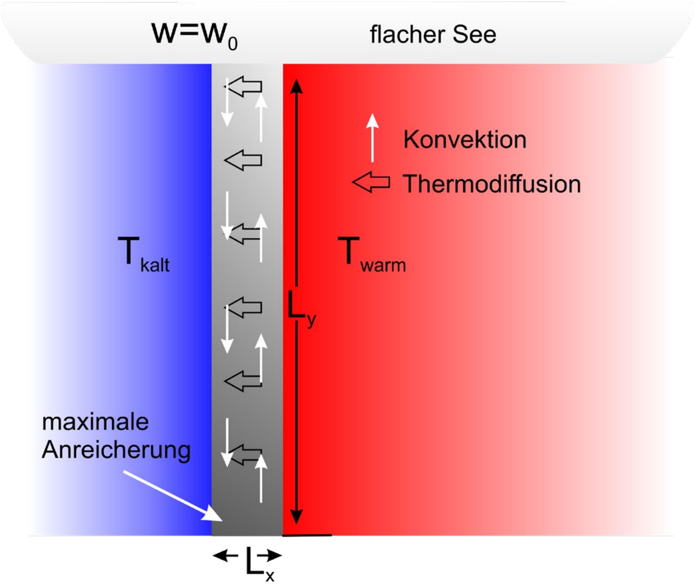
Finite Elemente Simulation:

- Navier-Stokes-Gleichungen
- Wärmeleitungs-Gleichungen
- Thermodiffusion/Konvektion



GEOMETRIE UND TEMPERATUR EINFLUSS

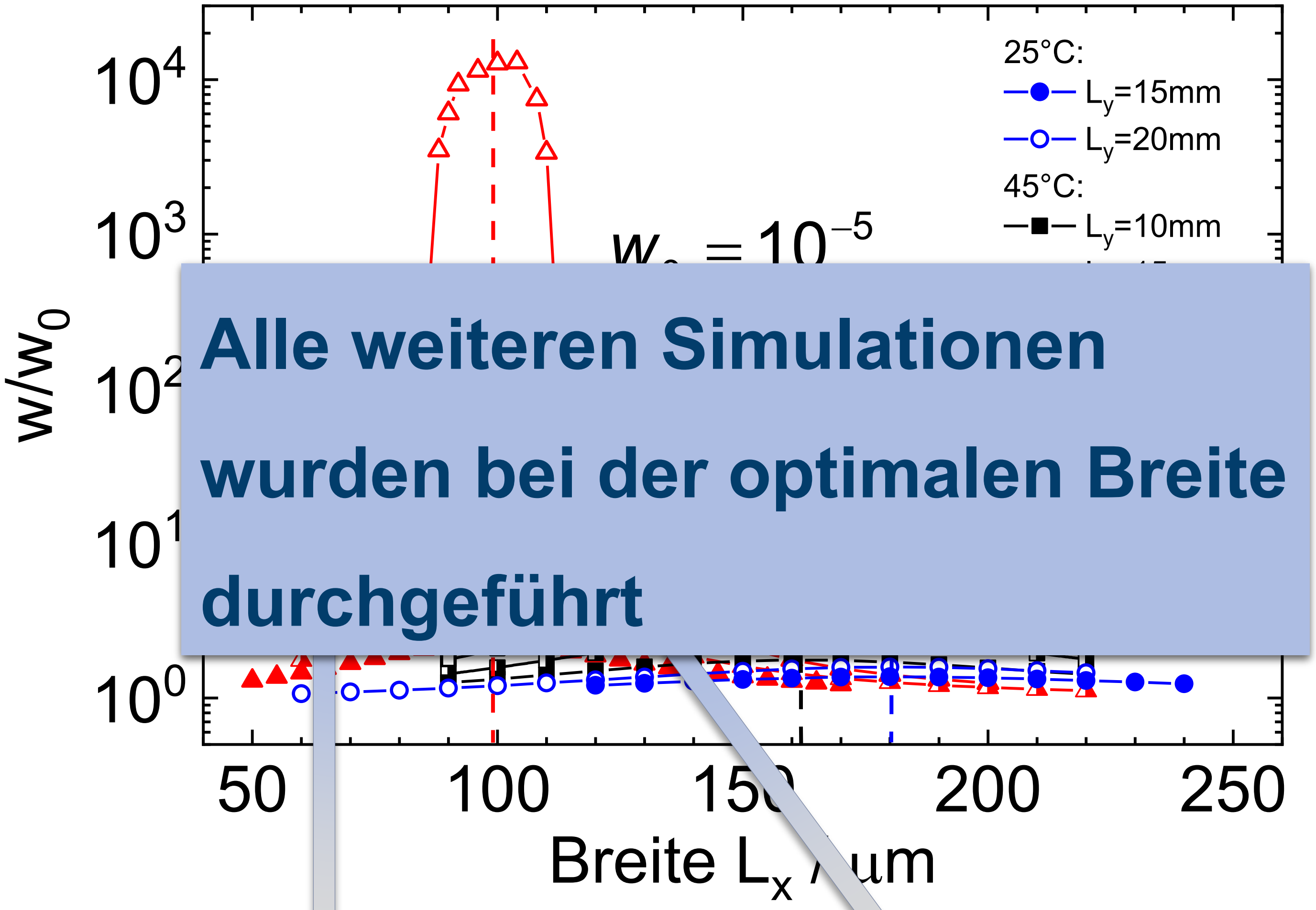




w=w$_0$
flacher See
Konvektion
Thermodiffusion
T$_{kalt}$
T$_{warm}$
L$_y$
maximale Anreicherung
L$_x$

Breite: L_x
Höhe: L_y

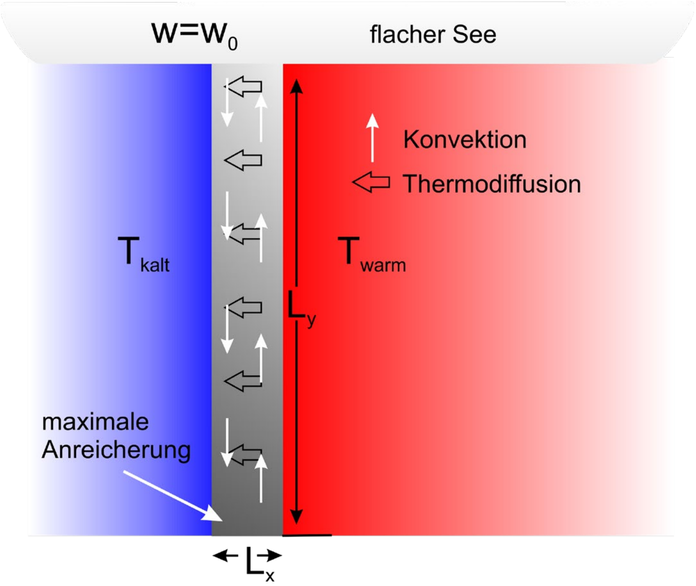
GEOMETRIE UND TEMPERATUR EINFLUSS



Alle weiteren Simulationen wurden bei der optimalen Breite durchgeführt

Reduzierte Konvektion

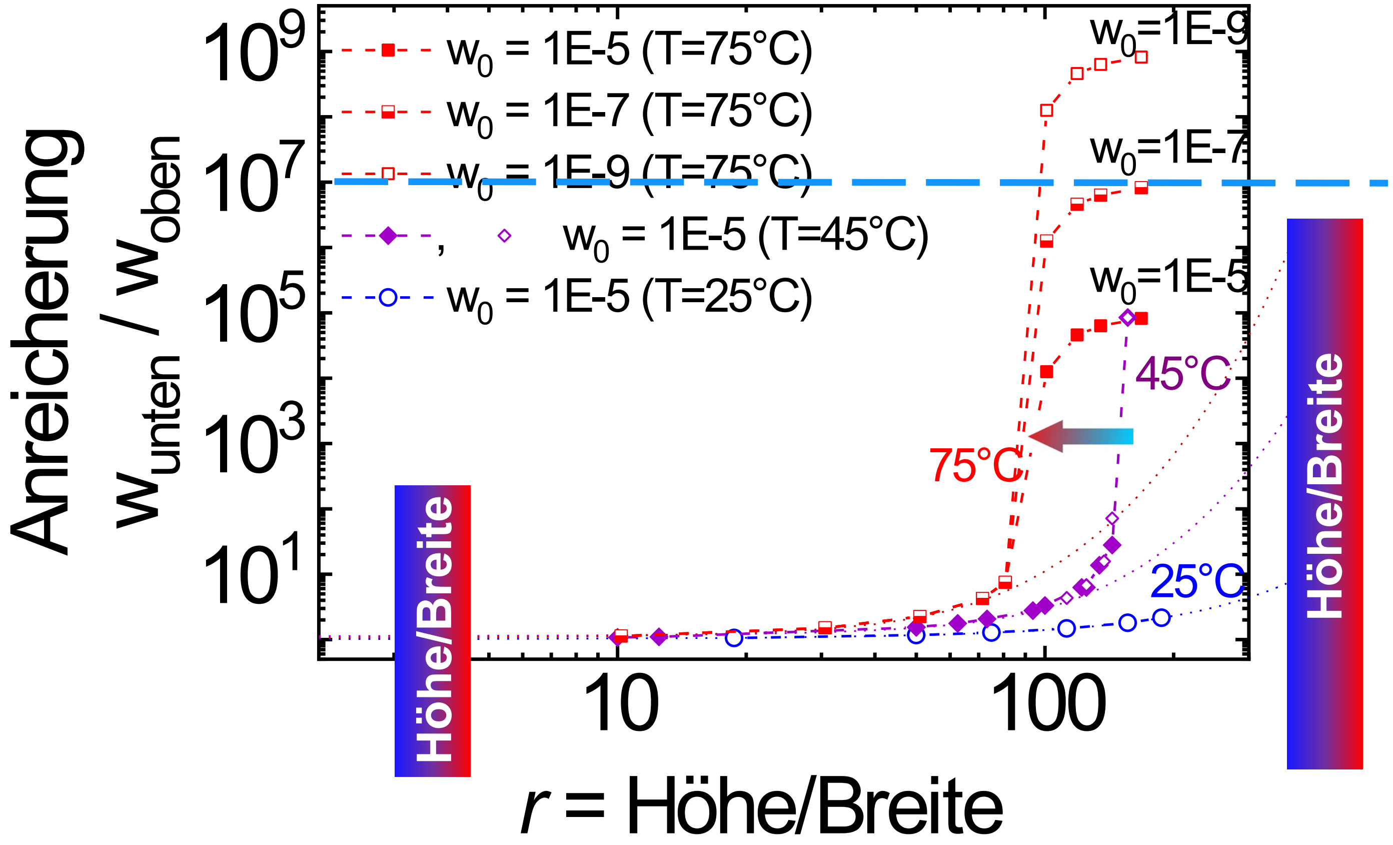
Konvektion zu schnell



$w=w_0$
flacher See
Konvektion
Thermodiffusion
T_{kalt}
T_{warm}
L_y
maximale Anreicherung
L_x

Breite: L_x
Höhe: L_y

ANREICHERUNG VON FORMAMID



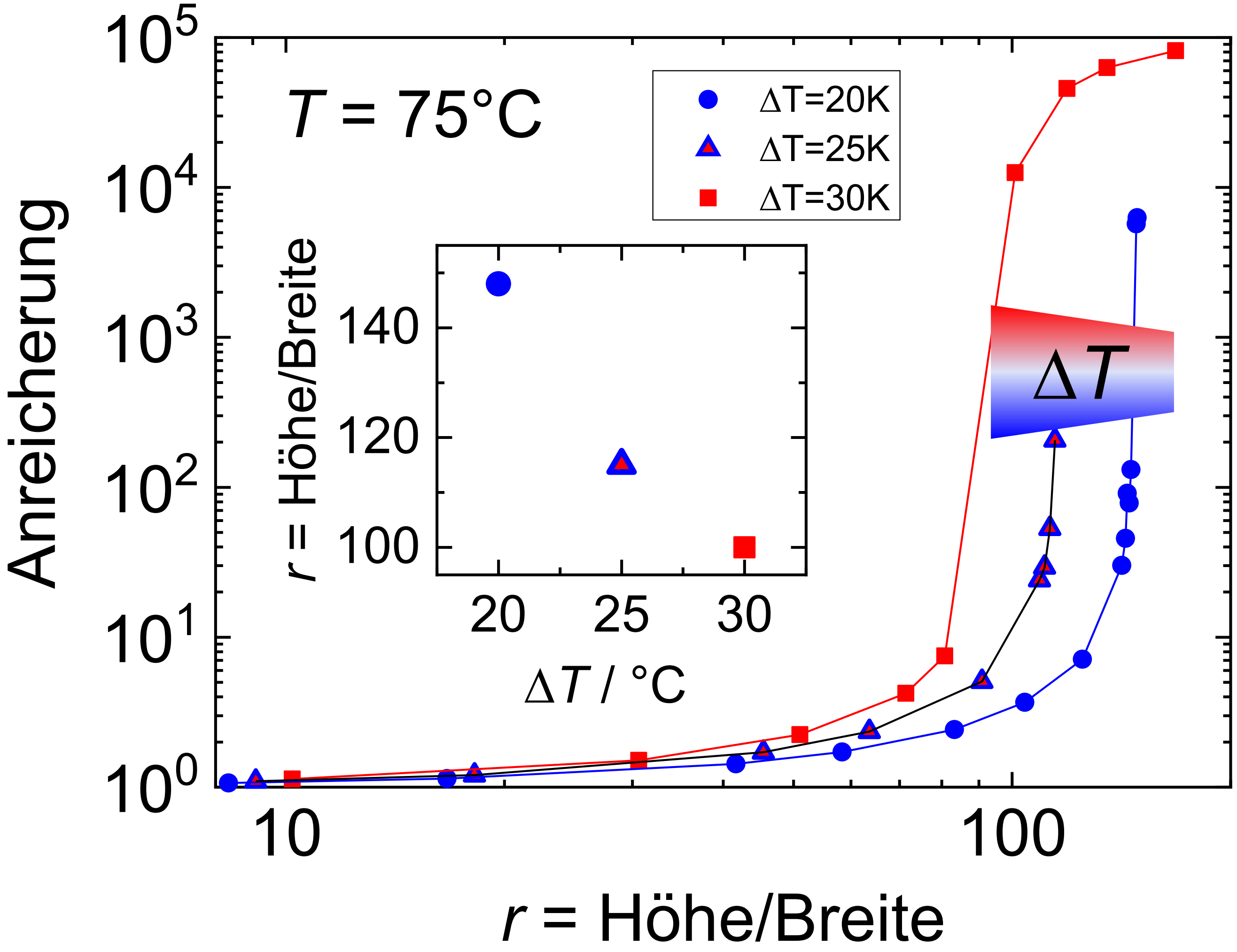
$$\frac{w_{\text{unten}}}{w_{\text{oben}}} \cdot w_0 \leq 1$$

Effektive Anreicherung verlangt Mindesthöhe der Pore

- **hängt ab von ΔT und *T***

ANREICHERUNG VON FORMAMID

Abhängigkeit vom Temperaturunterschied

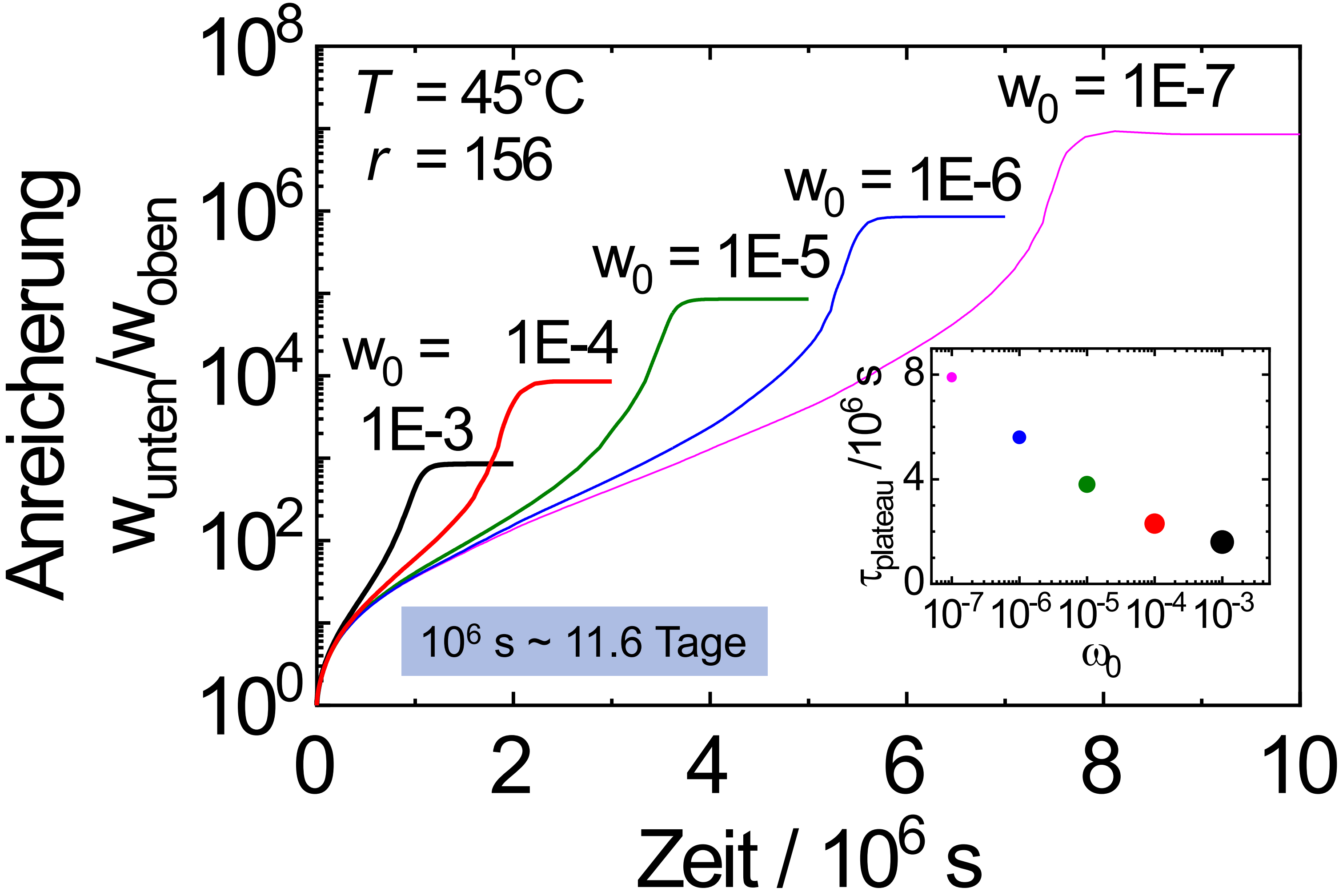


Größeres ΔT

Starke Anreicherung bei geringeren Höhen

ANREICHERUNG VON FORMAMID

Wie lange dauert es bei verschiedenen Startkonzentrationen?

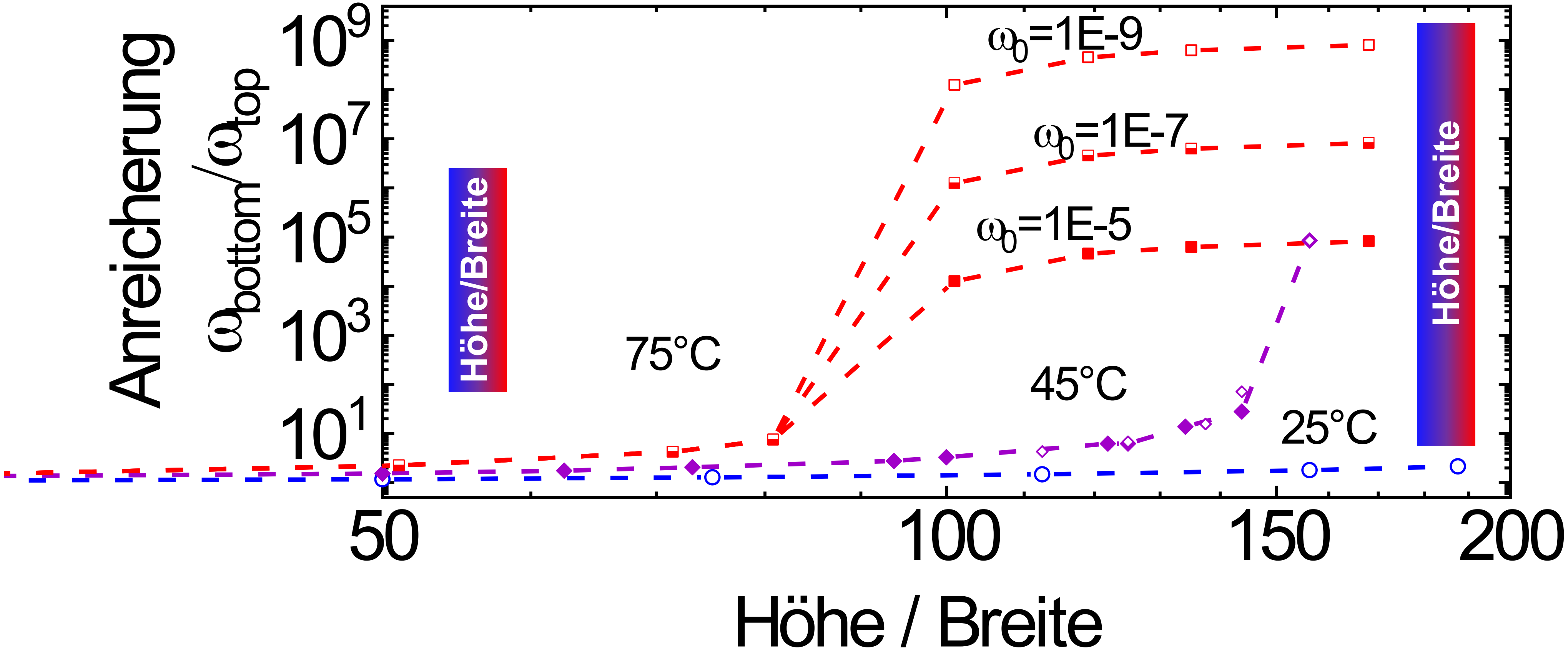


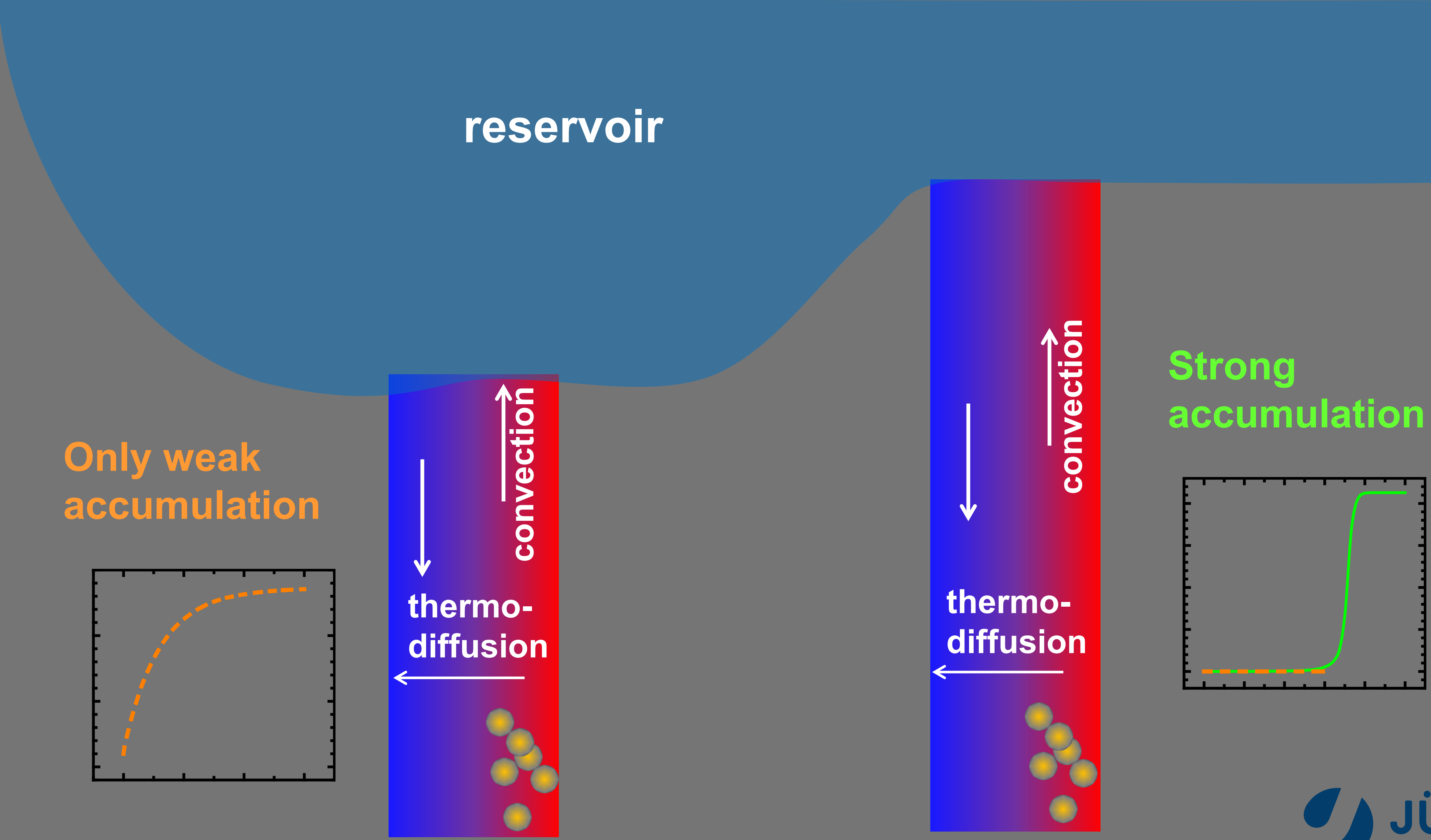
10^6 s ~ 11.6 Tage

Konzentration steigt auf ~85%, unabhängig von der Start-konzentration

ANREICHERUNG VON FORMAMID

Geometrie beeinflußt das Anreicherungsvermögen





reservoir
Only weak
accumulation
convection
thermo-
diffusion
convection
thermo-
diffusion
Strong
accumulation

© S.Wiegand, FZ Jülich

Verstehen wir den starken Anstieg?

Einfacher intuitiver Ansatz

$$v_y = \boxed{v_{convection}} + \boxed{D\frac{\Delta_y w}{L_y}}$$

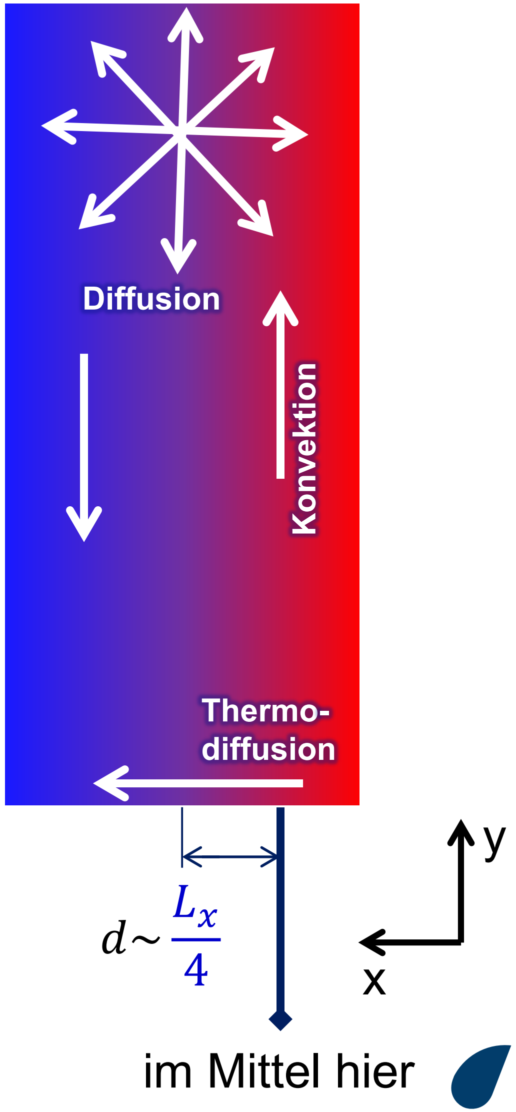
$$v_x = \boxed{-D\frac{\Delta_x w}{L_x}} + \boxed{w(1-w)D_T\frac{\Delta T}{L_x}}$$

Zeit um das obere Ende der Pore zu erreichen > Zeit um vom konvektiven Strom nach oben in den nach unten zu gelangen

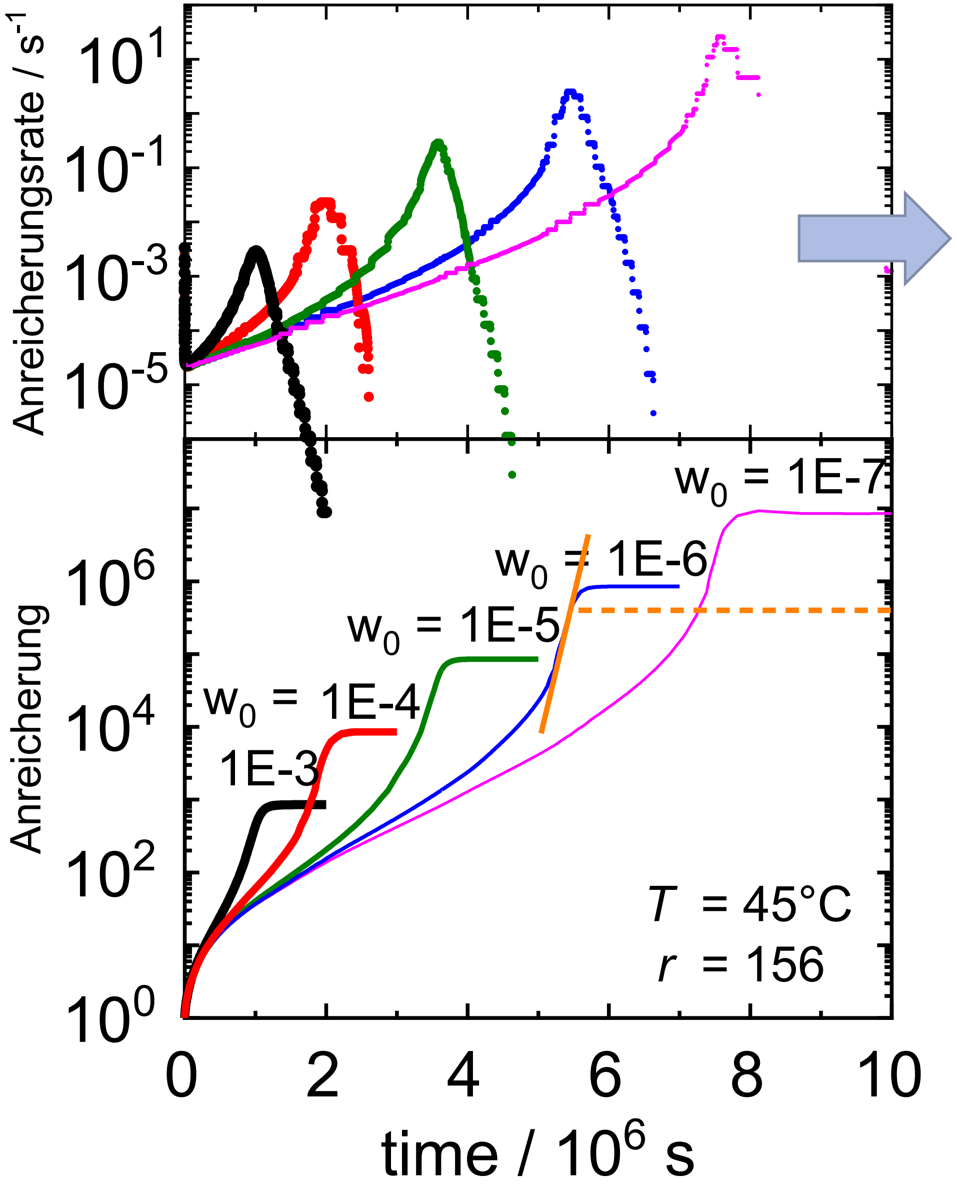
$$\frac{L_y}{v_y} = t_y > t_x = \frac{(L_x / 4)}{v_x}$$

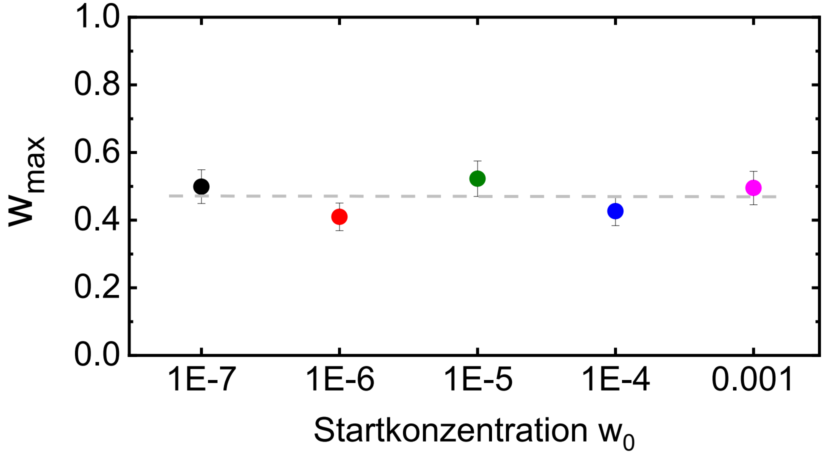
$$\Rightarrow \frac{L_y}{L_x} > \frac{v_y}{4v_x}$$

$$(r^*)^2 = \left(\frac{L_y}{L_x}\right)^2 > \frac{(L_y \cdot v_{convection} + D \cdot \Delta_y \omega)}{4 \cdot (-D\Delta_x \omega + w(1-w)D_T \Delta T)}$$


Diffusion
Konvektion
Thermo-diffusion
$d \sim \frac{L_x}{4}$
y
x
im Mittel hier

EINFACHER INTUITIVER ANSATZ

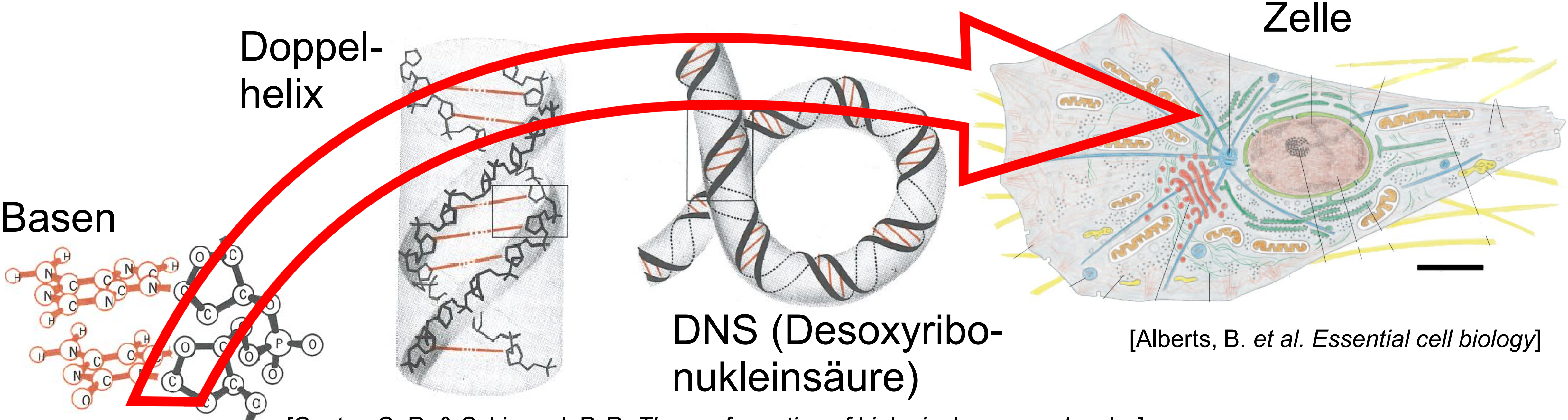




r^* hat ein Minimum bei w = 0.5

$$\left(r^*\right)^2 \propto \frac{1}{w(1-w)D_T\Delta T}$$

WIR HABEN EINEN MECHANISMUS IDENTIFIZIERT



Basen

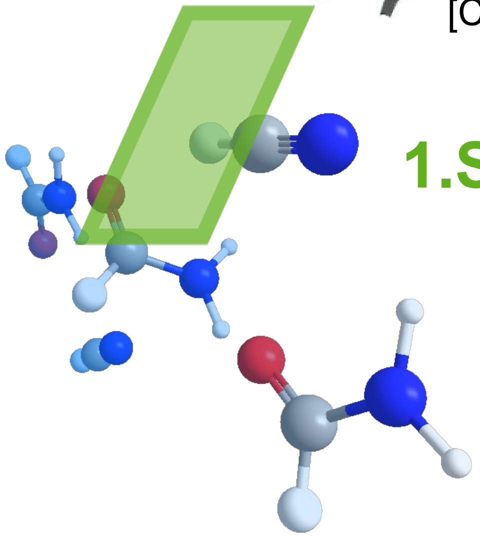
Doppel-
helix

DNS (Desoxyribo-
nukleinsäure)

Zelle

[Cantor, C. R. & Schimmel, P. R. *The conformation of biological macromolecules*]

[Alberts, B. *et al. Essential cell biology*]

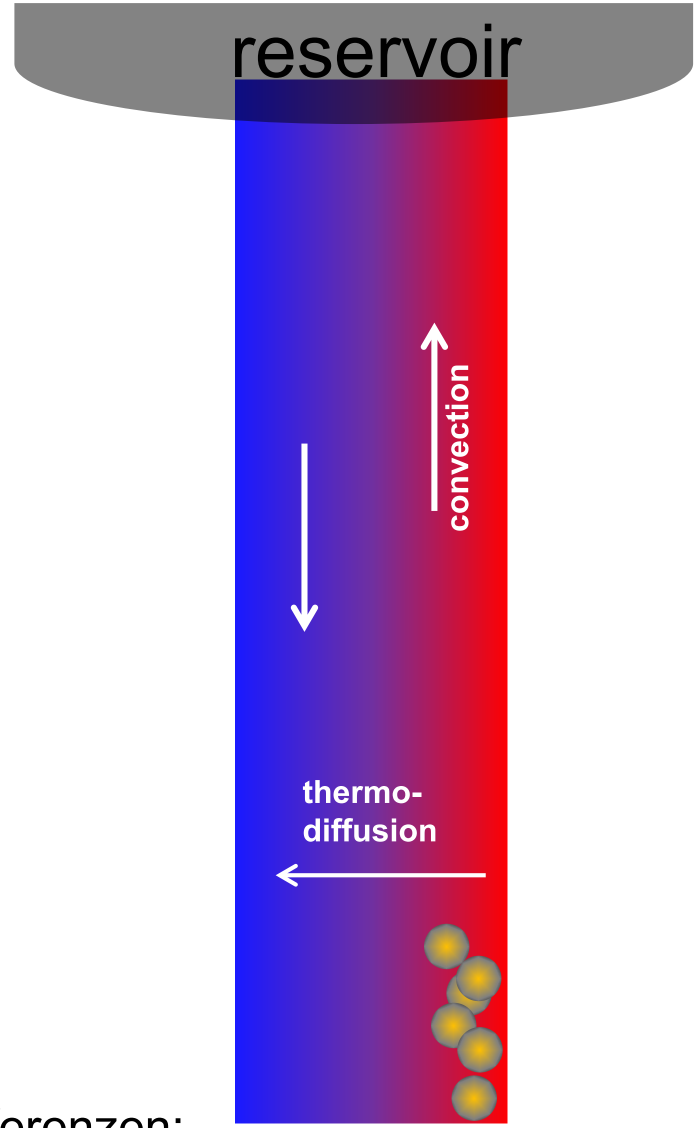


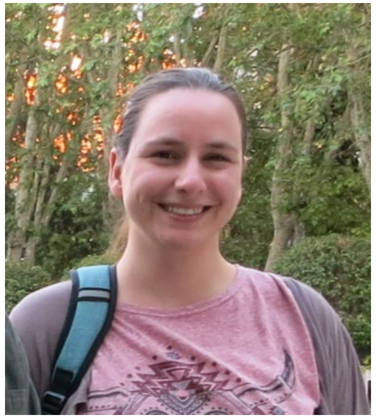
1.Schritt ✓

Derselbe Mechanismus funktioniert auch für Nukleobasen

$$S_T \equiv \frac{D_T}{D} \propto \frac{\Delta w}{\Delta T}$$

VIELEN DANK FÜR IHR INTERESSE UND EIN DICKES DANKESCHÖN AN ...





Doreen Niether

BioSoft
Biophysics and Soft Matter

D. Afanasenkau

Hilfe
beim
COMSOL
Modell

J.K.G. Dhont

großzügige
Unterstützung

Referenzen:

D. Niether, D. Afanasenkau, J.K.G. Dhont, S. Wiegand, P*NAS* **113** (2016) 4272

D. Niether and S. Wiegand, Entropy, 19 (2017) 33