

ملخص باللغة العربية

الكافيين هو مادة طبيعية ذات أصل نباتي استخدمت لخصائص محفزة على الجهاز العصبي. وجدت في أشكال مختلفة، وخاصة في المشروبات مثل القهوة والشاي والمشروبات الغازية الصناعية، ومشروبات الطاقة، وكذلك في المستحضرات الصيدلانية الخاصة والمكملات الغذائية. كان الهدف من هذا العمل دراسة تأثير مجموعة البدائل على الخصائص الإلكترونية والهيكلية لمشتقات الكافيين و انعكاساتها على الخواص الفيزيائية و الكيميائية. **كلمات مفتاحية :** الكافيين، التيوفيلين، DFT.

Abstract

Caffeine is a natural substance of plant origin used for its stimulative properties on the nervous system. It is found in various forms, especially in drinks such as coffee, tea, industrial sodas, energy drinks, as well as in specialty pharmaceuticals and dietary supplements.

The objective of this work was to study the influence of the heteroatom on the electronic and structural properties of caffeine derivatives.

Keywords : Caffeine, Theophylline, DFT.

Résumé

La caféine est une substance naturelle d'origine végétale utilisée pour ses propriétés stimulantes sur le système nerveux, on la retrouve sous différentes formes, notamment dans les boissons telles que le café, le thé, les sodas industriels, boissons énergisantes, ainsi que dans des spécialités pharmaceutiques et compléments alimentaires.

L'objectif de ce travail était d'étudier l'influence de l'hétéroatome sur les propriétés électroniques et structurales de dérivés de la caféine.

Mots clés : Caféine, Théophylline, DFT.