



# INCLUSION D'AZOTE DANS LES ANALOGUES D'AÉROSOLS DE TITAN

---

Thomas Gautier<sup>1</sup>, N. Carrasco<sup>2</sup>, C.Szopa<sup>2</sup>, I. Schmitz-Afonso<sup>3</sup>, D. Touboul<sup>3</sup>, A. Buch<sup>4</sup>, P. Pernot<sup>5</sup>

<sup>1</sup>NASA Goddard Space Flight center

<sup>2</sup>LATMOS, Guyancourt

<sup>3</sup>ICSN, Gif sur Yvette

<sup>4</sup>LGPM, Chatenay-Malabry

<sup>5</sup>LCP, Orsay

SFE, La Baule, 7 Octobre

# Titan: Une Terre froide primitive

- Plus grand satellite de Saturne
- Satellite de glace
- Atmosphère dense  $N_2$ - $CH_4$
- Cycle solide/liquide/gaz

Caractéristique	Titan	Earth
Surf. Pression	1.5 bar	1 bar
Atm. Composition	$N_2$ - [2-10] % $CH_4$	80% $N_2$ - 20% $O_2$
Surf. Temperature	90K	300 K
Surface liquide	$CH_4$ & $C_2H_6$	$H_2O$



Picture of Titan's surface ©ESA

# Titan: atmosphère

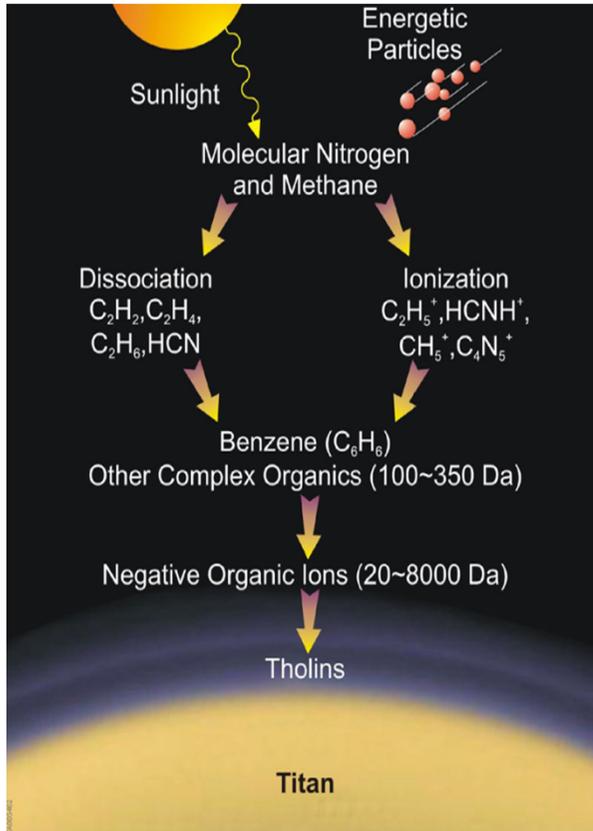


Titan's atmosphere  
seen by Voyager 1  
(1980 © NASA)

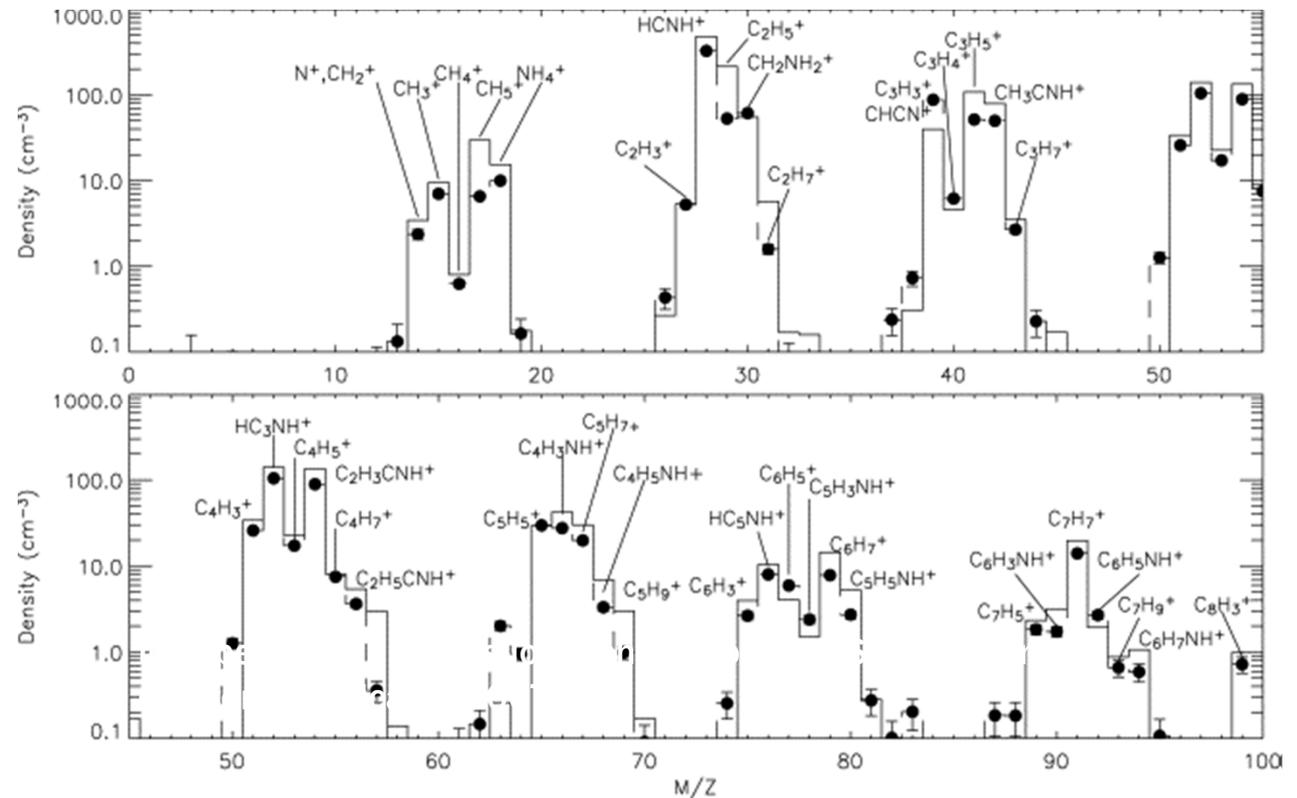


Titan's atmosphere  
seen by Cassini  
(2004-2013 ©  
NASA)

# Formation des aerosols de Titan

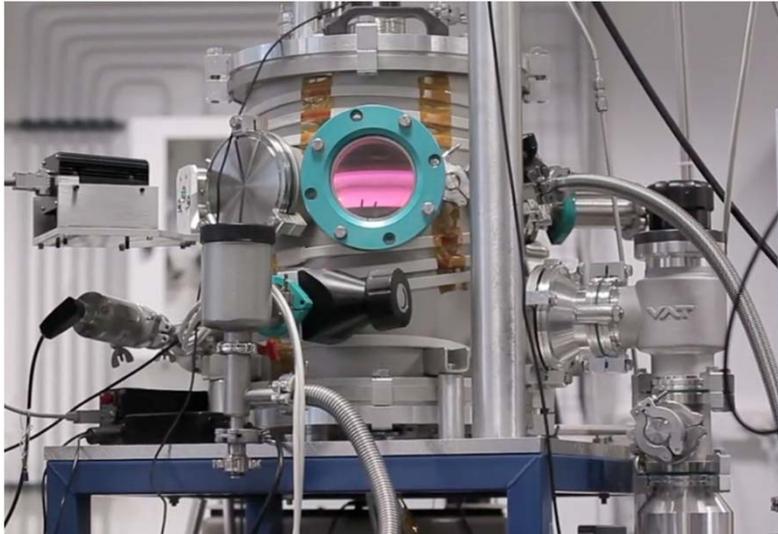


Tholin formation in Titan's upper atmosphere  
 Processus suppose de formation des aerosols dans la haute atmosphere  
 (Waite Jr. et al. Science 2007)



- Molecules incluant de l'azote
- Croissance ionique

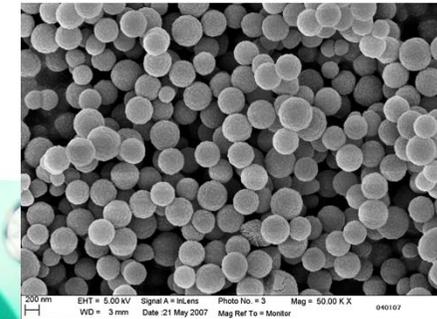
# L'atmosphère de Titan en boîte



L'expérience PAMPRE au LATMOS

	PAMPRE
Pressure	~ 1 mbar
Temperature	Room temp.
Energy deposition	RF Plasma 30 W
%CH <sub>4</sub> in N <sub>2</sub>	0 – 10 %

**Aerosols** ⇒ charges électriquement  
⇒ en lévitation dans le plasma  
⇒ croissance en volume  
⇒ Produit en grande quantité

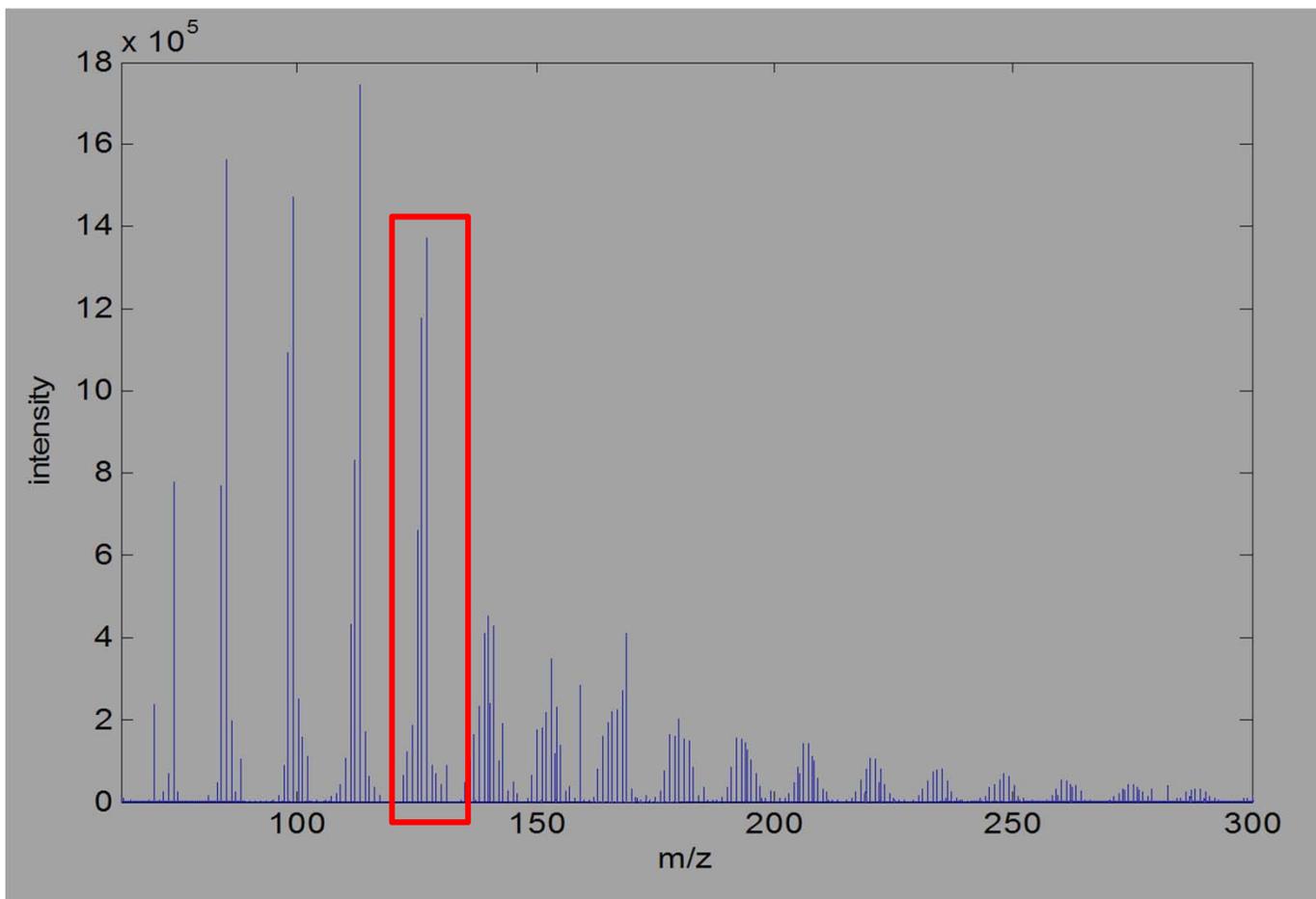


Aérosols produits

# Composition des aerosols

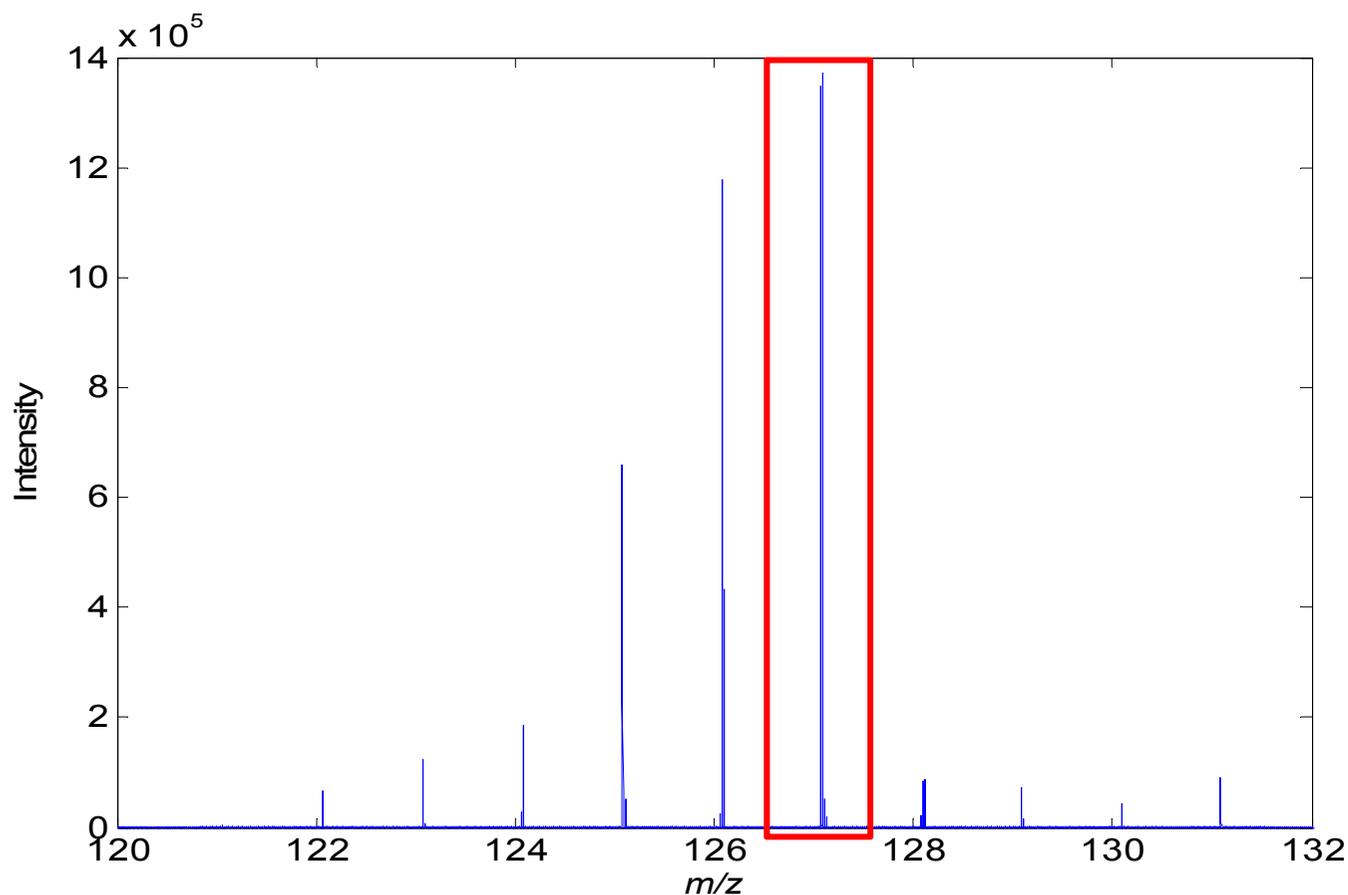
- Spectrométrie de masse haute résolution Orbitrap
    - Spectre de  $m/z$  50 @  $m/z$  500
    - $m/\Delta m = 200\ 000$  @  $m/z$  150
- ⇒ Accès à la formule brute exacte des composés détectés

# SM Haute resolution Orbitrap



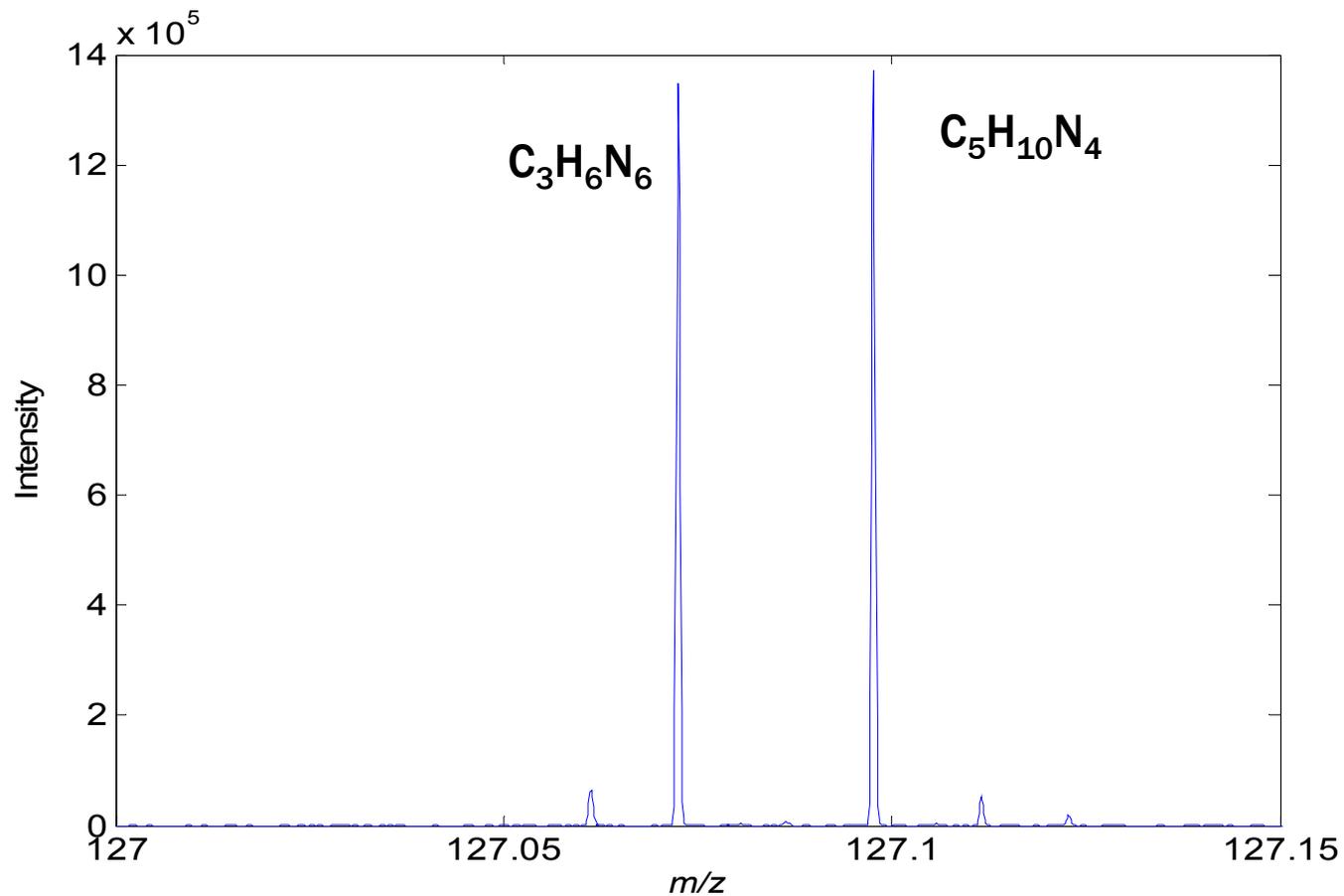
- Acces a la formule brute des composes detectes
- **~15.000 especes detectees a partir de  $m/z$  60**

# SM Haute resolution Orbitrap



- Acces a la formule brute des composes detectes
- **~15.000 especes detectees a partir de  $m/z$  60**

# SM Haute resolution Orbitrap



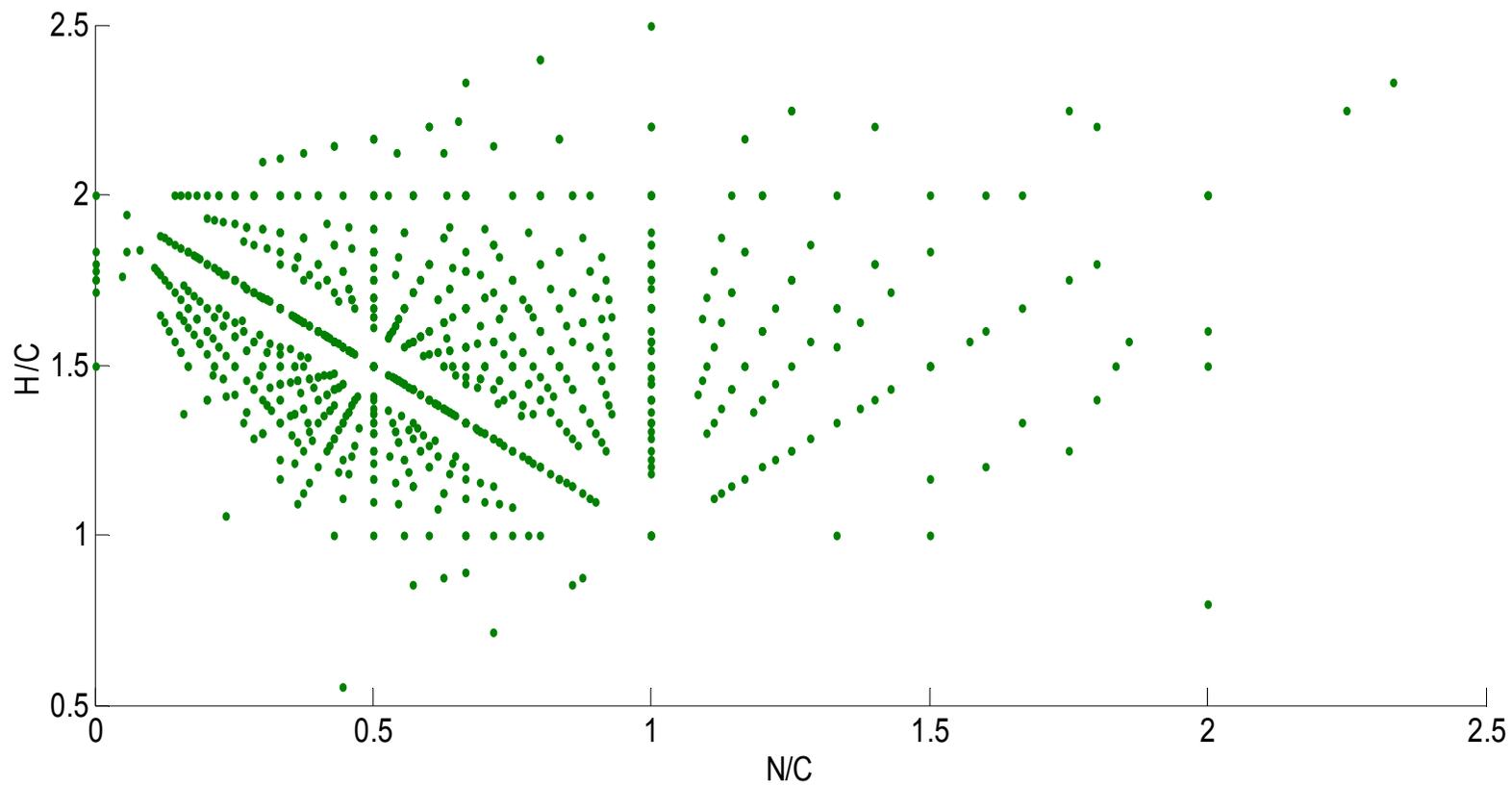
- Acces a la formule brute des composes detectes
- **~15.000 especes detectees a partir de  $m/z$  60**

# Decomposition statistique des spectres de masse

- Grande quantité de composés détectés (~15000)
  - Traitement exhaustif de tous les pics n'est pas réaliste
- ⇒ Besoin d'une méthode simplificatrice
- ⇒ Représentation statistique de l'échantillon
- ⇒ Diagramme de Van-Krevelen (développés pour la petroleomics) adaptés au N-Bearing molécules

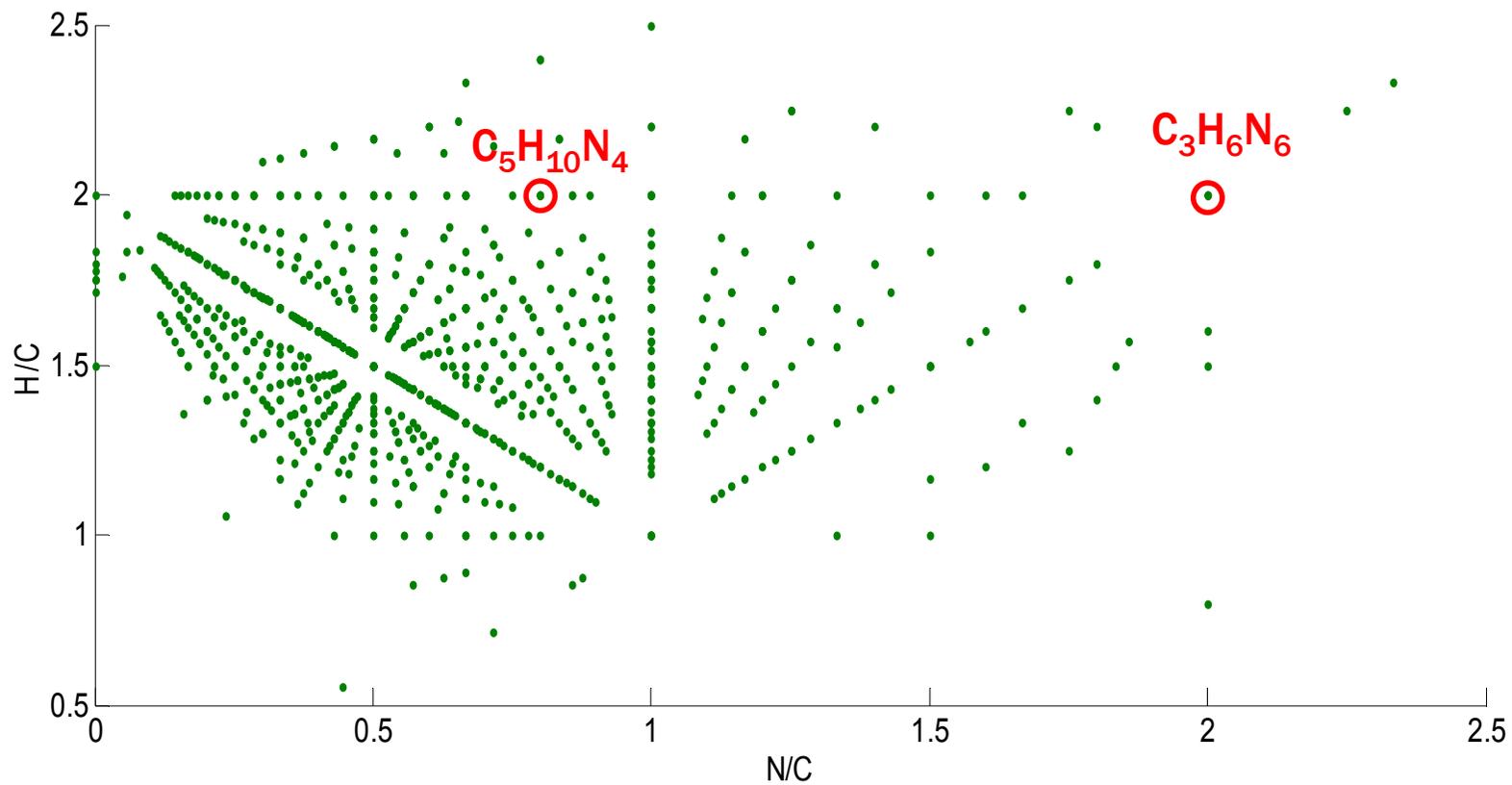
# Van Krevelen diagrams

- Chaque molecule est placee sur le diagramme en fonction de ses ratios H/C et N/C



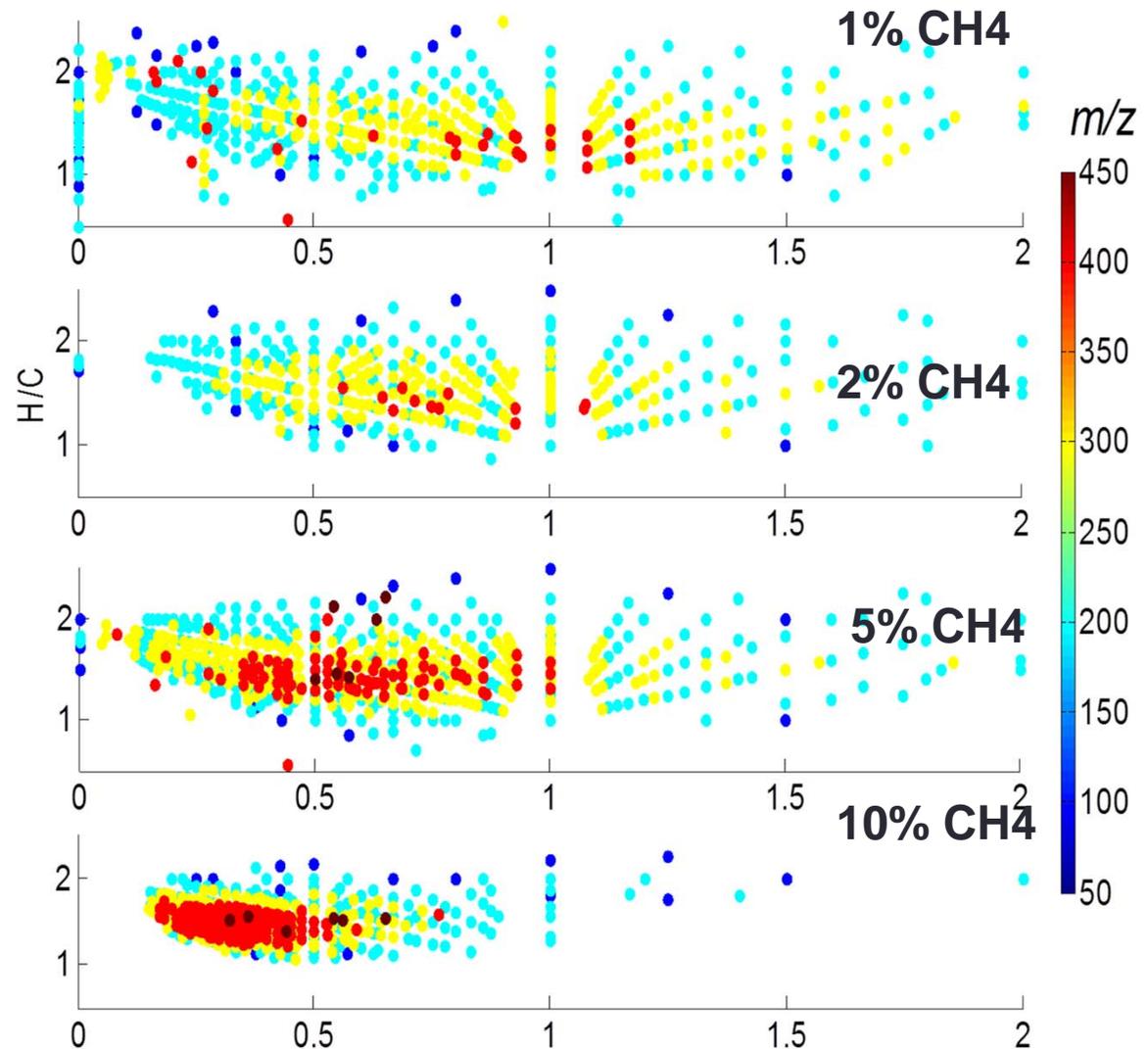
# Van Krevelen diagrams

- Chaque molecule est placee sur le diagramme en fonction de ses ratios H/C et N/C



# Van Krevelen diagrams

- Chaque molecule est placee sur le diagramme en fonction de ses rations H/C et N/C
- Appauvrissement de l'aile droite en fonction de %CH<sub>4</sub>



# Intérêt d'un traitement stat

⇒ Permet de réduire drastiquement la quantité de donnée à traiter sans trop de perte d'information.

## Conclusions :

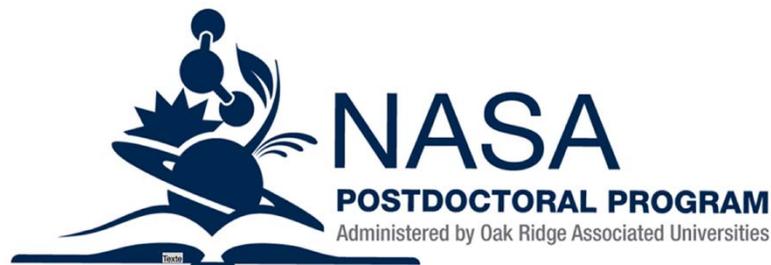
- Identification de plusieurs "familles" de polymères
- 2 monomères simple ne suffisent pas à reproduire la structure polymérique des aérosols
- MAIS... besoin de seulement ~4-5 variations de copolymère pour reconstruire entièrement le spectre de masse

# Intérêt exobiologique

- Formation en **phase gaz** d'un très grand nombre de composés organiques, dans des conditions 'approchant celles de la Terre Primitive'
- => Apport **Endogène** à la surface (Titan, Terre primitive?, exoplanètes?) de composés organiques
  - Précurseurs AA
  - Acides aminés si inclusion de CO dans le mélange de gaz initial (Horst et al. 2013)
  - Bases puriques (Adénine, Pyrimidine etc.)

# Remerciements et Collaborations

- **LATMOS**: N. Carrasco, C. Szopa, G. Cernogora, E. Hadamcik, A. Mahjoub, B. Fleury, E. Sciamma-O'Brien, E.-T. Es-Sebbar., P.-R. Dahoo, J.-J. Correia
- **ICSN (Orbitrap)**: I. Schmitz-Afonso, D. Touboul
- **LCP (VK, APSIS)** : P. Pernot, Z. Peng
- **Ecole centrale Paris (GC-MS)**:  
A.Buch



# Identification des familles de polymeres

Reconstruire le SM en partant d'un co-polymère idéal de 2 monomères  $x$ ,  $y$

Chaque pic:  $n*x+m*y+\alpha*C$  ;  $\alpha$  = index excès carbone

- 0 atome de carbone ajoute:  $\alpha = 0 \Rightarrow$  famille 0  
Co-polymère idéal, reproduit parfaitement le pic
- 1 atome de carbone ajoute:  $\alpha = 1 \Rightarrow$  famille +1
- 1 atome de carbone retire:  $\alpha = -1 \Rightarrow$  famille -1 .....

Exemple pour les pics @  $m/z$  127:

$x = \text{HCN}; y = \text{C}_2\text{H}_2$

$\text{C}_3\text{H}_6\text{N}_6 = 6 * \text{HCN} + 0 * \text{C}_2\text{H}_2 - 3 * \text{C}$

$\alpha = -3$

$\text{C}_5\text{H}_{10}\text{N}_4 = 4 * \text{HCN} + 3 * \text{C}_2\text{H}_2 - 5\text{C}$

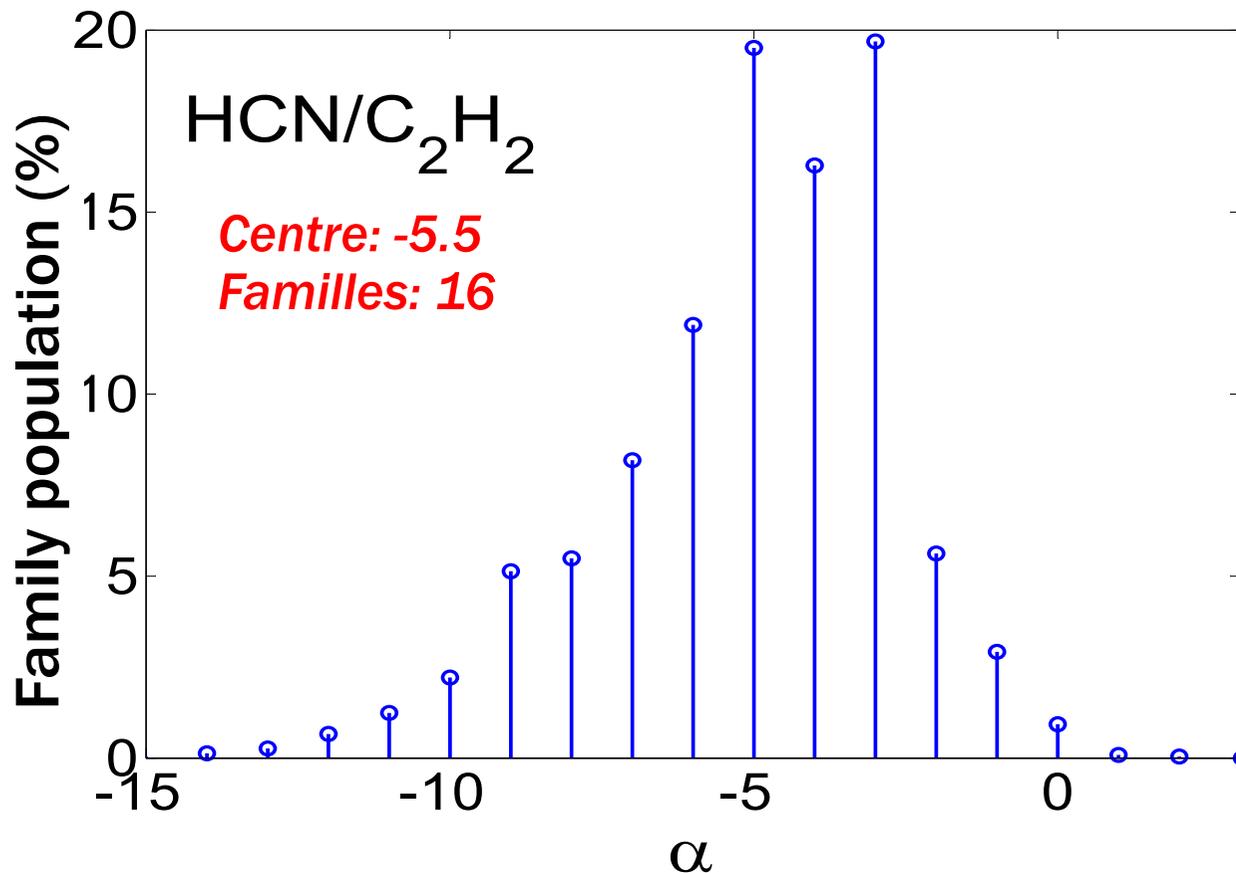
$\alpha = -5$

**=> Et on fait ca pour chaque pic...**

# Identification famille polymérique

Chaque pic  $\Rightarrow \alpha$

*SM entier  $\Rightarrow \alpha$  distribution  $\Rightarrow$  distribution des familles de polymeres*



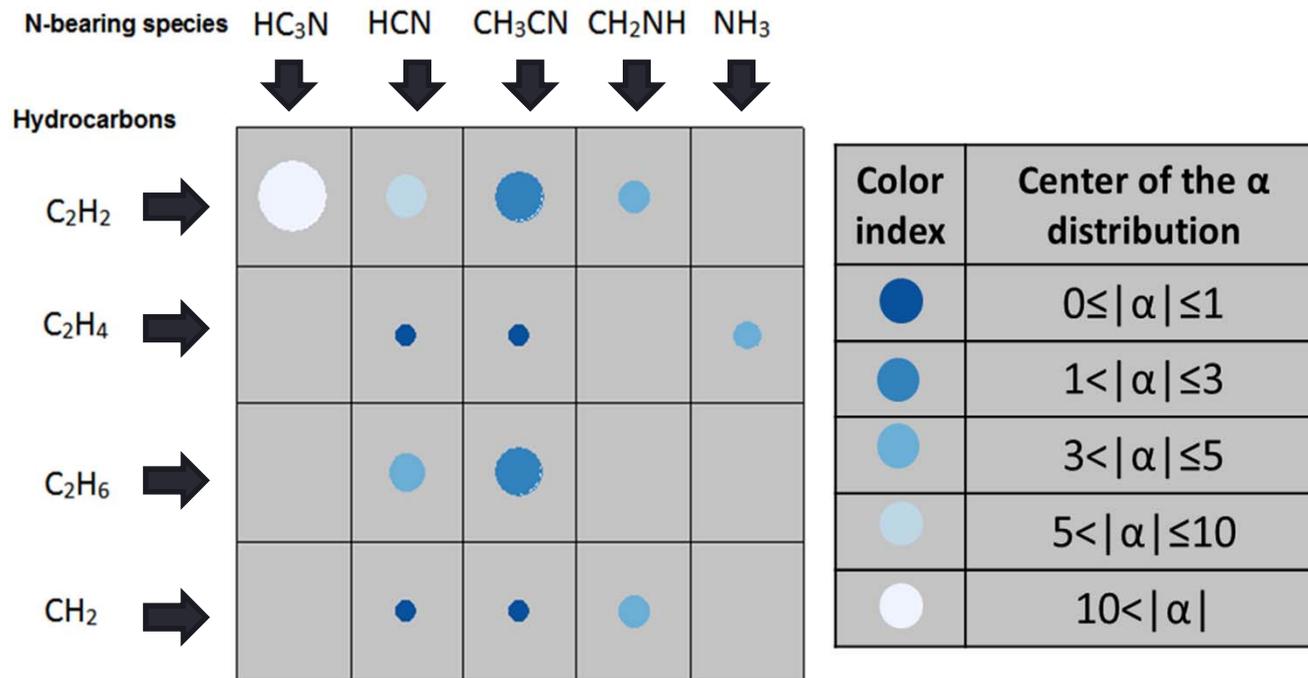
Plusieurs couples de polymères testes

Good match:

- *$\alpha$  distribution fine*
- Centrée en  $\alpha=0$
- Cas idéal : pic unique en 0

# Identification famille polymérique

- N-bearing monomères:  $\text{HC}_3\text{N}$ ,  $\text{HCN}$ ,  $\text{CH}_3\text{CN}$ ,  $\text{CH}_2\text{NH}$  and  $\text{NH}_3$
- Hydrocarbures monomères:  $\text{C}_2\text{H}_2$ ,  $\text{C}_2\text{H}_4$ ,  $\text{C}_2\text{H}_6$ ,  $\text{CH}_2$
- Meilleure représentation:  $\text{C}_2\text{H}_4$  + nitrile
- 2 monomères ne suffisent pas à décrire la structure des tholins



Représentation des différentes combinaisons de monomères testées

Taille = > nombre de famille nécessaires pour reconstruire en entier le spectre de masse