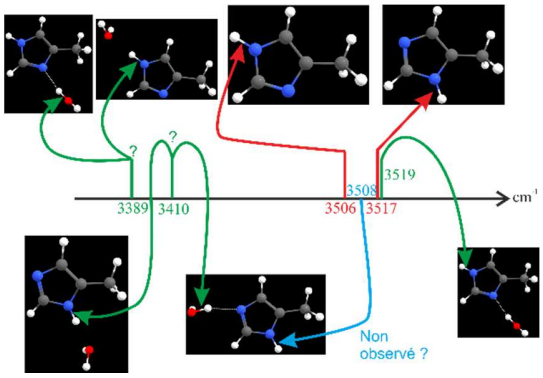

Des molécules de 4/5-méthylimidazole (4/5-MeIm) et d'eau ont été déposées dans des agrégats d'hélium. Elles s'y sont associées et ont formé différents isomères du complexe 4/5-MeIm-H_2O. Lors de cette complexation, le 4/5-MeIm est à la fois donneur et accepteur de proton, tout comme l'eau. Par ailleurs, le 4/5-MeIm a 2 tautomères. Ces deux causes réunies multiplient le nombre d'isomères possibles lors de la complexation. Grâce à la très basse température (0,4 K) des agrégats d'hélium, la distribution des tautomères du 4/5-MeIm a été figée lors du dépôt en agrégat et correspond à celle obtenue lors de son évaporation à 310 K. L'acquisition de spectres infrarouges a permis d'obtenir les bandes caractéristiques (vibration N-H) des 2 tautomères du 4/5-MeIm ainsi que celles de plusieurs isomères de son complexe avec la molécule d'eau (vibrations N-H et O-H). Des calculs de DFT-D ont permis d'attribuer certaines de ces bandes (cf. graphique). Cependant des ambiguïtés existent dans l'attribution, car certaines fréquences de vibrations théoriques sont proches les unes des autres et leur écart est souvent de l'ordre de grandeur des incertitudes de calcul. Des expériences reposant sur l'utilisation d'eau deutérée sont en cours pour affiner ces attributions et fournir des éléments quantitatifs pour améliorer les méthodologies de calcul. Les calculs de DFT-D ont également servi à estimer la constante de tautomérisation qui est mal connue.