
CONCLUSION GENERALE

Conclusion générale :

Ce travail est une contribution quantique à l'étude de la structure et de la réactivité des hétérocycles, qui jouent un rôle important dans l'industrie, l'agroalimentaire et la synthèse.

On s'est intéressé dans ce mémoire à l'étude de l'influence de l'hétéroatome X et/ou Y qui peuvent être un oxygène ou un soufre, sur les propriétés électroniques et structurales des composés hétérocycliques caféine et théophylline et de ses dérivés. Les différents tautomères ont été optimisés au moyen de la méthode DFT avec comme base étendue B3LYP/6-311G en utilisant le code Gaussian03.

Cette étude nous a permis de vérifier que le remplacement de l'hétéroatome influe sur la stabilité ; la substitution progressive de l'hétéroatome oxygène par un hétéroatome soufre diminue l'énergie et augmente la stabilité. Le résultat des écarts HOMO/LUMO confirme cette conclusion.

Les résultats donnés par les énergies des orbitales moléculaires frontières indiquent que les composés 4a pour la caféine et 4b pour la théophylline possèdent une affinité électronique très élevée alors que les composés 2a et 2b s'ionisent plus facilement avec des énergies d'ionisation faibles.

La distribution des charges de Mulliken nous a permis de déterminer les atomes les plus chargés négativement et ceux qui sont plus chargés positivement qui représentent respectivement les sites d'attaque électrophile et nucléophile.

Les composés utilisés constituent une base de données qui peut être utilisée dans l'étude de la tautométrie. Cette base sera également utile dans l'étude des relations structure-activité ultérieures.