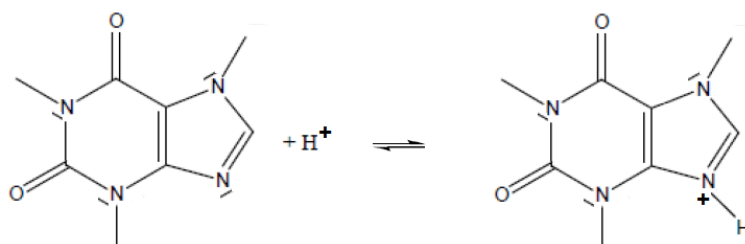
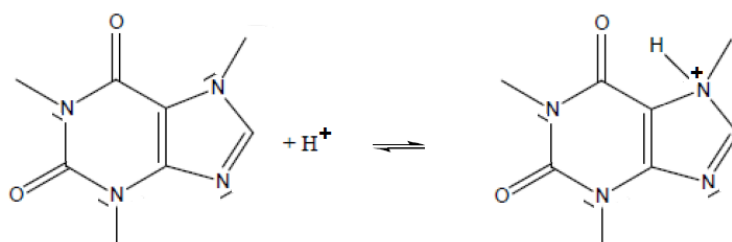


Protonation de la caféine

La caféine possède des atomes d'azote susceptibles de capter un proton grâce à leur doublet non liant, par exemple :



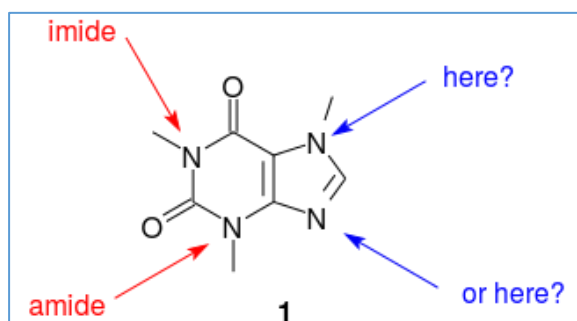
Ou bien



Bien sûr on peut aussi envisager la protonation des atomes d'oxygène.

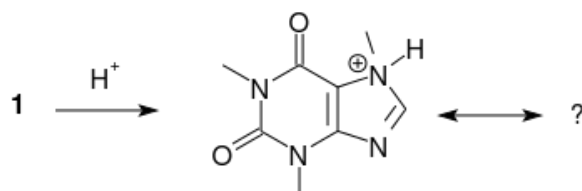
La solubilité dans l'eau des formes protonées ioniques est évidemment plus importante que celle de la forme moléculaire.

<https://chemistry.stackexchange.com/questions/28362/how-does-one-determine-the-relative-basicity-of-a-nitrogen-in-a-molecule>



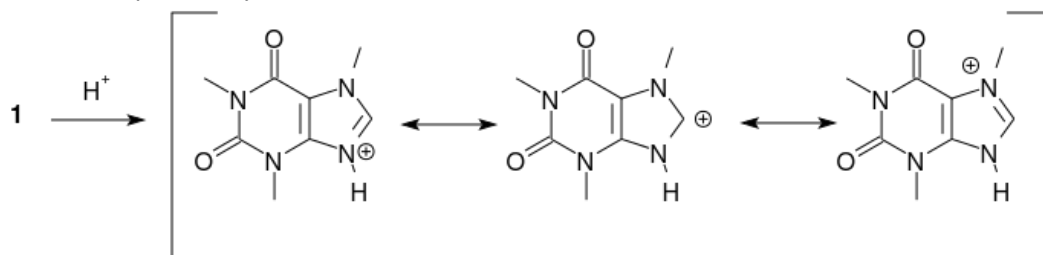
In the case of caffeine (**1**) the amide and the imide are rather unlikely centres for protonation! [...]. From an initial number of four possible centres in **1**, only two remain.

Now, let's see whether the positive charge resulting from protonation can be stabilized.



This looks fair, but creates a quaternary ammonium ion for which **no obvious charge distribution** seems to be available.

Let's examine the last possibility:



Would you agree that this looks much more promising?

Traduction

Dans le cas de la caféine (1), l'amide et l'imide sont des centres de protonation plutôt improbables ! [...] Sur un nombre initial de quatre centres possibles dans 1, il n'en reste que deux.

Voyons maintenant si la charge positive résultant de la protonation peut être stabilisée.

Cela semble juste, mais crée un ion ammonium quaternaire pour lequel aucune distribution de charge évidente ne semble être disponible. Examinons la dernière possibilité:

Seriez-vous d'accord pour dire que cela semble beaucoup plus prometteur?