
Etude expérimentale et théorique des molécules prébiotique

Ayad Bellili*¹, Majdi Hochla¹, Martin Schwell², Yves Bénilan³, Marie Claire Gazeau², Lionel Poisson⁴, Jean Claude Guillemin⁵, and Nicolas Fray²

¹MSME – Université Paris Est Marne la vallée – France

²LISA – Université Paris Est (UPE) – France

³LISA – Université Paris-Est – France

⁴CEA – Laboratoire Francis Perrin, URA 2453, F-91191 Gif-sur-Yvette, – France

⁵Equipe Chimie Organique et Supramoléculaire Sciences Chimiques de Rennes – Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Rennes – France

Résumé

Dans ce travail nous nous sommes intéressés à l'étude théorique et expérimentale des deux molécules, Pyruvonnitrile (NC-C(O) CH₃) et Aminoacétonitrile (H₂N-CH₂CN) [1]. Ces deux molécules ont un intérêt astrophysique, ces derniers sont inspirés de la réaction de Streker [2] qui est à l'origine d'un scénario réaliste de formation d'acides aminés dans des conditions interstellaires.

Dans la premier partie de cette étude nous avons mesuré les spectres de photoionisation des deux molécules Pyruvonnitrile (NC-C(O) CH₃) et Aminoacétonitrile (H₂N-CH₂CN).

La seconde partie de ce travail consiste au calcul ab-initio de la chimie quantique à fin d'analyser les spectres et l'apparence de fragment énergies et les spectres d'absorption quantitative ainsi que les rendements quantiques de l'ionisation et le calculs des états excités pour la détermination des courbes d'énergies potentielle et le calcul des constantes spectroscopiques et l'optimisation des géométries pour l'interprétation des spectres.

A.belloche,K.M.Menten,C.Comito,H.S.P.Muller, P.Schilke,J.Ott, S. Thorwirth ,C.Hieret, A&A.482,179-196 (2008).

Danger et al, 2011 Astrophys 535 (2011), A47, 1-9.

J.C. Pouilly, J.P. Schermann, N. Nieuwjaer, F. Lecomte, G. Grégoire, C. Desfrancois, G. A. Garcia, L. Nahon, D. Nandi, L.Poisson and M. Hochlaf, Phys Chem Chem Phys. 12 (2010) 3566.

Mots-Clés: pyruvonnitrile

*Intervenant