

DETERMINAÇÃO DO TEOR DE TEOBROMINA EM SEMENTES DE CACAU SELVAGEM DA ILHA DE ANGAPIJÓ (MOCAJUBA-PA)

Rodrigo J. WAZ¹; Angélica F. S. MAIA²; Willison E. O. CAMPOS³

RESUMO

A teobromina é um alcaloide presente no cacau com propriedades bioativas que podem se tornar de interesse para a indústria alimentícia e farmacêutica. Este trabalho teve como objetivo extrair e identificar teobromina a partir de amostras de cacau em pó (*nibs*) e semente de cacau, utilizando metodologia adaptada de Pavia (1973). O processo envolveu etapas de extração com metanol, água e clorofórmio, seguido de purificação com éter dietílico. A extração do *nibs* obteve-se aproximadamente 300 mg de teobromina bruta, valores compatíveis com descritos na literatura. Para confirmação da identidade e avaliação da pureza do composto, empregou-se a técnica de Ressonância Magnética Nuclear (RMN de ¹H e ¹³C).

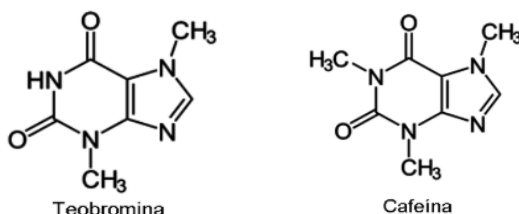
Palavras-chave:

Extração; cacau selvagem, teobromina, RMN

1. INTRODUÇÃO

O cacau (*Theobroma cacao*) é uma das sementes mais consumidas no mundo, especialmente como ingrediente de chocolates, bolos e bebidas. Dos vários compostos presentes no chocolate, as metilxantinas, principalmente a teobromina e a cafeína (**Figura 1**), são conhecidas pelos seus efeitos psicoativos e vasodilatadores (Smit and Blackburn, 2005).

Figura 1: Estruturas das metilxantinas teobromina e cafeína



A estrutura química da teobromina é semelhante à da cafeína (**Figura 1**), outro alcalóide comum, mas com diferenças significativas em termos de atividade biológica e metabólica. Enquanto a cafeína é conhecida por seu efeito estimulante no sistema nervoso central, a teobromina tem um impacto mais suave, proporcionando uma sensação de alerta e bem-estar sem os efeitos colaterais associados à cafeína, como tremores e insônia. Dessa forma, a determinação do seu teor de teobromina em amostras de sementes de cacau torna-se pertinente e relevante para a indústria de alimentos (Smit and Blackburn, 2005).

O cacau selvagem da Ilha de Angapijo, localizada no município de Mocajuba (PA), é cultivado de forma nativa por comunidades ribeirinhas em sistemas agroflorestais, valoriza a conservação da floresta e a economia local. Os frutos crescem sob a vegetação natural da várzea,

¹Bolsista PIBIC/CNPq, IFSULDEMINAS – Campus Inconfidentes. E-mail: rodrigo.waz@alunos.ifsuldeminas.edu.br.

²Orientador, IFSULDEMINAS – Campus Inconfidentes. E-mail: angelica.maia@ifsuldeminas.edu.br

³Co-orientador, IFSULDEMINAS – Campus Inconfidentes. E-mail: willison.campos@ifsuldeminas.edu.br

sendo colhidos manualmente e processados artesanalmente. Este cacau se destaca pelo perfil sensorial complexo, com notas frutadas e baixa acidez (Viana et al, 2024).

2. MATERIAIS E MÉTODOS

A extração da teobromina do *nibs* e das sementes do cacau selvagem foram realizadas segundo a metodologia adaptada de Pavia, 1973. Em um balão de fundo redondo de 250 mL com um agitador magnético foram adicionados 20 g da amostra e 6 g de óxido de magnésio. Em seguida, foram acrescentados 40 mL de água destilada e 20 mL de metanol. A mistura foi aquecida (a 90° C) em banho maria de glicerina, sob agitação frequente por aproximadamente 50 min, até a obtenção de uma massa semi-seca e quebradiça. Após esse processo, a massa semissólida foi mantida no balão de fundo redondo, no qual foram adicionados 150 mL de clorofórmio. A mistura obtida foi então submetida a aquecimento sob refluxo e agitação por 30 min. Ainda quente, a solução foi filtrada utilizando funil de Büchner com papel de filtro quantitativo. O resíduo sólido retido foi esfarelado e submetido a uma segunda extração com clorofórmio, e os dois filtrados resultantes foram combinados.

Em seguida, o solvente foi removido por meio de uma destilação simples. Quando o volume de clorofórmio restante foi reduzido a aproximadamente a 10 mL, adicionaram-se 60 mL de éter dietílico. A mistura foi tampada e deixada em repouso até o dia seguinte, o que permitiu a formação de um precipitado. Posteriormente, o precipitado foi coletado por filtração simples e lavado com cinco porções de 10 mL de éter dietílico. Ao final do processo, obteve-se na extração do *nibs* aproximadamente 0,3 g de teobromina e, na extração das sementes, 0,54 g de teobromina.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

A extração da teobromina do *nibs* do cacau selvagem ocorreu conforme o esperado, resultando em aproximadamente 300 mg de teobromina em 20 g de amostra. Esse valor é comparável ao obtido para o cacau comercial, que foi analisado e evidenciado no trabalho de Pavia (1973). No entanto, a extração da semente de cacau apresentou um rendimento de teobromina significativamente menor. Provavelmente essa diferença nos rendimentos está relacionada a superfície de contato do *nibs* e das sementes. A maior superfície de contato do *nibs* permite uma extração mais eficiente. Para verificar a pureza da amostra e caracterização, realizou-se análise de RMN de ^1H e ^{13}C possível observar na **Figura 2** (Página 3) e **Figura 3** (Página 3).

Figura 2: Espectro de RMN de ^1H da Teobromina (400 MHz, $\text{DMSO}-d_6$)

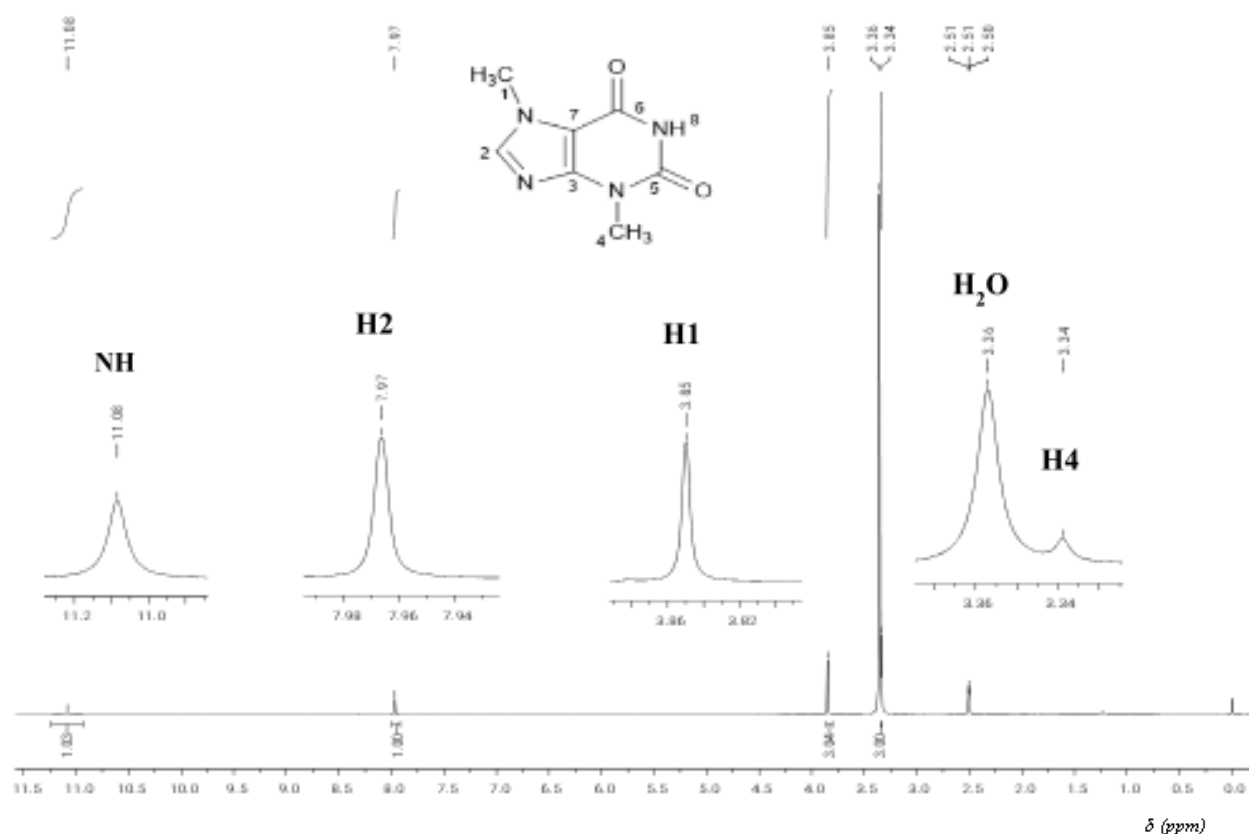
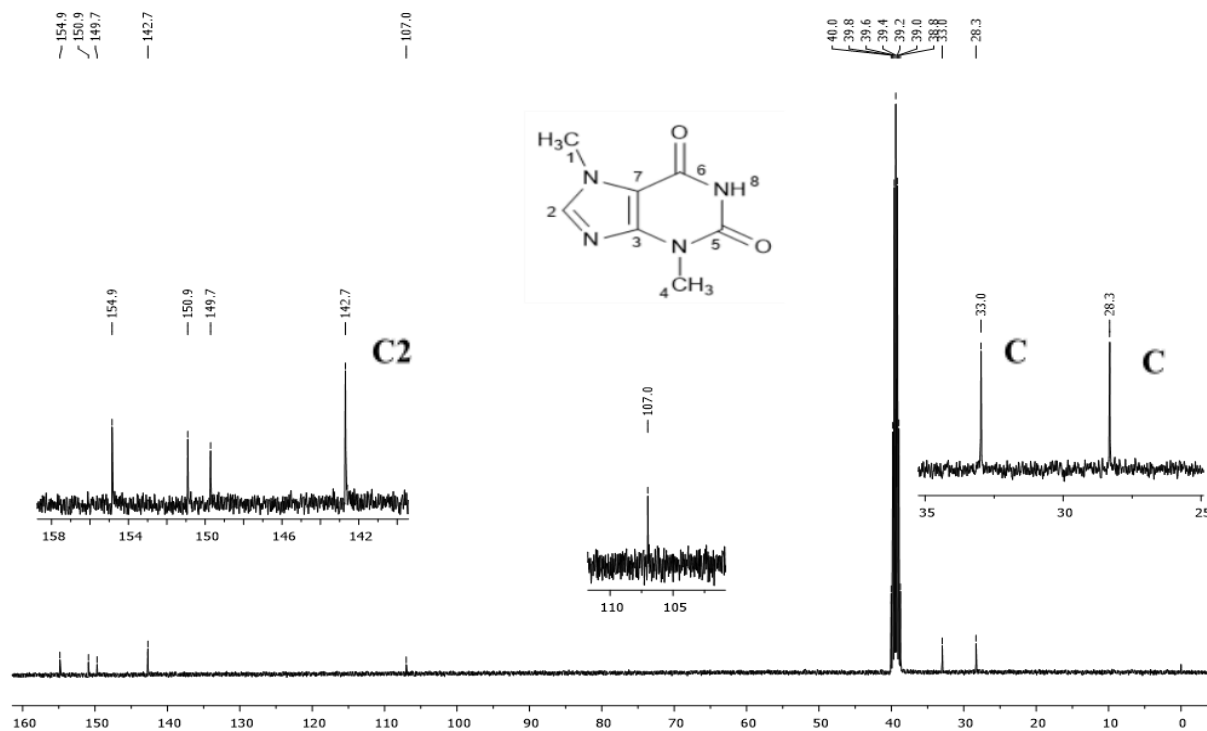


Figura 3: Espectro de RMN de ^{13}C da Teobromina (100 MHz, $\text{DMSO}-d_6$)



ASPECTO FÍSICO: sólido amarelo claro

RMN de ^1H (400 MHz, $\text{DMSO}-d_6$) d [multiplicidade, integração, constante de acoplamento (J/Hz), atribuição]: 3,34 (s, 3H, H4); 3,85 (s, 3H, H1); 7,97 (s, 1H, H2); 11,08 (sl, 1H, NH).

RMN de ^{13}C (100 MHz, DMSO- d_6): 28,3 (C4); 33,0 (C1); 107,0 (C7); 142,7 (C2); 149,7 (C3); 150,9 (C5); 154,9 (C6).

No RMN de ^1H da teobromina, os sinais em 3,34 e 3,85 ppm (H4 e H1) são simpletos de três hidrogênios; o pico em 3,36 ppm refere-se à água do solvente (DMSO- d_6), que sobrepõe parcialmente o H4. Um sinal largo em 11,08 ppm indica o hidrogênio ligado ao nitrogênio da amida, e o pico em 7,97 ppm refere-se ao H2 aromático. No espectro de ^{13}C , os sinais em 150,9 e 154,9 ppm correspondem às carbonilas (C5 e C6), os de 28,3 e 33,0 ppm aos metílicos (C4 e C1), 142,7 ppm ao C2 aromático, e 107,0 ppm ao C7 não hydrogenado.

4. CONCLUSÃO

Diante dos resultados obtidos, conclui-se que a metodologia empregada foi adequada para a extração da teobromina a partir do *nibs* de cacau selvagem, permitindo a obtenção do composto com rendimento satisfatório. A extração da semente moída apresentou rendimento significativamente menor em comparação a extração do *nibs*, provavelmente pela diferença na superfície de contato. Ficou evidenciado que o *nibs* de cacau selvagem possui, aproximadamente, a mesma concentração de teobromina que o cacau comercial. A análise por RMN (^1H e ^{13}C) possibilitou a caracterização da amostra extraída, contribuindo para a validação do procedimento adotado.

5. AGRADECIMENTOS

Agradeço à Prof.^a Dra. Angélica Faleiros da Silva Maia pela orientação, ao Prof. Dr. Willison Eduardo Oliveira Campos pelo apoio técnico, coorientação e fornecimento das amostras, ao IF Sul de Minas – Campus Inconfidentes pelo suporte acadêmico e estrutural, à UFMG e ao Prof. Dr. Yuri de Freitas Rego pela colaboração nas análises experimentais, e ao CNPq pelo apoio financeiro e incentivo à pesquisa.

6. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

HARTATI, Indah. **Hydrotropic extraction of theobromine from cocoa bean shell**. Momentum, Semarang, v. 6, n. 2, p. 17-20, out. 2010.

MORSCH, C. M. et al. **Characteristics of C NMR Spectroscopy**. LibreTexts Chemistry, 2021. Disponível em: [https://chem.libretexts.org/Bookshelves/Organic_Chemistry/Organic_Chemistry_\(Morsch_et_al.\)/13: Structure Determination Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy/13.10: Characteristics of C_NMR_Spectroscopy](https://chem.libretexts.org/Bookshelves/Organic_Chemistry/Organic_Chemistry_(Morsch_et_al.)/13:_Structure_Determination_Nuclear_Magnetic_Resonance_Spectroscopy/13.10:_Characteristics_of_C_NMR_Spectroscopy). Acesso em: 22 jul. 2025.

PAVIA, Donald I. **Coffee, tea, or cocoa: a trio of experiments including the isolation of theobromine from cocoa**. *Journal of Chemical Education*, Easton, v. 50, n. 11, p. 791-792, Nov.1973.

SMIT, H. J.; BLACKBURN, R. J. **Reinforcing effects of caffeine and theobromine as found in chocolate**. *Psychopharmacology*, [S.l.], v. 181, n. 1, p. 101–106, 2005. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/s00213-005-2220-7>. Acesso em: 23 jul. 2025.

VIANA, A. L. N. et al. **O cacau de várzea: saberes e práticas de ribeirinhos na produção de derivados do cacau**. *Agroecossistemas*, Belém: Universidade Federal do Pará, v. 16, n. 2, p. 150–165, 2024. Disponível em: <https://periodicos.ufpa.br/index.php/agroecossistemas/article/view/8955>. Acesso em: 29 jul. 2025.