



## SEMINAIRE ISMO

**Ayad BELLILI**

*Univ. Paris Est, MSME, UMR 8208 CNRS, Champs-sur-Marne, France.*

### **Calcul Ab initio et spectroscopie de l'ultraviolet de vide des molécules prébiotiques et interstellaires**

Dans ce travail, nous nous sommes intéressés à l'étude théorique et expérimentale de la molécule prébiotique pyruvonnitrile (PY,  $\text{NC-C(O)CH}_3$ ). Cette molécule est inspirée de la réaction de Strecker qui est un scénario plausible de formation d'acides aminés dans des conditions physico-chimiques interstellaires.

Au cours de cette étude, nous avons mesuré les spectres de photoionisation de la pyruvonnitrile avec le spectromètre DELICIOUS3 disponible sur la ligne DESIRS du Synchrotron SOLEIL. La seconde partie de ce travail consiste à utiliser des calculs ab-initio de chimie quantique pour analyser les spectres et déterminer les mécanismes de fragmentation de l'ion  $\text{PY}^+$  formé. Nous avons également traité les états excités de cet ion. Nous avons ainsi déterminé les énergies d'apparition des fragments, des rapports de branchement d'état à état correspondants. Nous avons également déterminé les constantes spectroscopiques (vibration et rotation) de la molécule neutre et ionisée qui permettront leur détection dans le milieu interstellaire.

**Mardi 10 mai 2016 à 11h**

**Bât 351 – 2ème étage (Bibliothèque)**

**Université Paris-Sud - 91405 ORSAY Cedex**