

Encyclopédie: Question sur...

La caféine et ses cousins

Fiche QUESTIONS SUR... n° 08.01.Q15

mars 2023

Mots clés : caféine - théine - guaranine - matéine - théophylline - théobromine - stimulants - café - thé - chocolat - maté - guarana - chimie

Caféine, théine, théobromine, guaranine, théanine, théophylline... On s'y perd!

Observons les consommations de boissons : dans le monde, le thé est la deuxième boisson la plus consommée après l'eau ; en France, c'est le café qui vient après l'eau ; en Chine, l'eau est suivie par le thé et le café ; en Inde, le thé reste la boisson nationale, même si le café augmente ; aux États-Unis, c'est l'eau en bouteille qui est la première consommation (25 %), avant les boissons gazeuses (22 %), mais vient ensuite le café (13 %). Le thé et le café sont donc largement consommés dans le monde.

Pourquoi ? Le goût de ces boissons est évidemment important, mais elles contiennent de surcroît des composés stimulants.

Les hésitations de la chimie des alcaloïdes

Quels sont vraiment les composés stimulants présents dans les cafés, thés, chocolats, guaranas ou matés ? Il y a souvent de la confusion, notamment parce que l'histoire de la chimie n'a pas été une voie facile, et qu'il y eut des hésitations à propos des dénominations, avant que l'*Union internationale de chimie pure et appliquée* (UICPA en français, et IUPAC en anglais) ne fasse son salutaire travail terminologique.

La caféine

La caféine, pour commencer, fut initialement isolée en 1819, et nommée *Kaffein* par le chimiste allemand Friedlieb Ferdinand Runge (1794-1867), à qui l'écrivain Johann Wolfgang von Goethe avait confié des grains de café (*Coffea*). Chimiste précoce puisqu'il avait alors 25 ans, Runge parvint à isoler des cristaux blancs à partir de la matière première que Goethe lui avait donnée ; lors de ce travail, il procéda classiquement, avec des dissolutions, des évaporations et des cristallisations qui établirent finalement la pureté des corps séparés : en effet, les cristaux sont faits de molécules régulièrement empilées, et de tels empilement ne se forment que si les molécules sont toutes identiques, excluant les molécules d'autres composés qui auraient été présentes dans l'extrait que l'on cristallise.

Le travail de Runge étant passé inaperçu, la caféine fut "redécouverte" en 1820 par le pharmacien français Pierre-Jean Robiquet, qui présenta son travail à l'Académie de pharmacie en 1821, sans le publier ; puis elle fut à nouveau redécouverte par Joseph-Bienaimé Caventou et Pierre-Joseph Pelletier, en 1821. La théine

En 1827, Alphonse Oudry utilisa le même type de méthodes pour isoler la théine à partir de feuilles de thé. <u>La guaranine</u>

Puis, en 1840, le composé actif de la guarana fut isolé par Marcelin Berthelot et Claude Dechastelus, qui le nommèrent guaranine. Le 8 mai 1840, M. Gravelle – qui leur avait fourni la matière première – lut, devant la Société Médicale d'Émulation de Paris, de l'École de Médecine, une *Notice sur une nouvelle substance médicinale appelée Paullinia*, la présentant comme "un excellent remède tonique et calmant à la fois", propriétés qu'il attribua à la présence de "tanin et d'une substance cristallisable jouissant des propriétés chimiques de la caféine".

Dans tous les cas, qu'il s'agisse de caféine, de théine ou de guaranine, on avait trouvé des cristaux blancs, de saveur amère, et les chimistes allemands montrèrent ensuite qu'il s'agissait toujours de la caféine ; la structure de sa molécule fut établie par le génial chimiste allemand Emil Fischer (1852-1919), qui en réalisa la synthèse en 1895.

Aujourd'hui, tout est clair : la théine n'est autre que la caféine, tout comme la guaranine, et le nom chimique international, selon l'IUPAC est "3,7-dihydro-1,3,7-trimethyl-1H-purine-2,6-dione" ; le nom caféine reste toutefois admis, pour plus de concision.

La caféine est un *alcaloïde*, c'est-à-dire un composé (extrait de plantes) dont la molécule est organique, avec des atomes de carbone, hydrogène, oxygène, et azote ; ces atomes sont arrangés en *hétérocycles*, avec des atomes de carbone enchaînés en cycles (cinq ou six atomes) et possiblement des atomes d'azote ou d'oxygène. La *figure 1* montre la molécule de caféine.

Figure 1: sur cette représentation de la molécule de caféine, les sommets sont occupés par des atomes de carbone (C), sauf quand une lettre N est indiquée, ce qui correspond à un atome d'azote.

Les lettres O et H désignent respectivement des atomes d'oxygène et d'hydrogène. Pour plus de clarté, certains atomes d'hydrogène sont omis, mais les atomes de carbone ont toujours quatre liaisons et les atomes d'azote en ont trois (schéma Hervé This)

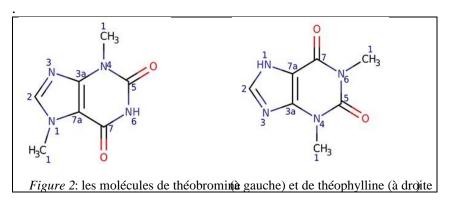
La caféine est présente dans le café, et aussi dans le chocolat, le thé, la noix de kola, la guarana ou le maté. Soluble dans l'eau, elle se retrouve dans les boissons que l'on prépare à partir de ces plantes.

Boisson	Teneur en caféine (mg par litre)	Quantité pour consommation commune en
		(milligrammes)
Café filtre	700-1100	~ 175-275
Café infusé	570	~ 142
Café percolateur	500-600	~ 125-150
Café soluble	350-450	~ 88-112
Café expresso	1400-1800	~ 140-180
Café décaféiné	13	~ 3
Thé noir	180-280	~ 45-70
Thé vert	110-180	~ 22-36
Cappuccino	110	~ 22
Chocolat noir	60-80	~ 15-20
Red Bull	320	~ 80 (pour un verre de 25 cl)
Coca-Cola	102	~ 25 (pour un verre de 25 cl)
Coca-Cola Light	137	~ 34 (pour un verre de 25 cl
Pepsi	112	~ 28 (pour un verre de 25 cl)
Pepsi Light	108	~ 26 (pour un verre de 25 cl)

D'autres composés stimulants

Si la caféine se confond avec la théine ou la guaranine, voire la matéine (noms qui doivent être oubliés), elle diffère toutefois de deux autres stimulants de la même famille des méthylxanthines : la théobromine

(3,7diméthylxanthine) et la théophylline (1,3-diméthylxanthine). La caféine est présente dans le café, le thé, le maté et le chocolat, mais la théobromine n'est que dans le maté et le chocolat, tandis que la théophylline est présente dans le café et le chocolat.



En dépit de son nom, la théobromine ne contient pas d'atomes de l'élément chimique nommé brome : son nom est dérivé de Theobroma, nom générique du cacaoyer, composé des racines grecques Theo (dieu) et *broma* (nourriture), signifiant donc *nourriture des dieux*. On en trouve environ 5 à 10 milligrammes par gramme de chocolat.

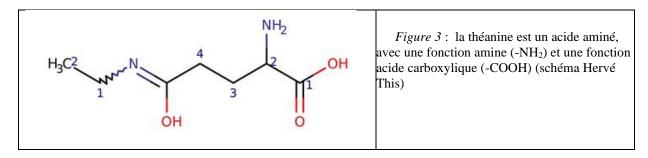
Actions de ces composés

Caféine, théobromine ou théophylline, comme beaucoup d'alcaloïdes produits par les plantes, seraient à la fois des pesticides naturels, détruisant les insectes s'attaquant aux plantes et des inhibiteurs de la germination des graines autres que celles produites par la plante, lui offrant ainsi une meilleure chance de survie. Ces composés sont des psychostimulants aux actions semblables, avec des variations. La caféine, par exemple, entraîne une accélération du rythme cardiaque et une vasodilatation, des performances sportives, ainsi qu'une capacité de travail mental accrues¹. Elle est à l'origine d'accoutumance, quand les doses sont de 3 fois 400 milligrammes (soit un litre et demi de café filtre par jour) par jour pendant 7 jours. La dépendance ne semble pas d'ordre psychologique, mais liée à l'excès de récepteurs à l'adénosine et au manque de récepteurs à la dopamine.

L'intoxication à la caféine exige plus de 600 mg de caféine par jour pendant une durée prolongée. La caféine n'est cependant pas véritablement un poison comme le sont beaucoup d'alcaloïdes végétaux, mais elle peut malgré tout être mortelle à des doses correspondant à 60 à 100 tasses prises en un temps limité (dose létale DL50 : 150 à 200 milligrammes par kilogramme de masse corporelle) ; elle passe dans le lait maternel, et surtout traverse la barrière placentaire, aussi le fœtus a-t-il une caféinémie identique à celle de sa mère.

La théanine : rien à voir !

Bien que le nom théanine ressemble à celui – périmé – de théine, il désigne un composé qui n'est pas un alcaloïde, mais un acide aminé : l'acide 2-amino-4-(éthylcarbamoyl)butyrique, communément présent dans le thé. Ce n'est pas un des 20 acides aminés qui entrent dans la constitution des protéines, et son activité sur le cerveau permet une réduction du stress mental et physique, et produit un effet relaxant. La *figure 3* montre bien que la molécule de théanine ressemble bien peu à celle de la caféine :



¹ Palatini et al., 2009; McLellan et al., 2016

Attention aux confusions terminologiques

Terminons en signalant que nombre de sites internet – notamment des sites commerciaux – utilisent des confusions terminologiques qui révèlent leur ignorance réelle de la chimie, et affichent des données erronées sur les teneurs en divers composés ; leur affreux mélange des catégories chimiques révèle une ignorance qui devrait alerter les visiteurs : n'a-t-on pas vu des confusions entre les xanthines et les composés phénoliques ? Ou des différences entre théine et caféine ? Sans compter les effets bénéfiques que les *marchands d'orviétan*² invoquent sans retenue.

À ces élucubrations mensongères, on préférera toujours le site de *l'Agence nationale de sécurité des aliments* (Anses), dont l'adresse internet est indiquée ci-dessous.

Hervé THIS, membre de l'Académie d'Agriculture de France

Ce qu'il faut retenir :

Les noms de théine, de guaranine ou de matéine sont périmés, puisqu'ils désignent le même composé que la caféine : un alcaloïde de la famille des méthylxanthines, tout comme la théobromine ou la théophylline. Ne conservons que le nom de caféine, pour éviter les confusions. En revanche, la théanine est un acide aminé.

Pour en savoir plus:

- ANSES. 2020: Caféine, https://www.anses.fr/fr/search/site/caf%C3%A9ine?iso1=fr&iso2=en
- B. BEAUFORT : La mercatique transatlantique d'un végétal psychoactif : le guaraná entre remède et aliment (1840-1921), Confins, 2018, https://doi.org/10.4000///confins.13215
- M. DECHASTELUS: Guarana de Dechastelus, Pharmacien-Inventeur, 56, rue d'Anjou-Saint-Honoré, contre Les Diarrhées, les Dyssenteries aiguës ou chroniques, l'Hémoptysie, les Catarrhes chroniques de Vessie et de Poitrine, la Lencorrhée, certaines migraines et Névralgies, in Recueil de notices sur ses préparations du guarana, Paris, 1860.
 - GRAVELLE MNA : Notice sur une nouvelle substance médicinale appelée Paullinia, Giraudet et Jouaust, 1840
- IUPAC 2019: *Compendium of Chemical Terminology*, 2nd ed. (the "Gold Book"), compiled by AD McNaught and A Wilkinson. Blackwell Scientific Publications, 1997, https://doi.org/10.1351/goldbook.
- T-M. MC LELLAN, J-A. CALDWELL, H-R. LIEBERMAN: A review of caffeine's effects on cognitive, physical and occupational performance, Neuroscience & Biobehavioral Reviews, 71 (12), 2016
- P; PALATINI, G. CEOLOTTO, F. RAGAZZO, F. DORIGATT, F. SALADINI, I. PAPPARELLA, M. LUCIOB, G. ZANATA, M. SANTONASTASO: *CYP1A2 genotype modifies the association between coffee intake and the risk of hypertension*, Journal of Hypertension, 27(8), 2009
- J-D. PAULA LIMA, A. FARAH: *Methylxanthines in stimulant foods and beverages commonly consumed in Brazil*, Journal of Food Composition and Analysis, 78, 2019
 - · A. RICHARD: Elémens d'histoire naturelle médicale, volume 1, Béchet, 1839
- SMJ TARKA & WJ. HURST: Introduction to the chemistry, isolation and biosynthesis of methylxanthines, in Spiller GA (eds) Caffeine, CRC Press, 1998
 - J. WISNIAK; *Pierre-Jean Robiquet*, Educ. quím., 24 (sp. issue 1), 2013
 - Ad. WURTZ: Dictionnaire de chimie pure et appliquée, Hachette, 1870
- KG. ZULAK, DK. LISCOME, H. ASHIHARA, PJ. FACCHINI: in *Plant Secondary Metabolites: Occurrence, Structure and Role in the Human Diet* (A. Crozier, MN. Clifford et H. Ashihara eds), Blackwells, Oxford, 2006

² L'orviétan était un faux antidote à la mode aux XVII^e et XVIII^e siècles. Il aurait été conçu par Jérôme Ferrante, natif d'Orvieto, d'où le nom.