Создание парфюмерной композиции на основе ацеталя циклогексанона

Курсовая работа

Соловей Арины
ученицы 10 «Л» класса СУНЦ МГУ

Научные руководители

Сигеев Александр Сергеевич
к.х.н. ИНЭОС РАН им. А.Н. Несмеянова

Юдов Матвей Викторович
химик и парфюмер в MYSL fragrances

Москва 2019

АЦЕТАЛИ

Ацетали – простые эфиры геминальных диолов, эквивалентами которых являются альдегиды и кетоны. Общая формула:

Диэтилацеталь циклогексанона

СИНТЕЗ

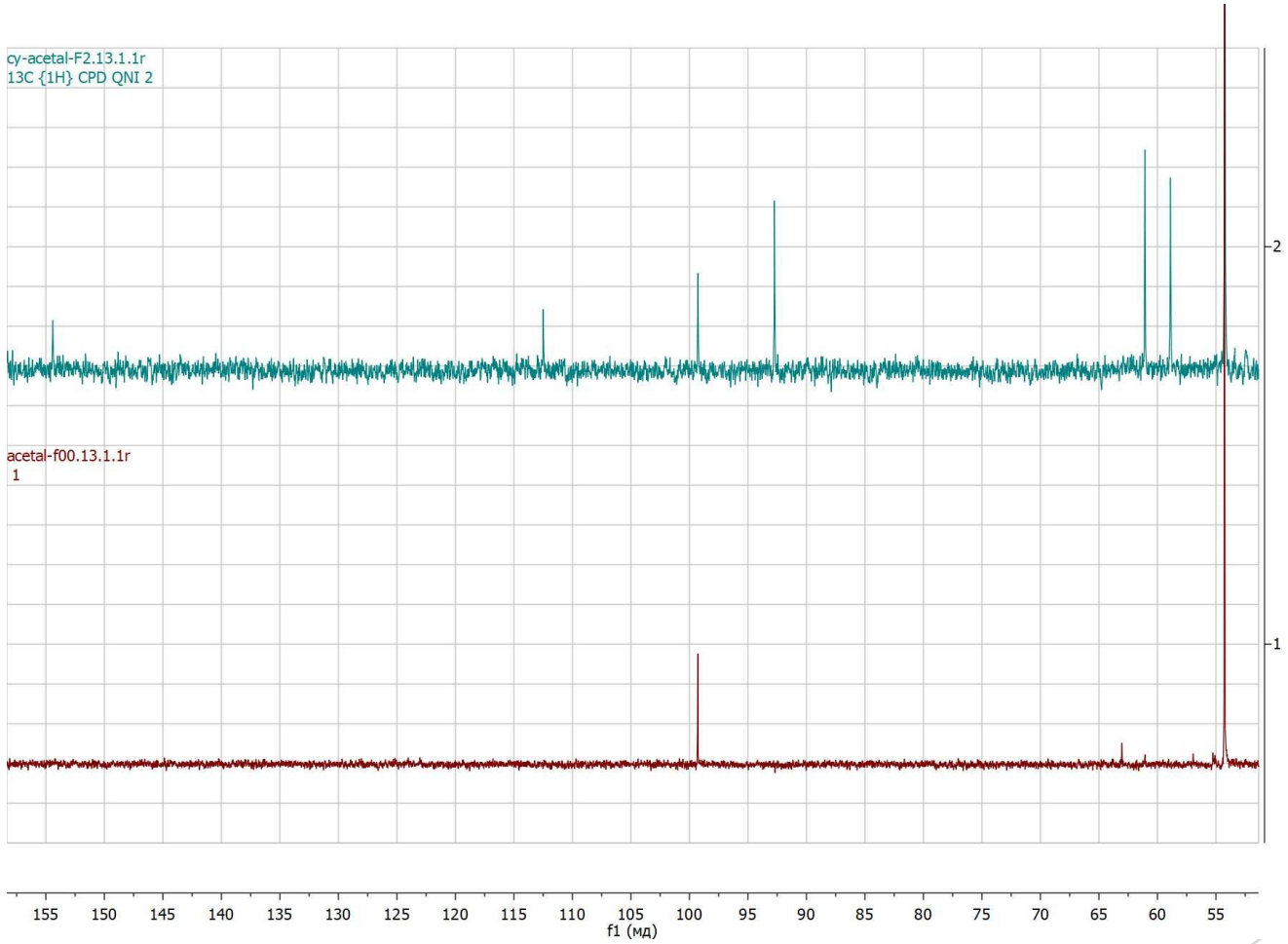
1. Ацетализация этанолом с трифторуксусной кислототой

2. Ацетализация триэтилортоформиатом с трифторуксусной кислотой

№	Ацетализирующий агент	t, °C	t, ч.	Конверсия, %	Выход, %
1	C_2H_5OH	20	72	0	0
2		78	10	20	0
3	2 экв $HC(OC_2H_5)_3$	20	24	100	100[1]
4	2 экв $HC(OC_2H_5)_3$	20	24	«84»	«63» [2]
5	1,2 экв $HC(OC_2H_5)_3$	20	24	100	99[2]

[1]До выделения [2]После выделения

ВЫДЕЛЕНИЕ АЦЕТАЛЯ



Метод составления парфюмерной композиции

Составление композиции по принципу летучести компонентов:

1. Первая фаза (верхний аккорд) – топ парфюма.
2. Вторая фаза (средний аккорд) – сердце композиции, связывает верхние и нижние ноты.
3. Третья фаза (базовый аккорд) – основа, используется для закрепления аромата.

Аккорд	Время проявления	Соотношение, %
Верхний	Первые 15 минут	25
Средний	Через 15 минут и до 8-10 часов	20
Базовый	До исчезновения	55

Состав парфюмерной композиции

Аккорды	%	Компоненты
Верхние ноты		
Цитрусовые	9,8	Эфирное масло апельсина, линалилацетат
Акватические	2,66	Гелиональ, флоралозон
Зеленые	2,41	Цис-3-гексенол, гарденол
Средние ноты		
Ромовые	**0,12**	**Диэтилацеталь циклогексанона**
Фруктовые	1,65	Султанен, этил 2-метил-3-пентаноат
Розовые	9,39	Дамасценон
Жасминовые	11,02	Гедион, бензилацетат
Ирисовые	3,3	Эфирное масло ириса, метилиононы
Нижние ноты		
Древесные	22,3	Эфирное масло пачули, iso E super
Сладкие	7	Этилмальтол, ванилин, кумарин
Мускусные	21,92	Амбреттолид, экзальтолид
Другие	8,43	В т. ч. растворители

ВЫВОДЫ

- В нашей работе был разработан метод синтеза диэтилацеталя циклогексанона в очень мягких условиях и синтезирован практически с количественным выходом, что существенно превышает все литературные методы.
- Мы показали, что диэтилацеталь может использоваться в основной ноте парфюмерной композиции, и создали собственную композицию с его использованием. Полученная композиция обладает сладким запахом с ярко выраженными фруктово-цветочными и древесными нотами.

СПАСИБО ЗА ВНИМАНИЕ!