**Etude expérimentale et théorique des molécules prébiotique**

A. Bellili1, M. Hochlaf1, M. Schwell2, Y. Bénilan2, N. Fray2, M.-C. Gazeau2, L. Poisson3, J.-C. Guillemin4

*1 Université Paris-Est, Laboratoire Modélisation et Simulation Multi Echelle, MSME UMR 8208 CNRS, 5 bd Descartes, 77454 Marne-la-Vallée, FRANCE.*

*2 Laboratoire Interuniversitaire des Systèmes Atmosphériques (LISA), UMR CNRS 7583, Université*

*Paris Est Créteil and Université Paris Diderot, Institut Pierre Simon Laplace, 61 Avenue du Général de Gaulle, 94010 Créteil, FRANCE*

*3 CNRS, IRAMIS, SPAM, Laboratoire Francis Perrin, URA 2453, F-91191 Gif-sur-Yvette, France. CEA, IRAMIS, SPAM, Laboratoire Francis Perrin, URA 2453, F-91191 Gif-sur-Yvette, FRANCE.*

*4 Equipe Chimie Organique et Supramoléculaire Sciences Chimiques de Rennes, UMR 6226 Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Rennes CS 50837, 35708 Rennes, FRANCE.*

Dans ce travail nous nous sommes intéressés à l’étude théorique et expérimentale des deux molécules, Pyruvonitrile (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 Pyruvonitrile (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.

[1] 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).

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

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