

カフェインは抽出できるか

研究者：桑原 彩夏 小林 理穂

下浦 千枝 松尾 海

指導教諭： 久保田 宏 先生

1. なぜこの研究をするに至ったか

我々は、今年受験生である。受験生である私たちは、これから夜中に勉強することも当然あるだろう。そんなとき登場するのは何であろうか、そうだ、コーヒーである。眠気覚ましにコーヒーを飲んで目が覚めたはいいが夜眠れなくなってしまった…という経験は、恐らく誰にでもあるであろう。これはコーヒーをはじめとして緑茶や紅茶といったものに入っている、“カフェイン”という物質の働きによるものである。そんな私たちの身近で役立っている物質であるカフェインを、どうせなら自分たちで抽出することはできないか、できるなら抽出して詳しく調べてみようと思い立ち、今回の研究をするに至ったのである。

2. カフェインとは何か

- ・ カフェイン (caffeine) は、1819 年にドイツのフリードリヒ・ユングによってコーヒーから単離された。コーヒー類に含まれることからこの名がある。IUPAC(*1)名は 1,3,7-トリメチルキサンチン。

*1・・・*International Union of Pure and Applied Chemistry*

(国際純正・応用化学連合) の略。

1919 年に設立された、科学者の国際学術機関である。各国の科学学会がそのメンバーとなり、元素名や化合物名について国際基準 (IUPAC 命名法) を制定している組織である。

物理及び生物物理化学、無機化学、有機及び生物分子化学、巨大分子、分析化学、化学及び環境、化学及び健康、化学命名法及び化学構造表現の 8 つの部会があり、理事会と評議会によって運営されている。

- ・ アルカロイド (*2) の中の、プリン環を持つプリンアルカロイドの一種。分子の基本骨格は 炭素分子 と 窒素分子 である。6 員環 (6 角形) とそれに隣り合う 5 員環 (5 角形) で構成される。この基本骨格がプリン環と呼ばれ、この骨格を持つアルカロイドのことをプリンアルカロイドと呼ぶ。

*2・・・窒素原子を含み、塩基性を示す有機化合物の総称。

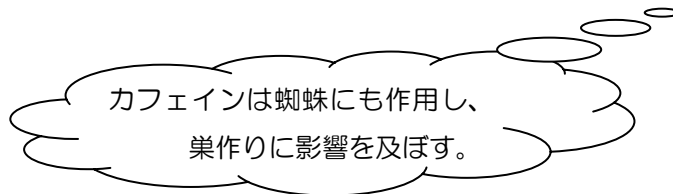
カフェインの場合、プリン環に 2 つの酸素原子 (O) と 3 つのメチル基 ($-\text{CH}_3$) が付いている。

このうち 2 つの酸素原子だけがプリン環に結合した物質をキサンチンと呼び、それにいくつかのメチル基が付いた化合物を総称してメチ



ルキサンチン類と呼ぶ。カフェインはこのメチルキサンチン類の代表的な化合物である。

- ・ カフェインはコーヒー、コーラ、緑茶、紅茶、ウーロン茶、ココア、チョコレート、健康ドリンクなどに含まれる。結晶は一水和物 ($\text{C}_8\text{H}_{10}\text{N}_4\text{O}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$) または無水物 (無水カフェイン, $\text{C}_8\text{H}_{10}\text{N}_4\text{O}_2$) として得られる。白色の粉末、もしくは針状結晶 (水和物の場合) または六角柱状結晶 (無水の場合) で、匂いはなく、味は苦い。昇華性がある。
- ・ 主な作用としては、**覚醒作用、脳細動脈収縮作用、利尿作用**がある。医薬品としても使用され、ねむけ、倦怠感、頭痛等に効果があるが、不眠、めまいなどの副作用があらわれることもある。若干の依存性を持つが、わずかなものであり、健康への影響は無視できる程度のものである。
- ・ ただし、中毒性もあり、毎日コーヒーを12～13杯飲んでいた人がカフェイン中毒で病院に運ばれた例もある。成人男性の場合、10～12 g 以上の摂取が危険とされている。しかし、適量をとることで、脂肪燃焼を助けたり、消化作用促進や運動機能を高めたりといった働きが期待できる。



『ウィキペディア』より

3. 研究の概要

まず、カフェインを直接加熱して昇華し結晶を回収する方法で実験を行ったところ、その方法ではカフェインを回収するのは困難だとわかった。

そのため今回は、クロロホルムに抽出し回収する方法に変え、結晶の回収を試みた。Web記載の情報では結晶を回収して観察するところで終わっているが、今回私たちは、その実験で回収できた結晶の量を測り、飲み物 (コーヒー・紅茶・緑茶・抹茶・麦茶) によってどのくらいの量のカフェインが回収できるかを調査した。

4. 実験方法

〈予備実験〉

まず、昇華法によってカフェインを抽出するために以下の方法で実験を行った。

・ 準備

ホットプレート、アルミ箔、時計皿、薬さじ、電子てんびん、駒込ピペット、ガスバーナー、三脚、るつぼばさみ、3%過酸化水素水、2 mol 塩酸、2 mol アンモニア水、抹茶

・ 方法

- 1) 電子てんびんで、抹茶を 1.0g はかり取る。
- 2) 1)をアルミ箔に移す。
- 3) 時計皿の重さをはかる。
- 4) 2)に時計皿をかぶせて、ホットプレートで加熱する。(185℃ 10~15 分)
- 5) 放冷する。
- 6) 時計皿の重さをはかる。
- 7) 6)に、3%過酸化水素水 5 滴、2 mol 塩酸 2 滴を加え、弱火で加熱し、蒸発させ、色の変化を観察する。
- 8) 放冷する。
- 9) アンモニア水 2 滴を加え、色の変化を観察する。



・ 結果

ホットプレートで加熱する際、あまりにも焦げてしまい色の変化を見るのが非常に困難だったため、実験方法を変えることにした。

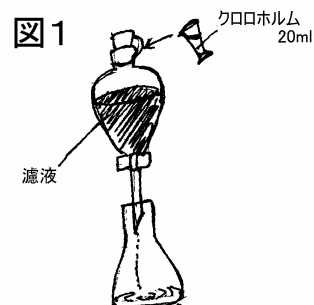
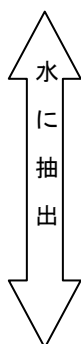
〈本実験〉

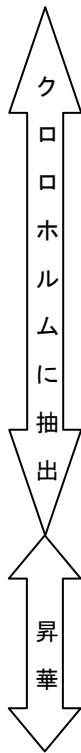
・ 準備

500ml ビーカー、ガスバーナー、ガラス棒、電子てんびん、ガーゼ、三角フラスコ、漏斗、濾紙、500ml 分液漏斗、枝つきフラスコ、リービッヒ冷却器、蒸発皿、時計皿、手袋、マスク、薬さじ、炭酸ナトリウム、硫酸ナトリウム、クロロホルム

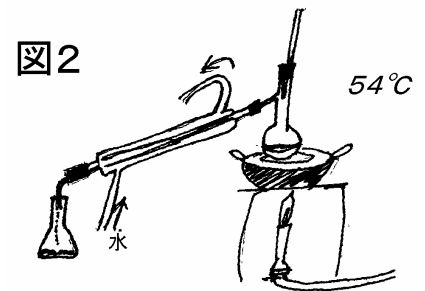
・ 方法

- 1) 500ml ビーカーに湯 300g と炭酸ナトリウム 3g を入れ(*3)、加熱する。
- 2) 試料 30g はかり取る。
- 3) 沸騰直前で火を止め、試料を入れ、静かに攪拌し、10 分放置。(時々静かに攪拌する。)
- 4) ガーゼで濾過する。手袋をして完全に絞り取る。(着色防止)
- 5) 水で冷やす。





- 6) 濾液を 500ml 分液漏斗に入れる。
- 7) クロロホルムを 20ml ずつ加える。←マスク着用
- 8) エマルジョン化(*4)を防ぐため、静かに上下に 10~20 回動かす。
- 9) クロロホルム層を三角フラスコに分取する。(図 1)
- 10) 7)~9)を 4 回繰り返す。
- 11) クロロホルム抽出液に硫酸ナトリウムを大さじ 1 加え(*5), 20 分間放置。
- 12) クロロホルム抽出液を、ひだ折り濾紙で濾過する。
- 13) 濾液からクロロホルムを回収する。(図 2)
- 14) フラスコ内に残った液体を蒸発皿に移し、ドラフト中で残ったクロロホルムを完全に蒸発させる。
- 15) 蒸発皿に濾紙と時計皿を乗せ弱火で加熱する。〈昇華〉
- 16) 濾紙・時計皿に付いたカフェインの結晶を回収する。



- *3 ……エマルジョン (*4) 防止のため。
- *4 ……液体状の微粒子が、これと混合しない他の液体中に分散して乳状をなすもの。
- *5 ……乾燥剤として使用。

なぜクロロホルムでカフェインが抽出できるのか

カフェインは水とクロロホルムによく溶ける性質をもつ。そして、クロロホルムは低沸点 (61~62℃) であり、カフェインより先に気化するため、分離することが簡単である。また、化学反応を起こさないため、分離したときにカフェインの性質を変えない。これらのため、抽出が可能である。

まとめると、次のようになる。

- ① カフェインを水で抽出する (親水性)
- ② 水中のカフェインをクロロホルムに溶かす (脂溶性)
- ③ クロロホルムを蒸発させる (沸点の違い)
- ④ カフェインだけを昇華させて、純粋な結晶を得る

この実験方法のメリット&デメリット

[メリット]

- ・ 直接昇華するよりも、カフェインが多く抽出できる。

[デメリット]

- ・ 時間がかかる。
- ・ 実験の最中にカフェインが空気中に逃げてしまう。
- ・ 8)の作業は慣れが必要であり、その時その時の実験で状況が違ってしまい、その多少の違いによって、結果が変わり易い。

5. 実験結果

A カフェインの抽出

① 純カフェインの抽出

この実験で、溶かしたカフェインの何パーセントが抽出できるのかを知るために、まず上記の方法で純カフェインの抽出を行った。

図 1

溶解した純カフェイン	※1 回目 (100ml)	2回目 (100ml)	合計	抽出できた割合
1.000g	0.219g	0.083g	0.302g	30.20%

- ・ 溶解したカフェインの約 30%を抽出することが出来た。

※ 1 回目(100ml) とは、クロロホルム 20ml で抽出を 5 回繰り返して得られたクロロホルム抽出液約 100ml をまとめて昇華した結果である。

〈考察〉

- ・ 抽出できなかった残りのカフェインは、抽出の操作の際残りの液体に溶けていた、または加熱した際に 1 度気体に昇華したものの固体にならずに空気中に逃げていったと思われる。
- ・ この実験方法で得られるカフェインは「**水に抽出されたカフェインの約 30%**」だと思われる。

② 身近なものからのカフェイン抽出

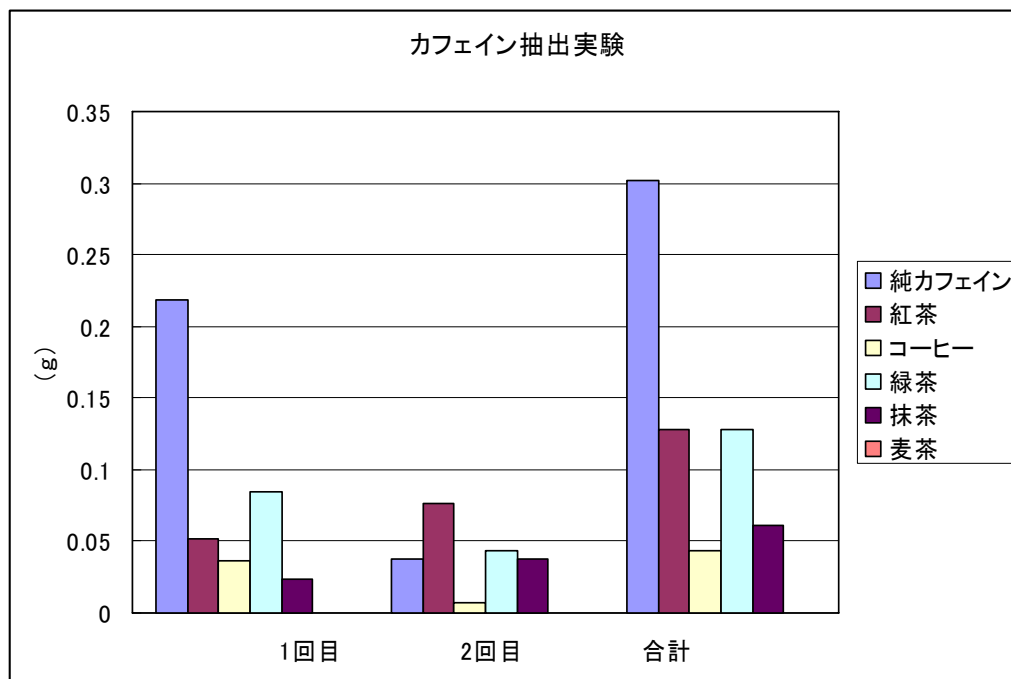
①の結果を踏まえて、身近にある紅茶・コーヒー・緑茶・抹茶・麦茶でそれぞれ抽出実験を行った。

図 2

	1 回目 (100ml)	2 回目 (100ml)	合計
紅茶	0.052g	※0.076g	0.128g
コーヒー	0.036g	0.007g	0.043g
緑茶	0.084g	0.044g	0.128g
抹茶	0.023g	0.038g	0.061g
麦茶	0.000g	0.000g	0.000g

※ 紅茶の 2 回目はクロロホルム抽出液約 80ml のデータである。

図 3



〈考察〉

- ・ コーヒーは6～10回で抽出できた量が大きく減った。また10回目以降は測定不可能であったので、最初の5回が抽出できる限度だと思われる。
- ・ 紅茶と抹茶を見ると、1回目の抽出よりも2回目の抽出のほうで多少量が増えていることから考えて、3回目（11～15回）の抽出も行ってみる価値はあると思われる。

③ 実験予想と結果

この実験で一般的にいわれているカフェインの含有量のどれくらいを抽出できたのかを確認するために、この結果と Web 記載のカフェインの含有量を参考にした予想とを比較した。

図 4

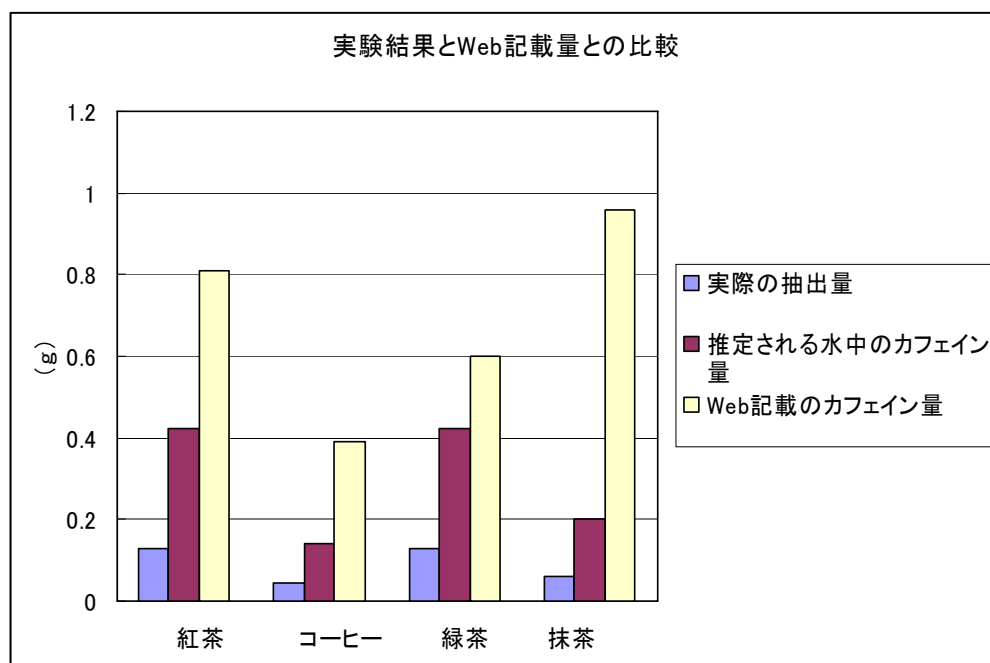


図 5

	実際の抽出量	※②実験結果から推定される水中に含まれるカフェイン量	※③Web 記載のカフェイン量	抽出できた割合
紅茶	※①0.128g	0.422g	0.81g	52.0%
コーヒー	0.043g	0.142g	0.39g	36.4%
緑茶	0.128g	0.422g	0.60g	73.3%
抹茶	0.061g	0.201g	0.96g	20.9%

※①紅茶の抽出量は 100ml、80ml に分けたときの合計 180ml のデータである。

※②実験結果から推定される水中に含まれるカフェインの量とは、純カフェインの実験で「この実験方法で抽出できるのは実際の含有量の 30%」が判明したことから実験データを 3.3 倍し、それを実験データから考えられるその物質の水中に含まれるカフェイン量としたものである。

※③Web 記載のカフェイン量は、試料 30g 中に含まれるカフェイン量である。

②が水中に抽出された量であるので、基準は違うが、③がそのまま水中に抽出されたとして比較している。

〈考察〉

- ・ 緑茶の割合が多いのは、他の実験に比べて各工程がうまく進んだことが関係していると思われる。
- ・ 反対に抹茶の割合が極端に少ないのは、抹茶の粒子が細かいためろ過が難しく、抽出の操作の際に「吸引濾過」という別の方法を用いたことが関係していると思われる。
- ・ Web 記載の抽出量と比較すると、今回の抽出量が全体的に少なかったことは、試料を溶かすお湯の量が少なかったことが関係していると思われる。

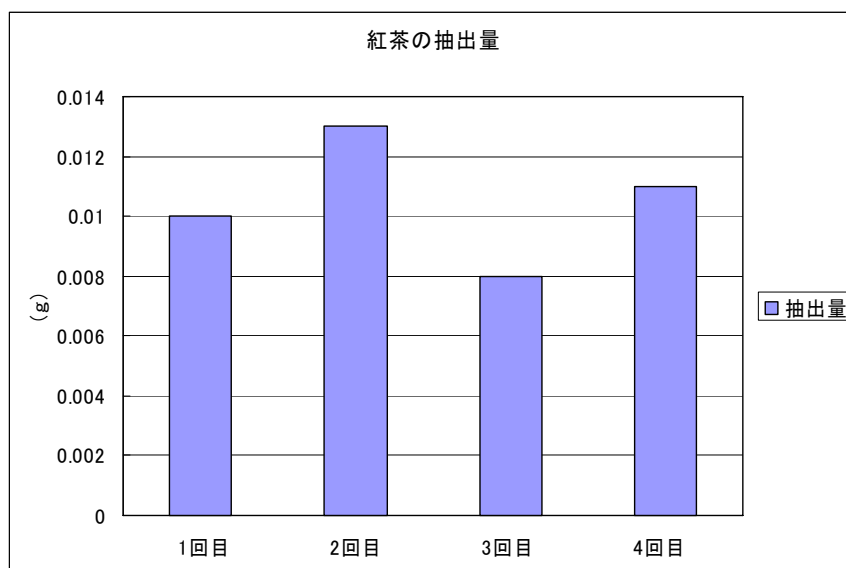
④ 紅茶のカフェイン抽出

1 回の分離の作業（20ml）で抽出できるカフェインの量の変化を知るために、クロロホルム抽出液を 1 回ごと（20ml ごと）に精製する方法で実験した。

図 6

1 回目	2 回目	3 回目	4 回目
0.010g	0.013g	0.008g	0.011g

図 7



- ・ 5 回目～10 回目はほぼ測定不可能な量だった。

〈考察〉

- ・ 1 回ごとに精製すると得られる結晶の量が少なく、正確なデータとはいえないと思われる。
- ・ 100ml、100ml と分けて精製する場合と比べて、得られた合計量が少ない。
- ・ 結晶の量が減少したのは昇華の操作で空气中に大量に逃げていったためだと思われる。

B カフェインの同定・純度検定

Aで抽出できたカフェインが本当のカフェインであるか確かめるため、ムレキシド反応（*6）という化学反応を使って検証し、同時に反応の色で得られた結晶の純度を検定した。

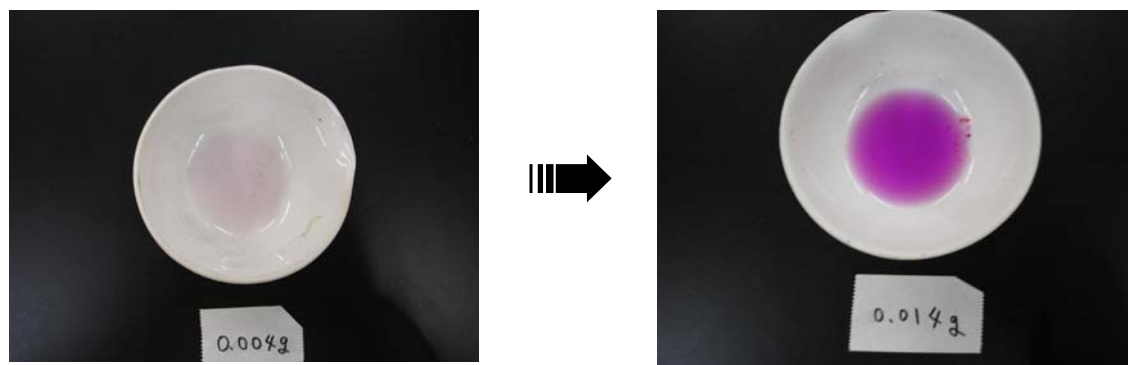
*** 6** …ムレキシド反応とは、カフェインが過酸化水素水によって酸化されてアロキサンという物質になり、このときに赤みを帯びた黄色になる。その後アンモニア水を加えると紫紅色になる反応のことである。これでカフェインであることを確かめることができる。

〈実験方法〉

- 1) 抽出実験で得られた結晶 0.014g をはかりとる
- 2) 1 に過酸化水素水 0.25ml と塩酸 0.1ml を加え弱火で加熱する。
- 3) 色が赤みを帯びた黄色になったところで火から下ろし放冷する
- 4) アンモニア水 2ml を加え、色の濃さから 0.014g 中の純カフェインの量を測定する。

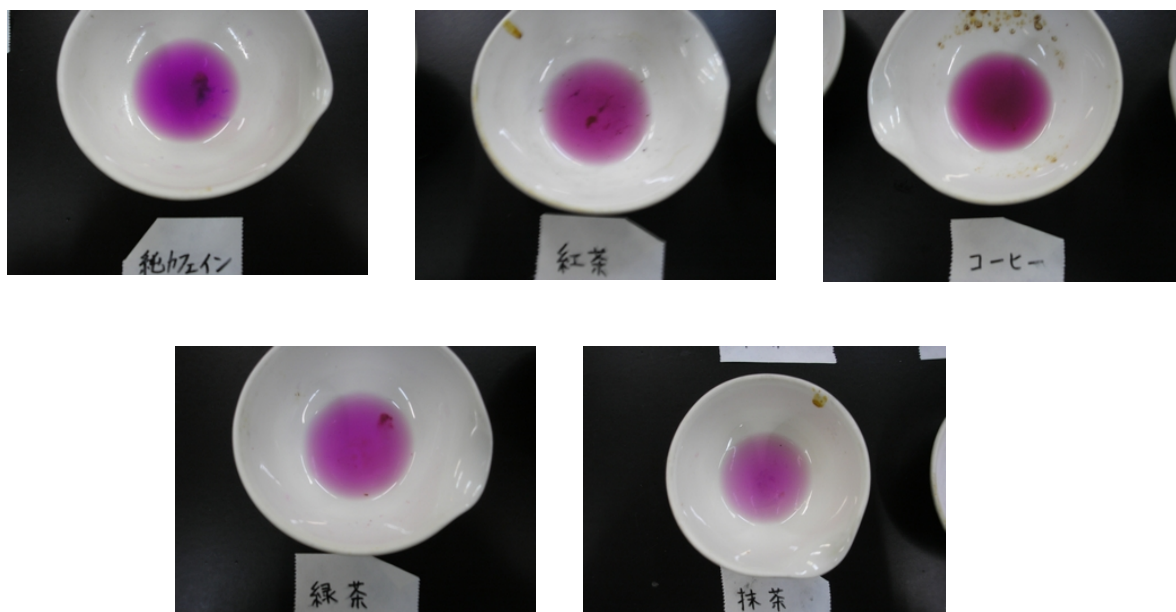
例 紅茶の 0.014g の色が純カフェインの 0.007g の色と一致した場合、紅茶から得られたカフェインの純度は 50%となる。

(結果より)



- ・ 同定については、すべての試料で色の変化がおき、今回の試料にはカフェインと構造が似ている他の物質でムレキシド反応を起こす物質は含まれていないので、この実験で抽出したものは本物のカフェインであると言える。
- ・ 純度検定については、純カフェインの色の変化が段階的にうまくいかず、試料の色の変化もカフェイン以外の物質の色が出てしまうものがあったので、純度を色の変化から測ることはできなかった。

〈試料の色の変化〉



〈考察〉

- ・ この方法はカフェインと試薬をすべて反応させる技術が必要とするし、結晶らしきものができてしまうと正確な純度が測れないことが欠点である。
- ・ 純度検定をする他の方法としては、高速液体クロマトグラフィーにより定量する方法がある。

6. 考察

今回の実験では、A-①の実験の結果（「実験の含有量の約 30%が抽出可能」と、Web 記載のデータ（「茶葉の約 30%に含まれる」）から考えて、緑茶で 0.3 g の抽出を目安としていた。しかし、実際に緑茶から抽出された結晶の量はその約 3 分の 1 であった。それは、実験の過程で、カフェインが空気中に逃げてしまっている可能性があるからだと考えられる。そのため、一回の実験ごとにできるだけたくさん抽出するための改善を重ねて行った。その結果、分離の際の振り方をゆっくりと丁寧に行うことでクロロホルムにカフェインをしっかりと溶かすことで、抽出できる量が増えることがわかった。

また、昇華させる際の火の強さ（できるだけ弱火）と時間（様子を見ながら完全に結晶化させること）によって、きれいな形の結晶を作ることにはできる。しかし、昇華の際は、かける時間が長いほど、空気中に放出される量も多くなってしまうため、今回の方法では結晶の質もしくは量のどちらかが犠牲になってしまうことがわかった。

7. 反省・感想

- ・ クロロホルムなどの危険物質を扱い、また時間もかかる実験だったため、大変だった。残念ながら、あまりいい結果は出なかったが、実験の過程などを理論的に考える機会が持てたので、有意義な実験だったと思う。（松尾）
- ・ 実験で使う試料の量のわりにカフェインがあまりに少なくて納得がいかなかったけど、結果から一回一回改善を見出して行うことができ、充実した実験だった。（下浦）
- ・ 身近にある飲み物から結晶が確認できるほど純粋なカフェインを取り出せたことが、とても嬉しかった。事前に思っていたほどのいい結果は出なかったけど、自分たちで話し合いながら実験を進めていけてよかったと思う。（小林）
- ・ 今回の実験は結構難しい実験で、慣れが必要だったこともあり、数回の実験では確かな結果を得ることは難しかった。また、カフェイン抽出の方法はこの実験以外にもいろいろと方法があるため、いろんな実験を比較したりして、きれいな結晶を取り出し、且つたくさんの量を集められる方法がわかればよかったと思う。（桑原）

8. 謝辞

遅い時間になっても化学室を開けておいてくれるなど、いろいろと協力をしてくださった黒田先生と森田先生、そして何より器具の準備から適切なアドバイスまで、常に私たちの研究を指導してくださった久保田先生、本当にありがとうございました。

9. 参考文献

福岡県薬剤師会 薬事情報センターhttp://www.fpa.or.jp/fpa/htm/infomation/QandA/qa01/qa01_43_t01.htm

ウィキペディア<http://ja.wikipedia.org/wiki/%E3%83%A1%E3%82%A4%E3%83%B3%E3%83%9A%E3%83%BC%E3%82%B8>

手軽なカフェイン抽出法<http://www.aichi-c.ed.jp/contents/rika/koutou/kagaku/ka2/cafein/cafein.htm>

澤和 16 東海北陸技術職員研修技術室 杉谷地区富山大学<http://www.sugitani.u-toyama.ac.jp/tech/kensyu/040825sawaya.html>