



Université Claude Bernard



# DIPLÔME NATIONAL DE DOCTORAT

(Arrêté du 25 mai 2016)

Date de la soutenance : **13 octobre 2022**

Nom de famille et prénom de l'auteur : **Monsieur LAVY Léo**

Titre de la thèse : « *Relaxation post-collisionnelle de petits agrégats moléculaires protonés* »



## Résumé

Les petits agrégats moléculaires protonés sont présents dans l'atmosphère terrestre et participent aux premières étapes de la formation des aérosols atmosphériques. L'utilisation combinée du Dispositif d'irradiation d'agrégats moléculaires de Lyon et de plusieurs méthodes théoriques permet l'étude statistique des mécanismes de relaxation de ces petits agrégats suite à une excitation sur un temps court (fs) d'une des molécules de l'agrégat. En effet, ce dépôt d'énergie localisé dans une des molécules de l'agrégat place celui-ci dans une situation très éloignée de l'équilibre thermique et plusieurs mécanismes de relaxation sont observés.

La compétition entre l'évaporation d'une molécule, la fragmentation des molécules, et la réactivité est étudiée. Les résultats sont comparés pour différents agrégats moléculaires ; agrégats mixte pyridine-eau, agrégats de méthanol, et agrégats de glycine.

Dans le cas de la glycine, la formation de peptide est observée dans la source d'agrégats. La production dominante d'agrégats mixtes protonés formés de diglycine et de glycine est interprétée à partir des résultats des calculs d'affinité protonique basés sur la théorie de la fonctionnelle de la densité. Par ailleurs, la formation du dipeptide et l'allongement de la chaîne peptique ont été mis en évidence dans une réaction unimoléculaire. La mesure de la distribution de vitesse de la molécule d'eau éliminée par la réaction de polymérisation montre la présence de différents chemins de réaction pour lesquels le rôle du proton a été exploré par des calculs basés sur la théorie de la fonctionnelle de la densité.

Les résultats obtenus avec la théorie de l'espace de phase sur les petits agrégats de méthanol montrent que les mesures des rapports de branchement et des distributions d'énergie cinétique libérée lors de la relaxation contraignent la description théorique et soulignent l'importance du temps de transfert d'énergie entre les molécules. Enfin, les expériences réalisées à partir de collisions agrégat-atome à haute vitesse seront étendues avec l'utilisation de faisceaux de protons de 10 à 150 keV dont la mise en œuvre a été réalisée.