



MARMARA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ



**KOZMETİKTE KULLANILACAK DOĞAL
UÇUCU YAĞLAR İÇEREN ESANSIN
GELİŞTİRİLMESİ VE
KARAKTERİZASYONU**

ARTYOM STRELNİKOV

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Kimya Anabilim Dalı

Analitik Kimya Programı

DANIŞMAN

Prof. Dr. Ece KÖK YETİMOĞLU



MARMARA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ



**KOZMETİKTE KULLANILACAK DOĞAL
UÇUCU YAĞLAR İÇEREN ESANSIN
GELİŞTİRİLMESİ VE
KARAKTERİZASYONU**

ARTYOM STRELNIKOV

520420992

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Kimya Anabilim Dalı

Analitik Kimya Programı

DANIŞMAN

Prof. Dr. Ece KÖK YETİMOĞLU

TEŞEKKÜR

Yüksek lisans eğitimim ve tez çalışmamız boyunca bana yol gösteren, güven veren destekleyici tutumuyla, bilgisi ve tecrübesiyle yardımlarını esirgemeyen, kıymetli hocam, tez danışmanım Prof. Dr. Ece KÖK YETİMOĞLU'na sonsuz teşekkür ederim.

Yüksek lisans sürecimde her türlü maddi ve manevi destek sunan, aynı zamanda bu meslekte bana tecrübe kazandıran Elso Kimya San. ve Tic A.Ş.'ne teşekkür ederim.

Hayatımın her anında olduğu gibi yüksek lisans sürecimde de bana her zaman güvenen, desteklerini veren sevgili eşime Beste GÖKHAN STRELNIKOV'a sevgilerimi ve teşekkürlerimi sunarım.

Eylül, 2023

Artyom STRELNIKOV

İÇİNDEKİLER

TEŞEKKÜR	i
ÖZET	iv
ABSTRACT.....	v
SEMBOLLER.....	vi
KISALTMALAR.....	vii
ŞEKİL	viii
TABLO LİSTESİ	ix
1. GİRİŞ VE AMAÇ	1
1.1. Doğal Uçucu Yağlar	2
1.2. Kozmetik Endüstrilerinde Uçucu Yağlara Olan Talep	3
1.3. Doğal Uçucu Yağ Kokularının Sınıflandırılması	6
1.4. Uçucu Yağların Aroma Profilleri ve Bireysel Bileşikleri.....	11
1.5. Uçucu Yağların Güvenliği	11
1.6. Esans Yapısı.....	14
1.7. Esans Kompozisyonları Oluşturma İlkeleri	17
1.8. Esans Kompozisyonlarının Analizi	19
1.8.1. Yoğunluk.....	21
1.8.2. Kırılma indisi.....	21
1.8.3. Viskozite.....	21
1.8.4. Parlama Noktası	22
1.8.5. GC-MS	22
1.9. Amaç	23
2. MATERYAL VE YÖNTEM	24
2.1. Materyal	24
2.1.1. Kullanılan hammaddeler	24
2.1.2. Kullanılan cihazlar	25
2.2. Yöntem.....	25
2.2.1. Parlama noktası	25
2.2.2. Kırılma indisi.....	26

2.2.3.	Yoğunluk.....	26
2.2.4.	Esans kompozisyonunun hazırlanması.....	26
2.2.5.	Esans kompozisyonunun karıştırılması.....	26
3.	BULGULAR VE TARTIŞMA	27
3.1.	Esans Kompozisyonu İçin Ana Motifin Belirlenmesi	27
3.2.	Tamamlayıcı Kokularının Belirlenmesi.....	28
3.3.	Kullanım Alanlarının Belirlenmesi.....	29
3.4.	Esans Omurgasının Oluşturulması.....	29
3.5.	Tamamlayıcı Kokuların Oluşturulması	35
3.6.	Taklitten korunma kontrolü	41
3.6.1.	Sentetik moleküller karışımının taklitten korunma kontrolü	41
3.6.2.	Doğal uçucu yağlar ve akorlar karışımının taklitten korunma kontrolü	44
3.6.3.	Cedar Herbace formülün taklitten korunma kontrolü	46
3.7.	Cedar Herbace Fiziksel Analizlerinin Ölçülmesi	46
4.	SONUÇ	47
	KAYNAKLAR.....	48
	ÖZGEÇMİŞ.....	60

ÖZET

KOZMETİKTE KULLANILACAK DOĞAL UÇUCU YAĞLAR İÇEREN ESANSIN GELİŞTİRİLMESİ VE KARAKTERİZASYONU

Esanslar günlük hayatımızın ayrılmaz bir parçasıdır. Kişisel tarzımızı geliştirmek ve hoş bir atmosfer yaratmak için çeşitli ürünlerde kullanılırlar. İyi seçilmiş bir koku anıları canlandırabilir, moralimizi yükseltebilir ve hatta kendimizi daha güvende hissetmemize yardımcı olabilir. Bu nedenlerden dolayı, esanslar kendini ifade etmenin önemli bir yönüdür ve deneyimlerimizi ve başkaları tarafından algılanma şeklimizi şekillendirmede büyük rol oynayabilir. Esans üretimi, çeşitli hammaddelerin harmanlanmasından oluşan karmaşık bir süreci içerir. Bu, doğal uçucu yağları, aromatik bileşiklerini ve diğer bileşenleri içerebilir. Doğal uçucu yağlar, köklerden, çiçeklerden ve diğer doğal kaynaklardan elde edildikleri ve bitkinin doğal aromasını ve tedavi edici özelliklerini içerdikleri için birçok kokunun temelidir. Aromatik bileşikleri, doğal bileşenlerin kokusunu taklit etmek için bir laboratuvar ortamında oluşturulan sentetik moleküllerdir. Son yıllarda koku üretiminde doğal esansiyel yağların kullanımına yönelik artan bir eğilim vardır. Doğal esansiyel yağlar, bitkinin doğal kokusunu ve tedavi edici özelliklerini içeren yüksek konsantre bitki özleridir. Sentetik bileşenlere göre daha sürdürülebilir ve çevre dostu bir alternatif olarak kabul edilirler ve ayrıca cilt üzerinde daha hassastırlar. Bu çalışma kapsamında esans kompozisyonunun tüm tasarım ve hazırlık aşamaları incelenerek yeni bir esans kompozisyonu hazırlanmıştır. Hazırlanan esans kompozisyonunun içeriği GC-MS analiz metotları ile incelenerek taklit edilme olasılığı kontrol edilmiştir. Tasarlanan esans kompozisyonunda *citrus bergamia melarosa*, *thuja orientalis*, *cedrus atlantica*, *cupressus funebris*, *syzygium aromaticum l.*, *cuminum cyminum l.*, *eucalyptus globulus*, *lavandula hydrida grosso* ve *mentha viridis* doğal uçucu yağlar kullanılıp, onların ürün üzerindeki etki tartışılmıştır. Aynı zamanda sentetik yollar ile elde edilen beta ionone, galaxolide, vertofix, iso e super ve triplal gibi moleküller esans tasarımında kullanılmıştır. Çalışma esnasında GC-MS ile refraktometre, dansimetre, parlama noktası ölçer gibi analitik cihazlarının esans tasarım ve kalite kontrol aşamalarındaki katkısı incelenmiştir.

ABSTRACT

DEVELOPMENT AND CHARACTERIZATION OF FRAGRANCE CONTAINING NATURAL ESSENTIAL OILS TO BE USED IN COSMETIC

Fragrances are an integral part of our daily life. They are used in various products to enhance our personal style and create a pleasant atmosphere. A well-chosen scent can bring back memories, lift our spirits, and even help us feel more secure. For these reasons, fragrances are an important aspect of self-expression and can play a large role in shaping our experiences and the way we are perceived by others. Fragrance production involves a complex process of blending various raw materials. This may include natural essential oils, aromatic compounds, and other ingredients. Natural essential oils are the basis of many fragrances, as they are derived from roots, flowers and other natural sources and contain the natural aroma and therapeutic properties of the plant. Aromatic compounds are synthetic molecules created in a laboratory to mimic the scent of natural ingredients. In recent years, there has been an increasing trend towards the use of natural essential oils in fragrance production. Natural essential oils are highly concentrated plant extracts containing the natural scent and therapeutic properties of the plant. They are considered a more sustainable and environmentally friendly alternative to synthetic ingredients and are also gentler on the skin. Within the scope of this study, a new fragrance composition was prepared by examining all the design and preparation stages of the essence composition. The content of the prepared fragrance composition was examined by GC-MS analysis methods and the possibility of imitation was checked. In the designed fragrance, *Citrus bergamia melarosa*, *Thuja orientalis*, *Cedrus atlantica*, *Cupressus funebris*, *Syzygium aromaticum* L., *Cuminum cyminum* L., *Eucalyptus globulus*, *Lavandula hybrida* grosso and *Mentha viridis* were used, and their effects on fragrance were discussed. At the same time, molecules such as beta ionone, galaxolide, vertofix, iso E super and triplal obtained by synthetic production were used in the fragrance design. During the study, the contribution of analytical devices such as GC-MS, refractometer, densimeter and flash point meter in essence design and quality control stages was examined.

SEMBOLLER

α : alfa

β : beta

Δ : delta

γ : gamma

g/cc: yoğunluk birimi

$^{\circ}\text{C}$: Celcius, sıcaklık ölçęęi

ml: mililitre



KISALTMALAR

CAGR: Bileşik yıllık büyüme oranı

AB: Avrupa Birliği

DTÖ: Dünya Ticaret Örgütü

FDA: Gıda ve İlaç Dairesi

GC: Gaz Kromatografi

IFRA: Uluslararası Koku Derneği

MS: Kütle spektrometre

SCCS: Tüketici Güvenliği Bilim Kurulu

UVA: Ultraviyole A

EO: Esans omurgası

ŞEKİL

Şekil 1.1 Uçucu yağlardaki ana bileşik sınıflarından örnekler.....	9
Şekil 1.2 (devamı)Uçucu yağlardaki ana bileşik sınıflarından örnekler.	10
Şekil 1.3 Analitik kimyanın etkilediği şirket departmanları	20
Şekil 3.1 Sentetik moleküllerden hazırlanan karışımın GC-MS analiz sonucu	43
Şekil 3.2 Sentetik akordan ve doğal uçucu yağlardan hazırlanan formülasyonunun GC-MS analiz sonucu	45

TABLO LİSTESİ

Tablo 1.1 Bitki familyalarındaki doğal esansiyel yağların ana kaynakları.....	3
Tablo 1.2 Dünyada ülkelere göre uçucu yağlar ihracatı (milyar ABD doları)	6
Tablo 3.1 Lavanta kokusunu veren bazı hammaddeler	30
Tablo 3.2 Sedir kokusunu veren bazı hammaddeler	31
Tablo 3.3 Sandal ağacı kokusunu veren bazı hammaddeler	32
Tablo 3.4 Lavanta notasını oluşturma denemeleri.....	33
Tablo 3.5 Sedir notasını oluşturma denemeleri	33
Tablo 3.6 Sandal ağacı notasını oluşturma denemeleri	34
Tablo 3.7 Esans omurgası formülasyonu.....	35
Tablo 3.8 Lavanta tamamlayıcı kokularını oluşturma	35
Tablo 3.8 (devamı) Lavanta tamamlayıcı kokularını oluşturma.....	36
Tablo 3.9 Sedir tamamlayıcı kokularını oluşturma	37
Tablo 3.10 Sandal ağacı tamamlayıcı kokularını oluşturma.....	38
Tablo 3.11 Cedre Herbace formülasyonu	39
Tablo 3.11 (devamı) Cedre Herbace formülasyonu.....	40
Tablo 3.12 Sentetik moleküllerden hazırlanan formülasyon	42
Tablo 3.13 Sentetik moleküllerden hazırlanan formülasyonunun GC-MS analiz sonucundan oluşturulan formülasyon.....	43
Tablo 3.14 Sentetik akordan ve doğal uçucu yağlardan hazırlanan formülasyon	44
Tablo 3.15 Sentetik akordan ve doğal uçucu yağlardan hazırlanan formülasyonunun GC-MS analiz sonucundan oluşturulan formülasyon.....	45

1. GİRİŞ VE AMAÇ

Esans, bir resim ya da bir senfoni gibi sanatsal bir kompozisyonudur. Parfümler, bir tablonun renkleri ve bir senfoninin müzik notalarını kullanması gibi, uçucu yağları ve esans kimyasallarını kullanır. Bir esansın birincil şartı, çekici, estetik açıdan hoş bir kokuya sahip olmaktır. Bu arayışın başarısı elbette bir zevk meselesidir, çünkü birine hoş gelen koku diğerine itici gelebilir. Bu nedenle parfümcü, nüfusun mümkün olduğunca büyük bir yüzdesine hitap eden esanslar yaratmaya çalışmaktadır. Moda ve kültürel geçmiş de neyin hoş görüldüğünü etkiler ve parfümcü esans yaratırken bu faktörlere duyarlı olmalıdır. Hangi bileşenlerin birlikte iyi çalıştığını öğrenmek ve hoş bir kombinasyon yaratmak, bir parfümcü eğitiminin büyük bir bölümünü oluşturur. Bunu yapmanın kolay bir yolu olmadığı için, neyin işe yaradığına dair iyi bir fikir ancak deneyim yoluyla öğrenilebilir (Sell, 2019). Esans kullanımı her yerde bulunur ve küresel bir insan olgusudur. Zamanla, sayısız tat ve koku günlük yaşama, kişisel bakım ürünlerine (sabunlar, diş macunları, gargaralar, deodorantlar, banyo losyonları ve şampuanlar), parfümlere ve farmasötik formülasyonlara girmiştir. Tatlar ve kokular, bu tür ürünleri daha çekici kılmak veya daha az hoş olanların tadını veya kokusunu maskeleyerek için eklenir (Coppen, 1995). Parfümler, sabunlar, kozmetik ve banyo malzemeleri, gıda ürünleri ve ilaçlar gibi ürünlerde artan kullanımlarının bir sonucu olarak esanslarda sıklıkla kullanılan doğal uçucu yağlara olan talep keskin ve muazzam bir şekilde artmıştır. Bu önemli uygulamaların yanı sıra doğal uçucu yağlarının aromaterapi, tarım, metalürji gibi sektörlerde, cevher hazırlama ve antimikrobiyal ve bakterisidal ajanlar olarak kullanım alanı ve uygulaması her geçen gün artmaktadır. Doğal esanslar aslında, neredeyse tamamen bitki kökenli, farklı botanik veya bitki ailelerine ait olan ve egzotik çiçeklerden, otlardan, yapraklardan, meyvelerden, tohumlardan, kabuklardan, ağaçlardan, köklerden, sakızlardan elde edilen iyi bilinen esansiyel yağlar veya aromatik yağlardır (Bhattacharyya, 2009).

Birçok endüstri, üretimi daha pahalı olan doğal, bitki bazlı yağların aromatik ve kimyasal bileşenlerini taklit etmek için laboratuvarlarda geliştirilen sentetik esansları kullanmaktadır. Bununla birlikte, sentetik esanslar, doğal bitki bazlı uçucu yağların yararlı yönlerini içermeyebilir ve hatta bahsi geçen uygulama alanları için güvensiz olabilir (Cavanaugh, 2013). Örneğin, insan yapımı esanslarda bulunan kimyasallar, endokrin bozucu olan

ftalatları (Olujimi, 2010) ve benzen türevleri gibi bilinen kanserojenleri içerir (Carson, 2002). Öte yandan, küresel doğal esans pazarı, pazarın büyümesine yön vermesi beklenen sayısız sağlık yararı nedeniyle doğal esanslarının artan kullanımı yüksek bir büyümeye tanık olmuştur. Örneğin, küresel esans pazarının büyüklüğünün 2018'de 7,51 milyar ABD dolarını aştığı ve 2019 ile 2026 arasında %9 üzerinde bileşik yıllık büyüme oranından (CAGR) daha fazla büyümesi bekleniyor (Ahuja ve Singh, 2019). Ayrıca, ünlü kozmetik markaları kozmetikte çeşitli uçucu yağlar kullanır ve en pahalı parfümler, onlara özel ve benzersiz kokular veren ve onları özel kokular kadar benzersiz kılan saf doğal uçucu yağlar içerir (Butnariu ve Sarac, 2018). Bununla birlikte, doğal uçucu yağların sağlık ve güzellikteki etkinliği yaygın olarak kabul edilse de kontrendikasyonlardan ve alerjik etkilerden tamamen arınmış olmayabilirler (Sarkic ve Stappen, 2018).

Aromatik bitkilerin ticari amaçlarla büyük çapta hasat edilmesi türlerin kaybolmasına neden olabilir ve onları yok olma tehlikesiyle karşı karşıya bırakabilir. Bu nedenle, biyoçeşitliliği korumak ve tehlike altındaki türleri korumak için bu bitkilerin sistematik olarak yetiştirilmesi hayati önem taşımaktadır (De Silva, 1995). Doğal ürünlerin sürdürülebilir ekstraksiyonu, yenilikçi teknolojilerin kullanılması, proses yoğunlaştırma ve tarımsal bazlı solventler, biyoçeşitliliği daha fazla riske atmadan her koku ailesini kapsayan eko-tasarlanmış kokulu bileşenlerin geliştirilmesinde çıkış yolunu oluşturmaktadır (Burger ve ark., 2017).

Bu tez, kozmetik ve kozmesötik ürünlerde yaygın olarak kullanılan doğal uçucu yağların açık bir kaynağı olarak bu esansların çok yönlülüğüne ışık tutmayı ve bu yağlarının esans endüstrisinde kullanımı hakkında detaylı bilgi vermeyi amaçlamıştır. Ek olarak, kaynakları, pazar talebi, kimyası, koku sınıflandırmaları, koku profilleri, esans içinde uygulanma teknikleri gibi uçucu yağlarla ilgili diğer hususlar ile bunların orijinalliği ve güvenliği tartışılacaktır.

1.1. Doğal Uçucu Yağlar

Hem aromatik hem de şifalı bitkilere ait bilinen 400000 bitki türü vardır ve bunların yaklaşık 2000 türü, yaklaşık 60 uçucu yağ içeren bitkiler familyasından gelir (Babita ve ark., 2014). Ekonomik açıdan en önemli uçucu yağların çoğunu veren türlerden oluşan bitki aileleri, özel bir taksonomik grupla sınırlı değildir, tüm bitki sınıflarına dağılmış olarak bulunabilir (Franz ve Novak, 2010) (Tablo 1.1).

Tablo 1.1 Bitki familyalarındaki doğal esansiyel yağların ana kaynakları.

Damarlı Bitkilerin Türü	Bitki Aileleri	Uçucu Yağ İçeren Bitki Örnekleri
Açık tohumlular	<i>Cupressaceae</i> <i>Pinaceae</i>	Sedir yaprağı, sedir ağacı, ardıç, köknar ve çam
Kapalı tohumlular	<i>Acoraceae</i>	Hint kamışı
Monokotiledon	<i>Poaceae</i> <i>Zingiberaceae</i>	Vetiver Zencefil ve kakule
Dikotiledon	<i>Apiaceae</i> <i>Asteraceae</i> <i>Geraniaceae</i> <i>Illiciaceae</i> <i>Lamiaceae</i> <i>Lauraceae</i> <i>Myristicaceae</i> <i>Myrtaceae</i> <i>Oleaceae</i> <i>Rosaceae</i> <i>Santalaceae</i>	Kişniş ve rezene Tarhun, papatya ve pelin Sardunya Yıldız anason Lavanta, paçuli, nane, kekik Litsea, tarçın, kafur, sassafras Hint cevizi Yenibahar, mersin ve karanfil Yasemin Gül Sandal ağacı

Birkaç bitki uçucu yağlar içerir; bununla birlikte, uçucu yağın ana kaynağı olarak hizmet eden bitkilerin kısımları farklı olabilir. Bunlar arasında çiçekler ve çiçek salkımları (örneğin, papatya, lavanta, gül, ylang-ylang), yapraklar (örneğin, fesleğen, defne, limon otu, nane, biberiye), meyveler (karabiber, hint cevizi), meyve kabuğu (portakal, bergamot, limon, mandalina), tohumlar (anason, kimyon, kakule, rezene), meyveler (yenibahar, ardıç), ağaç kabuğu (tarçın, cassia, sassafras), odun (sedir ağacı, kafur, sandal ağacı), kök ve rizomları (zencefil, vetiver, zerdeçal) ve reçine (mür, buhur) bulunur (Tongnuanchan ve Benjakul, 2014).

1.2. Kozmetik Endüstrilerinde Uçucu Yağlara Olan Talep

Uçucu yağlar tüm dünyada yaygın olarak kullanılmaktadır ve çeşitli alanlarda saf doğal bileşenlere yönelik güçlü talep nedeniyle kullanımları artmaktadır. Bu nedenle, dünya çapında esans, kozmetik, fitomedikal ve aromaterapi endüstrilerini beslemek için büyük miktarlarda doğal uçucu yağlar üretilmektedir (Baser ve Buchbauer, 2015), (Baser ve Demirci, 2007). Talep çoğunlukla şu pazarlardan geliyor: yiyecek ve içecek (%35), esanslar, kozmetik ve aromaterapi (%29), ev bakımı ve temizliği (%16) ve ilaç (%15) (Barbieri ve Borsotto, 2018). Tüketiciler, uçucu yağların sağlık yararları konusunda

giderek daha fazla bilinçlendikçe, bu doğal uçucu yağları katkı maddesi olarak içeren yiyecek ve içeceklerle yönelik eğilimler gelişmiştir. Küresel doğal esansiyel yağlar pazarına, tüketiciler arasında sağlık sorunlarına ilişkin farkındalığın artması nedeniyle organik ve doğal hijyenik ürünlere olan talebin artması da öncülük etmektedir. Ayrıca, parfüm ve kozmetiklerde doğal tatlar ve kokular talebinin doğal uçucu yağlara olan talebi artırması muhtemeldir. Esansiyel yağlar ve oleoresinler sadece gıda işleme ve endüstriyel baharat sektörlerinde kullanılmaz, aynı zamanda parfüm ve aroma endüstrilerinde de hayati öneme sahiptir. Küresel olarak, faaliyet gösteren aroma ve esans üreticileri, uçucu yağların ana alıcıları arasındadır. Satışları, pazarlarındaki gelişmelerin ve ardından uçucu yağlara olan talebin bir göstergesidir (Barbieri ve Borsotto, 2018).

Özellikle kozmetik endüstrilerinde, portakaldan elde edilen gibi uçucu yağlar, cilt elastikiyeti, sıkılığı gibi çok sayıda sağlık çözümü sunduğu ve yara izlerini, sivilceleri ve çatlakları tedavi ettiği için maksimum gelir elde etmiştir. Limon ve portakal uçucu yağları ayrıca antiseptik özelliklere sahiptir, bu da onları cilt ve saç bakımında ideal bileşenler yapar. Ayrıca, bu yağların antimikrobiyal özellikleri, daha fazla iş büyümesi için yeni yollar açmıştır (Ahuja ve Singh, 2019).

Bazı uçucu yağlar çok büyük ölçekte üretilmektedir (örneğin, 2008'de portakal yağı üretimi ~51000 ton, mısır nane yağı ~32000 ton ve limon yağı üretimi ~9200 ton). Narenciye cinsinden çeşitli meyvelerden elde edilen esansiyel yağlar en popüler doğal esansiyel yağlardır ve ticari doğal tat ve kokuların en büyük bölümünü oluşturur (Sawamura, 2011). Bazılarının nadir bulunmaları nedeniyle çok daha küçük ölçekte üretimi, ancak çok yüksek fiyatlarla satılmaktadır (örneğin, agar ağacı yağı (6000–11000 ABD doları/kg), iris (6200–100000 ABD doları/kg, irone konsantrasyonuna bağlı olarak) veya gül yağı (6000–10000 ABD doları/kg)). Bu fiyatlar değişir ve hammaddelerin kıtlığı, hasat sorunları, iklim bağımlılığı veya çıkarma verimi ile ilgili olabilmektedir. Uçucu yağ endüstrisi kümülatif satışları 2008'de birkaç milyar ABD dolarını temsil ediyordu (Baser ve Buchbauer, 2015) (Adlard, 2010).

Avrupa, küresel esansiyel yağlar pazarında en büyük paya sahipken, Asya Pasifik bölgesi ve Kuzey Amerika ikinci sırayı paylaşıyor. Uçucu yağlar, kokulu mumların, yağların ve diğer ürünlerin üretiminde önemli bir rol oynar. 2017 yılında Amerika Birleşik Devletleri'ndeki uçucu yağlar endüstrisi yaklaşık %10'luk bir gelir artışına tanık olmuştur

ve 2024 yılına kadar piyasa değerinin yaklaşık 7,3 milyar ABD dolara ulaşması bekleniyor. ABD pazarından en büyük payı oluşturan uçucu yağlar portakal, mısır nane ve okaliptüs uçucu yağlarıdır. Ayrıca, zengin bir parfüm üretim geçmişine sahip bir ülke olarak Fransa, aynı zamanda dünya çapında en fazla uçucu yağ ihracatçısıdır. ABD'den uçucu yağların ve reçinelerden ihracat değeri son yıllarda yaklaşık 2 milyar ABD doları arttı. Ayrıca, bazı uçucu yağ çeşitlerini yerel talepleri karşılamak için büyük miktarlarda üretemeyen bazı ülkeler, bunları diğer ülkelerden ithal etmek zorundadır. Örneğin Lübnan, 2017'de yaklaşık 13,75 milyar ABD doları ile uçucu yağlarını ithal ederken, Almanya gibi Kuzey Avrupa ülkeleri Avrupa'ya ithal edilen portakal yağının yaklaşık %80'ini oluşturmuyordu (Ridder, 2020).

Verilere göre küresel tıbbi ve aromatik bitki ticareti 2001 yılından bu yana istikrarlı bir yükseliş eğilimi gösteriyor. 2001 yılında 18,3 milyar ABD doları olan ihracat değeri, 2019 yılında 70,7 milyar ABD dolarına yükselmiştir. Özellikle Hindistan, ABD ve Fransa, uçucu yağların ihracatında dikkat çeken ülkeler olup, bu ürünün toplam ihracat değeri 5,6 milyar ABD dolarıdır. (ITC, 2020), (Tablo 1.2Türkiye'de uçucu yağların ihracat değeri 49 milyon doları bulurken, bunun 13,2 milyon dolarını gül yağı, 11,6 milyon dolarını narenciye konsantreleri ve diğer yağlar (nane hariç), 1,1 milyon dolarını stearopten ve 3,9 milyon dolarını kekik yağı oluşturdu. Gül esansiyel yağları (terpen içermeyen) öncelikle Fransa, Hong Kong ve Çin'e ihraç edilirken, en yüksek ihracat değerleri Fransa, İngiltere ve İsviçre'den gelmektedir. Kekik yağı ağırlıklı olarak ABD ve İsviçre'de, stearopten Fransa'da, çeşitli yağların (narenciye ve nane hariç) konsantrelerinden elde edilen yağlar ise ağırlıklı olarak Fransa'da üretilmektedir. Gül yetiştiriciliğinde önemli bir potansiyele sahip olan Türkiye, gül yağı ürünlerini yalnızca hammadde olarak ihraç etmek yerine, daha fazla değer katarak ihracat gelirini artırmayı hedeflemektedir. (TÜİK, 2020), (Tablo 1.3). Aynı zamanda Türkiye'de son 20 senede doğal uçucu yağ ithalatı yaklaşık 10 kat artmıştır (Tablo 1.4).

Tablo 1.2 Dünyada ülkelere göre uçucu yağlar ihracatı (milyar ABD doları)

	2001	2005	2010	2011	2012	2013	2014	2015	2016	2017	2018	2019
Hindistan	0,1	0,1	0,3	0,5	0,7	0,7	0,6	0,6	0,6	0,8	0,9	1,2
ABD	0,3	0,4	0,4	0,5	0,5	0,5	0,6	0,6	0,6	0,7	0,8	0,8
Fransa	0,2	0,2	0,3	0,3	0,3	0,3	0,4	0,4	0,4	0,5	0,5	0,5
Çin	0,1	0,1	0,2	0,2	0,2	0,3	0,6	0,8	0,5	0,4	0,5	0,3
Brezilya	0,1	0,1	0,2	0,3	0,2	0,2	0,2	0,3	0,3	0,4	0,4	0,3
Diğer	0,7	0,9	1,6	1,8	1,7	1,9	2,1	2,3	2,3	2,7	2,9	2,5
Dünya	1,3	1,8	3,0	3,6	3,7	4,0	4,5	4,8	4,7	5,4	6,0	5,6

Tablo 1.1 Türkiye'nin ülkelere göre uçucu yağlar vb. ihracatı (milyon ABD doları)

	2000	2005	2010	2011	2012	2013	2014	2015	2016	2017	2018	2019
Fransa	5,5	7,4	10	14,5	16,2	16,6	21,7	20,5	25,4	28,3	24,1	20,0
Birleşik Krallık		0,6	1	1,2	1,8	1,4	2	2	4,6	5,3	4,3	3,9
Almanya	0,9	2,2	2,8	3,1	2,1	1,3	1,7	2,4	3,7	3,7	3,8	3,8
ABD	0,8	0,6	0,8	0,9	0,7	1,1	0,8	1,3	1,3	2,3	4,3	2,7
İsviçre	0,6	0,7	0,8	0,3	1	0,9	1,5	1,4	0,9	1,4	1,6	1,4
Diğer	0,9	3,4	2,2	2,2	3	3,8	4,6	6	5,5	8,2	9,3	8,1
Toplam	8,6	14,9	17,5	22,2	24,8	25,2	32,3	33,6	41,4	49,2	47,5	40,0

Tablo 1.2 Türkiye doğal uçucu yağlar ithalatı (milyon ABD doları)

Yıl	Milyon ABD doları	Yıl	Milyon ABD doları
2001	3,4	2011	19,5
2002	5,3	2012	18
2003	5,9	2013	19,3
2004	7,7	2014	23,3
2005	8,5	2015	26,7
2006	10,1	2016	27,4
2007	11,4	2017	36,4
2008	13,6	2018	33,5
2009	11,2	2019	32
2010	12,2		

1.3. Doğal Uçucu Yağ Kokularının Sınıflandırılması

Modern kullanımda "aromatik" terimi, burun için hoş veya tiksindirici bir koku verme özelliğini açıklasa da aromatik bir bileşik, elektronların yer değiştirmesiyle sonuçlanan ve daha yüksek moleküler stabilite üreten bir kimyasal düzenlemeye sahiptir. Bu nedenle, uçucu yağlar, tümü algılanan kokuya katkıda bulunan aromatik ve alifatik (aromatik

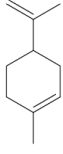
olmayan) bileşiklerin bir karışımı olabilir (Sadgrove ve Jones, 2015). Uçucu yağlar alkol, eter ve sabit yağlarda çözünür, ancak suda çözünmez. Bu uçucu yağlar genellikle oda sıcaklığında sıvı ve renksizdir. Birkaç durum (tarçın, sassafras, karanfil ve vetiver) dışında karakteristik bir kokuya ve birden az yoğunluğa sahiptirler. Ayrıca, bir kırılma indisine ve çok yüksek bir optik aktiviteye sahiptirler (Dhifi ve ark., 2016).

Uçucu yağlar, yalnızca birkaç ile 100'den fazla tekil maddeden oluşabilir (Turek ve Stintzing, 2013). Çok karmaşık yapıya sahip doğal karışımlar olan uçucu yağlar, eser miktarlarda bulunan diğer bileşenlerle karşılaştırıldığında, oldukça yüksek konsantrasyonlarda (%20-70) iki veya üç ana bileşenle oldukça farklı konsantrasyonlarda yaklaşık 20-60 bileşenden oluşabilir (Chouhan ve ark., 2017). Bununla birlikte, tek bileşiklerin koku katkısı, kesinlikle ilgili konsantrasyonlarına bağlı değildir, yapı ve uçuculuk tarafından belirlenen spesifik koku eşiğine dayanır. Sonuç olarak, oksidasyon ve bozulma reaksiyonlarından türetilen küçük bileşenler bile aroma değerleri yeterince yüksekse koku üzerinde güçlü bir etkiye sahip olabilir (Grosch, 2007). Çoğunlukla, esansiyel yağ bileşenleri, lipofilik terpenoidler, fenilpropanoidler veya düşük moleküler ağırlıklı kısa zincirli alifatik hidrokarbon türevleri olarak atanabilir, ilki en sık ve karakteristik bileşenlerdir. Bunlar arasında, farklı kimyasal sınıflardaki alilik, mono-, bi- veya trisiklik mono- ve seskiterpenoidler, hidrokarbonlar, ketonlar, alkoller, oksitler, aldehytler, fenoller veya esterler gibi uçucu yağların büyük bir bölümünü oluşturur (Turek ve Stintzing, 2013) (Şekil 1.1). Tek bir bileşenin bile olmaması aromayı değiştirebilir. Genel olarak, monoterpen hidrokarbonlar, esansiyel yağın kokusuna katkılar bakımından, oldukça koku verici olan oksijenli bileşiklerden daha az değerlidir (Kusuma, 2016). Kimyasal özelliklerine ek olarak, uçucu yağların fiziksel özelliklerinde yoğunluk, kırılma indisi ve dönme gücü açısından büyük farklılıklar gösterdiği görülebilir. Örneğin, *Siphonochilus ethiopicus*'un farklı organlarının (limbo, yaprak kını ve rizomları) uçucu yağlarının bu fiziksel özelliklerde önemli ölçüde farklılık gösterdiği rapor edilmiştir. Bu özellikler, bitki esansiyel yağlarının daha iyi karakterizasyonuna katkıda bulunur (Noudogbessi ve ark., 2012).

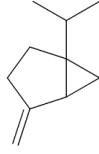
Terpenler, doğal kokuların en büyük grubudur ve bunların sınıflandırılması temel olarak yapılarında bulunan izopren birimlerinin sayısına bağlıdır. C₅ birimlerinin sayısına bağlı olarak, terpenler hemiterpenler (C₅), monoterpenler (C₁₀), seskiterpenler (C₁₅) ve diterpenler (C₂₀) olarak sınıflandırılır (Bakkali, 2008), (Ashour ve 2018), (Llana-Ruiz-

Cabello ve ark., 2015). Monoterpenler, çok çeşitli yapılara sahip uçucu yağlarda en bol bulunanlardır (yaklaşık %90). Geraniol, nerol, linalool, citronellol, citronellal ve citral en önemli terpenlerdir ve parfüm endüstrisinde yaygın olarak kullanılmaktadır (Pavela, 2015), (Sell, 2006). Biyogenetik olarak, terpenoidler ve fenilpropanoidler farklı birincil metabolik öncülere sahiptir ve farklı biyosentetik yollardan üretilir. Terpenoidlerde yer alan yollar mevalonat ve mevalonattan bağımsız (deoksiksilüloz fosfat) yollardır, oysa fenilpropanoidler şikimat yolundan kaynaklanır (Dhifi ve ark., 2016). Uçucu yağların birçok bileşeni, optik aktivite sergileyen bir veya daha fazla asimetric karbon atomu içerir. Doğal kökenli bu kiral bileşikler (mono- ve seskiterpenler), enzimatik olarak kontrol edilen biyosentetik sentez yoluyla evrimleştikleri için genellikle karakteristik enantiyomerik dağılımlarda bulunurlar. Ayrıca gıda, ilaç ve koku endüstrilerinde farklı kullanımları vardır. Dahası, koku maddelerinin kiralitesi, diğer farmasötiklere benzer şekilde, antipodların farklı şekilde hareket edebildiğini öne sürerek, onların etki tarzları üzerinde bir etkiye sahiptir. Biyolojik, terapötik ve farmakolojik potansiyellerindeki farklılıklara ek olarak, kiral bileşikler arasındaki koku farklılık gösterebilir (Lahlou, 2004). Örneğin monoterpen keton carvone'un R-(-)- ve S-(+)- enantiyomerleri koku ve tat bakımından farklılık gösterir; S-(+)-carvone aromatik bir kokuya sahipken, R-(-)-carvone karakteristik bir nane kokusuna sahiptir. Ayrıca, limonene söz konusu olduğunda, (+)- limonene'in kokusunun (-)- limonene'den önemli ölçüde daha hoş ve daha uyarıcı olduğu değerlendirilmiştir (Lahlou, 2004). -(+)- ve -(-)-menthol ise her iki enantiyomer nane kokusu kalitesine sahipken, (-)- menthol'ün soğutma etkisi (+)-menthol'den çok daha güçlüdür (Laska, 1999).

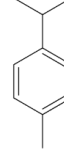
Hidrokarbonlar



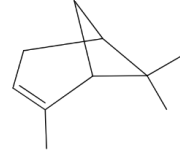
Limonene



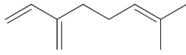
Sabinene



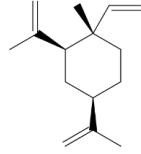
p-Cymene



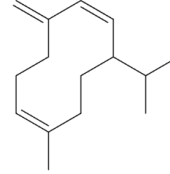
α-Pinene



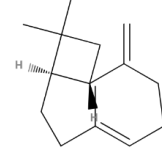
Myrcene



β-Elemene

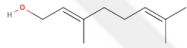


Germacrene D

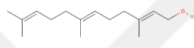


β-Caryophyllene

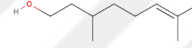
Alkoller



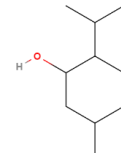
Geraniol



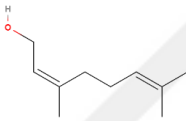
Farnesol



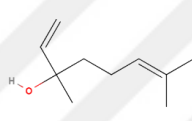
Citronellol



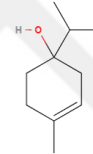
Menthol



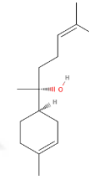
Nerol



Linalool

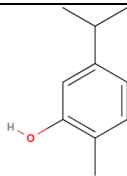


Terpen-4-ol

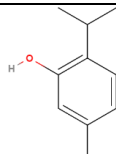


(+)-α-Bisabolol

Fenoller

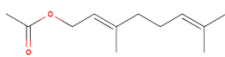


Carvacrol

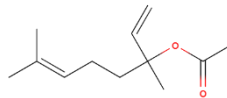


Thymol

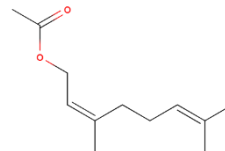
Esterler



Geranyl acetate

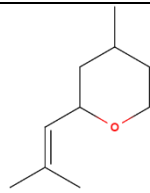
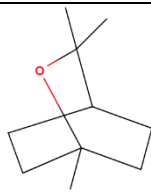
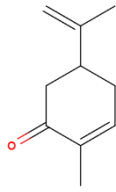
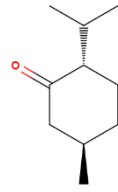
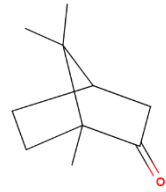
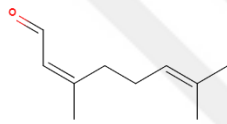
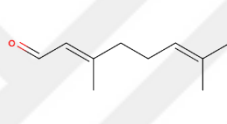
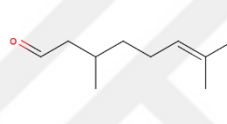
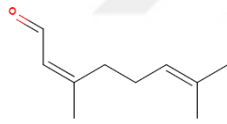
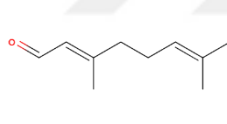
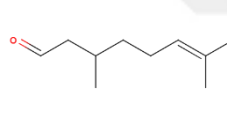
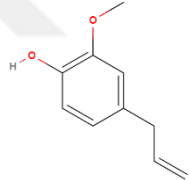


Linalyl acetate



Neryl acetate

Şekil 1.1 Uçucu yağlardaki ana bileşik sınıflarından örnekler

Oksitler			
			
Rose oxide	1,8-Cineole		
Ketonlar			
			
Carvone	Menthone	Camphor	
Aldehydler			
			
Neral	Citral	Citronellal	
Fenilpropanoidler			
			
Anethol	Myristicin	Apiol	Eugenol

Şekil 1.2 (devamı)Uçucu yağlardaki ana bileşik sınıflarından örnekler.

Uçucu yağların kimyasal bileşimi, fizyolojik (bitki organı, ontojenez), çevresel (toprak bileşimi, hava koşulları) ve genetik faktörler nedeniyle büyük ölçüde değişebilir (Salgueiro ve ark., 2010). Yağların kimyasal bileşimini etkileyebilecek diğer faktörler, coğrafi varyasyon (Şanlı ve Karadoğan, 2017), bitki parametreleri (ör. türler, ekili veya yabani bitkiler), hasat ve hasat sonrası/ön damıtma parametreleri (ör. hasat mevsimi, biyokütlenin ön işlemi ve kaynak bitki malzemelerinin saklama koşulları), üretim parametreleri (ör. üretim modu, damıtma parametreleri, ticari yağ veya laboratuvarında üretilen) ve diğer parametrelerdir (örneğin, uçucu yağların depolama durumu ve depolama süresi, uçucu yağın yaşı, oksijene ve ultraviyole ışığa maruz kalarak yaşlanma ve analitik parametreler) (De Groot ve Schmidt, 2016).

1.4. Uçucu Yağların Aroma Profilleri ve Bireysel Bileşikleri

Uçucu yağlar ve bunların izole edilmiş bileşikleri, hoş kokuları da dahil olmak üzere çeşitli faydalar sundukları için kozmetik ürünlerde yaygın olarak kullanılmaktadır. Ancak kozmetikte kullanılmalarının asıl nedeni hoş kokularıdır. Kozmetik ürünlerin üretim sürecinde kullanılan yağ asitleri, yağları ve yüzey aktif maddeler genellikle hoş olmayan bir koku sergiler (Sarkic, 2018). Uçucu yağlar ve bunların terpenoidleri, kozmetik ve parfümeri endüstrilerinin kullandığı en önemli doğal ürünlerden biridir. Aslında, kozmetik ve parfümeri alanlarında patentli ürün ve işlemler için aktif içerik olarak uygulanan esansiyel yağların, özellikle terpenlerin ve terpenoidlerin baskın olduğu ortaya çıkmıştır (Da Silva-Santos ve ark., 2005).

Gerçekten de çok çeşitli aromatik bitkilerden elde edilen uçucu yağların, benzersiz notalara sahip çok çeşitli doğal kokular sunarak parfümlerde ve kozmetiklerde önemli koku kaynakları olarak kullanıldığı belgelenmiştir. Bu nedenle parfüm ve kozmetik sanayinde yaygın olarak kullanılan uçucu yağların aroma profilleri, temel bileşenleri, renk çeşitleri, elde edildikleri bitkilerin bilimsel/yaygın adları ve kullanılan kısımları ile birlikte sunulmaktadır (EK 1-Tablo 1).

1.5. Uçucu Yağların Güvenliği

Esas olarak algılanan güvenliklerinden dolayı, uçucu yağların ve diğer botanik olarak türetilmiş ürünlerin kullanımı daha popüler hale gelmiştir. Bununla birlikte, kozmetikte sıklıkla bulunan ve sentetik kimyasalların yerini alması için aranan bu doğal ürünlerin standardizasyonu ve güvenliği konusunda son zamanlarda endişeler bulunmaktadır. Örneğin, uçucu yağların, değişken yetiştirme koşulları, genetik ve botaniklerin hasat edilmesi nedeniyle standartlaştırılması zordur (Mortimer, 2016). Aslında, son yıllarda uçucu yağların güvenlik profillerine ilişkin birkaç çalışma yayınlanmıştır (Tisserand, 2014), (Vostinaru ve ark., 2020).

En yaygın esansiyel yağların büyük çoğunluğu iyi test edilmiş ve güvenlik seviyeleri belirlenmiş olsa da bazı esansiyel yağların diğerlerinden daha olumsuz reaksiyonlara neden olduğu ve nispeten güçlü bir alerjenin varlığı ve konsantrasyonunun alerjik kontakt dermatitte önemli bir faktör olduğu açıktır. Safsızlıkların veya kirleticilerin varlığı da bir faktör olabilir. Ek olarak, uçucu yağ bileşenlerinin oksidasyonu, oluşan oksitler ve

peroksitler daha reaktif olduđu için cilt reaksiyonları riskini artırabilir. Bu, (+)-limonene, δ -3-carene ve α -pinene ile gözlemlenebilir ve bazıları ana bileşikten daha hassaslaştırıcı olan oksidasyon ürünlerinin oluşumundan kaynaklanır (Tisserand, 2014). Bu nedenle, etkinliklerini korumak ve olumsuz reaksiyon riskini azaltmak için uçucu yağların uygun şekilde depolanması gerekir. Buna göre uçucu yağlar, karanlık, serin bir yerde veya buzdolabında, sıkıca kapatılmış kahverengi şişelerde uygun şekilde saklanmalıdır (Vostinaru ve ark., 2020).

Güneş ışığı veya ultraviyole A (UVA) ışığı varlığında cilde uçucu yağdaki bir fototoksin uygulandığında da ışığa duyarlılık oluşabilir. Örneğin, furanokumarinler, melekotu kökü (*Angelica archangelica* L.), sedefotu (*Ruta graveolens* L.), maydanoz yaprağı (*Petroselinum crispum* (Mill.) Fuss) ve kadife çiçeği (*Tagetes minuta* L.) esansiyel yağlarında bulunabilmelerine rağmen, esas olarak ifade edilen narenciye kabuğu yağlarında bulunabilen fototoksinlerdir. En yaygın furanokumarinler psoralen ve bergaptendir. Cilde uygulanan bu fototoksik bileşikler içeren esansiyel bir yağ UVA ışığına maruz kaldığında ortaya çıkan enflamatuvar cilt reaksiyonları, pigmentasyon, kabarcıklanmadan şiddetli tam kat yanıklara kadar değişebilir (Bouchiha, 2015). Bazı esansiyel yağlar dermal tahriş edici olarak bilinmekle birlikte, şiddetleri konsantrasyonlarına bağlı olabilir. Bunlar herhangi bir iltihaplı veya alerjik cilt durumunda kullanılmamalı ve her zaman bitkisel yağlarla uygun şekilde seyreltilmelidir. Ayrıca, bazı esansiyel yağlar, solaryumda karşılaşılacaklar gibi güneşe ve ultraviyole ışınlarına maruz kaldığında cildi daha hassas hale getirebileceğinden, ışığa duyarlı hale getiren esansiyel yağların uygulanmasından sonra en az 24 saat güneşe veya solaryuma maruz kalmaktan kaçınılmalıdır. (Balick, 2019). 24 olası alerjenik hammadde tanımlanmıştır (Van Oosten ve ark., 2009) (Tablo 1.5), bunlardan 18'i uçucu yağların bileşenleri olarak bulunabilir ve bu nedenle bu alerjenik kokuların konsantrasyonu izin verilen konsantrasyondan yüksekse ambalajın üzerinde veya bilgi broşüründe beyan edilmelidir (Sarkic ve Stappen 2018).

15 Eylül 2022'de Avrupa Birliği, Dünya Ticaret Örgütü'ne (DTÖ) kozmetik ürünlerde koku alerjenlerinin etiketlenmesine ilişkin bir yönetmelik taslağını bildirdi. Buna göre, yasa mevcut seti 61 ek koku bileşenine kadar genişletecektir. AB Kozmetik Yönetmeliğine Ek III, bu alerjenleri listeler ve etiketleme eşliğini belirtir. Bu sayede hassas tüketiciler kozmetik ürünlerdeki alerjen içeriğinin farkında olacaktır. Aksi

takdirde, kokulardan içerik listesinde “parfüm” veya “aroma” olarak bahsedilecektir. Özellikle alerjenleri listelemek, klinik uygulamada, hastaların hangi alerjenlerle temas ettiğini belirlemek ve alerjisi olanlar için tolere etmedikleri maddelere maruz kalmaktan kaçınmak için önemlidir. DTÖ'ye yeni bildirilen Düzenleme ile Avrupa Komisyonu, Tüketici Güvenliği Bilim Kurulu (SCCS) geri bildirimini uygulamaya koymuştur. Bu nedenle, taslağa göre, konsantrasyonları sınırları aştığında içerik listesinde 61 ek koku alerjeni belirtilmelidir. (Scientific Committee on Consumer Safety. 2012).

Tablo 1.3 24 Olası alerjenik kokunun listesi

Alerjenik hammaddeler	
<u>Alpha isomethylionone</u>	Coumarin
<u>Amyl cinnamal (Jasmonal A)</u>	Eugenol
<u>Amyl cinnamyl alcohol</u>	Farnesol
<u>Anisyl alcohol</u>	Geraniol
<u>Benzyl alcohol</u>	Hexyl cinnamal (Jasmonal h)
<u>Benzyl benzoate</u>	Hydroxycitronellal
<u>Benzyl cinnamate</u>	Isoeugenol
<u>Benzyl salicylate</u>	Limonene
<u>Cinnamal</u>	Linalool
<u>Cinnamyl alcohol</u>	Methyl 2-octynoate
<u>Citral</u>	Evernia <u>furfuracea</u> (Treemoss) extract
<u>Citronellol</u>	Evernia <u>prunastri</u> (Oakmoss) extract

Avrupa Komisyonu nihai yasayı 2023'ün ilk yarısında yayınlamayı planlıyor. Sonuç olarak, güncelleme birçok güzellik markasının ürünlerinin etiketlerini değiştirmesini gerektirecek ve bu da maliyetli olacaktır. Bunun ışığında kanun, sanayinin yeni gereksinimlere uyum sağlaması için bir süre öngörmektedir. Bu nedenle markaların mevcut hükümlere uygun yeni ürünleri AB pazarına yerleştirmek için 5 yılı ve halihazırda piyasada bulunan ürünleri satmak ve nihayetinde geri çağırmak için 3 yılı olacak (Avrupa Komisyonu, 2022).

Gıda ve İlaç Dairesi (FDA) gibi düzenleyici otoriteler, kokular kozmetik bileşenler olarak kabul edildiğinden uçucu yağ içerebilecek bir koku için onay gerektirmez. Gıda ürünleri ve ilaçlarla karşılaştırıldığında, koku içeriği olarak kullanılan uçucu yağlar için FDA'nın düzenleme süreci o kadar titiz değildir. Sonuç olarak, kozmetik üreticilerine yüksek kaliteli ürün sağlama konusunda önemli bir sorumluluk düşmektedir. FDA, ürün kalitesini sağlamak için her zaman bir içerik listesi ister; bununla birlikte, FDA'nın kozmetikler için alerjen etiketlemesini zorunlu kılma yetkisi olmadığı için, üreticiyi

kozmetik sırlarını ifşa etmeye zorunlu kılmayacaktır. Bu durum, özellikle uçucu yağlara daha az aşına olan tüketiciler için dezavantajlı olabilir (Es, 2017).

Ek olarak, Uluslararası Koku Derneği (IFRA) hangi uçucu yağların ve hangi bileşenlerin potansiyel bir alerji riskini temsil ettiğini tanımlar ve güvenli kozmetik ürünler üretmek için maksimum konsantrasyonlarını belirler (Sarkic, 2018). IFRA ayrıca, IFRA Uygulama Kuralları ve yönergelerinde yayınlanan koku bileşenlerinin güvenli kullanımı için önerilerde bulunur (SCCNFP, 1999).

Uçucu yağ güvenliği, tümü parfümeri, kozmetik ve gıda endüstrilerine yönelik çeşitli şekillerde izlenir. Yeni aroma kimyasallarının sentezi ve birçok seyreltici ile birlikte doğal esansiyel yağlarda yaygın olarak kullanılması, en kötüsü dermatolojik hassasiyet olmak üzere birçok sorunu beraberinde getirmiştir (Lis-Balchin, 2006). Bununla birlikte, uçucu yağların karmaşıklığı nedeniyle, koku karışımlarının tek başına uçucu yağ temas alerjisini ortadan kaldırmak için yeterli olmadığı göz önüne alındığında, belirli uçucu yağların test edilmesi önemlidir (De Groot, 2016), (Warshaw, 2017). Kimyasal bileşimlerin karmaşıklığı ve diğer kokularla ko-reaktivite nedeniyle sorumlu alerjeni doğru bir şekilde belirlemek genellikle zordur. Tarama serisi birkaç popüler esansiyel yağ içerse de yaşlanma süreciyle bileşimleri değişmiş olabileceğinden, hastaları kendi ürünleriyle test etmek önemlidir. Petrolatum'da %2 ile %5 yağ konsantrasyonlarının formülasyonu ile çoğu uçucu yağ için test güvenli bir şekilde gerçekleştirilebilmektedir (De Groot, 2016).

1.6. Esans Yapısı

Esans, bir resim ya da bir senfoni gibi sanatsal bir kompozisyonudur. Esanslar, bir tablonun renkleri ve bir senfoninin müzik notalarını kullanması gibi, uçucu yağları ve aroma kimyasallarını kullanır. Gerçekten de parfümeri dili, parfümcülerin notalardan (bireysel koku bileşenleri), akorlardan veya ahenklerden (hoş nota kombinasyonları) ve discordlardan (sarsıcı bir etki yaratan nota kombinasyonları) söz etmesi bakımından müziğin diline benzer. Tahmin edilebileceği gibi, müzikte olduğu gibi parfümeride de akortlar discord'lardan çok daha yaygındır, ancak parfümcüler koku discord'larını bestecilerin müzikal discord'ları kullandıkları kadar etkili bir şekilde kullanabilirler (Sell, 2019).

Parfümeride kullanılan notalar genellikle o notayı simgeleyen orijinal yağların botanik kaynağına göre kategorilere ayrılır. Örneğin limon, portakal, ıhlamur, bergamot ve greyfurt narenciye notaları olarak; gül, yasemin, karanfil ve vadi zambağı çiçek notaları olarak; sandal ağacı ve sedir ağacı odunsu notalar olarak gruplandırılır. Basit bir doğal karşılığı olmayan, yaygın olarak kullanılan bir grup, aldehidik ailedir. (Sell, 2019). Bu malzemeler tam olarak adlarının ima ettiği şeydir, aldehitler. Daha spesifik olarak, yağlı, hafif ozonlu karakterlere sahip alifatik aldehitlerdir. Chanel No. 5, benzersiz üst notasını vermek için aldehitler kullanılmıştır. 1921'de piyasaya sürüldüğünde o kadar büyük bir başarıydı ki, aldehidik üst notalar için bir moda yarattı ve bu artık ana akım koku sınıfına dönüşmüştür (Turin, 2007).

Koku ailelerinin, büyük ölçüde uçuculuklarına bağlı olarak üç büyük gruba ayrıldığı düşünülmektedir. Bu üç kategori, üst notalar (veya baş notalar), orta notalar (veya kalp notalar) ve temel notalar (bitiş veya alt notalar) olarak bilinir. Üst notalar en uçucu olanlardır ve buharlaşmanın ilk 15 dakikasını temsil eder, orta notalar birkaç saat sürer ve temel notalar bir parfümcünün kurutma kağıdında günlerce veya haftalarca kalır. Bu nedenle, yeni açılmış bir parfüm şişesinin ilk kokusu, üst notaların çoğunu içerecektir ve bir parfüm, ilk izlenimden ziyade uzun bir kuruma süresine göre değerlendirilmelidir. Bununla birlikte, bazı orta ve son notaların çok yüksek etkiye sahip olduğunu ve kokunun “tepesinde” bile önemli bir etki yaratacağını unutmamalıyız (Sell, 2019).

Kokuların kelimelere veya tanımlayıcılara göre niteliksel olarak sınıflandırılması zor bir iştir ve bu nedenle (herhangi bir teorik model kullanılarak) tahmini daha da karmaşıktır. Koku ve aroma şirketlerinin bu işi, koku alma alanını haritalamak için çoklu (ve bazen karmaşık) koku tanımlayıcıları kullanan deneyimli parfümcüleri tarafından gerçekleştirilen duyuşsal analiz temelinde yapmalarının nedeni budur. Bununla birlikte, evren idealliğe yaklaşan ve bunun yerine entropinin artmasını öngören yasalarla yönetilmediğinden, koku kalitesini algılama şeklimiz kişiden kişiye değişir ve bu nedenle açıklanması zordur. Sonuç olarak, farklı koku ve aroma şirketlerinden elde edilen sınıflandırmalar arasında önemli farklılıklar vardır. Bir kez daha hatırlatılırsa, insanın ampirik bilgisi ve uzmanlığı bu işi yönetmektedir. Toplamda, bu gerçekler, evrensel kabul gören bir koku sınıflandırmasına inanmayı neredeyse imkansız hale getiriyor (Mata ve ark., 2004.).

Kokuların sınıflandırılması uzun süredir araştırılıyor, ancak süreci henüz tam olarak anlaşılmamıştır: koku almanın ardındaki biyokimyasal süreçleri yorumlamak, samanlıktaki iğne aramaya benzemektedir. Sonuç olarak, kokuların koku alma sınıflarına göre evrensel bir sınıflandırması yoktur (Chastrette ve ark., M., 1991.). Koku ve aroma endüstrisi ar-ge odaklı bir işletme olarak anlaşılmalıdır ve bu departmanlar büyük yatırımlar almaktadır: uçucu yağların çıkarılması, kimyasal analiz için ekipman yapımı, tekniklerin geliştirilmesi veya kokulu moleküller için yeni sentetik yolların bulunması bu departmanlar kapsamında yapılan işlemlerin bazılarıdır. Buna rağmen, koku kalitesinin simülasyonu gibi diğer konularda uzmanlar hala çok uzaklar. Bu bilgi eksikliğinin nedeni, koku tanınmanın burun seviyesinde meydana gelen fizyolojik ve biyokimyasal süreçlerin yanı sıra nöronal şifre çözme içermesidir (Haddad ve ark., 2008.). İnsan burnu, koku alma reseptörü hücreleri ve bunların beyindeki iletimi ile birlikte, kokuları algılamak için karmaşık ama bir şekilde sınırlı bir sistem oluşturur. Aslında, bir gaz kromatografi ekipmanından daha düşük konsantrasyonlarda kokuları tespit edebiliyor olabiliriz, ancak aynı zamanda yüzlerce farklı kokunun karışımında sunulan sadece birkaç kimyasalı ayırt edebilmekteyiz (Zarzo, 2008).

Bunun arkasındaki fizyoloji ne olursa olsun, koku alma duyusu diğer tüm duylardan daha keskindir. Bu gerçeği göstermek için pratik bir örnek, renkleri ve kokuları karşılaştırmaktır: genellikle, bir rengin genel bir tanımı (en fazla) bir veya iki kelime kullanılarak yapılır. Tersine, kokuların tanımı için genellikle aynı şey geçerli değildir. Örneğin, bir gülün uyandırdığı kokuyu tarif etmeye çalıştığınızda, kişinin duygularını, hislerini veya hatıralarını temsil eden birden fazla kelimeye ihtiyaç duyulacaktır. Ayrıca, farklı insanlar bir gülün kokusunu karakterize etmek için farklı sıfatlar veya sınıflar kullanırlar. Bunun ana nedeni, bize renkler, şekiller veya sesler gibi farklı kokular öğretilmemesidir. Diğer nedenler, kişilerarası değişkenlik ve insan koku alma sisteminin karmaşıklığı ile ilgilidir. İnsan görüşü için, tüm görünür dalga boyu aralığını algılayan, geniş ölçüde ayarlanmış üç reseptör olduğunu biliyoruz. Bununla birlikte, koku almada, binlerce farklı kokuyu ve aralarındaki çoklu kombinasyonları algılamamıza izin veren yaklaşık 391 koku alma reseptörüne sahibiz (Saito, 2009.). Bununla birlikte, koku endüstrisinde kokuların veya karışımların duysal algılanması, değerlendirilmesi ve sınıflandırılması parfümcülerin işinin bir parçasıdır. Bu uzmanlar, ham maddeleri ve karmaşık parfümleri tespit etmek, tanımak ve sınıflandırmak için uzun yıllar boyunca

yüksek düzeyde eğitim almıştır. Bir parfümcünün burnu, birkaç yüz farklı koku veren kimyasalı tanıyabilir ve bunları bir hafıza veri tabanı olarak tutabilir. Sınıflandırmaları genel kokuları, genel nüanslar içeren koku alma ailelerine veya sınıflarına atamaktan oluşur. Mevcut sınıflandırmaların sayısı fazladır, ancak aralarındaki farklılık sınırlıdır. Tipik koku aileleri, genellikle parfüm şirketler veya parfümcüler arasında değişse de ortak olarak narenciye, çiçeksi, yeşil, meyveli, otsu, misk, oryantal, baharatlı, tütün, odunsu, chypre, aromatik ve fougère koku aileleri kullanılmaktadır. Bu terimler, koku türünün tanımlayıcıları olarak görülebilir ve yalnızca birkaçından bahsetmek gerekirse, genellikle ağır veya hafif, keskin veya yuvarlak gibi kalite terimleriyle yan yana gelir. Bu isimlendirmenin terminolojiye aşina olmayan tipik bir tüketici tarafından yorumlanmasının zor olduğunu vurgulamak önemlidir. Uzman olmayan kişiler genellikle kokuları daha geleneksel terimler ve bazı anılarına veya deneyimlerine benzeyen ifadeler kullanarak sınıflandırır. Bununla birlikte, parfümcüler arasında bile hangi koku ailelerinin kullanılması gerektiği veya algılanan kokuların hangilerine dahil edilmesi gerektiği konusunda tam bir anlaşma yoktur. Yani, bu yönde yapılan bazı çabalara rağmen, koku verici tanımlayıcılar için yaygın olarak kabul edilen bir sözlük yoktur (Ellena, 1987).

Kokuların yorumlanması ve ayırt edilmesi, saf kimyasallar için karmaşık karışımlardan daha kolay görünmektedir (Gilbert, 2008). Bir sınıfın veya ailenin belirli koku karışımlarına atfedilmesi, tek kimyasallara göre (örneğin, kahve karışımları veya uçucu yağlar) daha basit hale gelebilir. Gerçek şu ki, ilkinde burun tarafından tanımlanan sadece sınırlı sayıda bileşen iken, arka planda kalanlar ihmal edilmektedir (Laing, 1987.). Kısacası, tek tek kimyasalların sınıflandırılması, karışımlar için olduğundan daha özlü, eksiksiz ve tüm karakteri açısından doğru olabilir (Jinks, 2001.).

1.7. Esans Kompozisyonları Oluşturma İlkeleri

Esans kompozisyonunun tasarlamasının ilk aşamasında, kokunun yönü ve doğası belirlenir, kokulu maddelerin bir gösterge listesi hazırlanır. Daha sonra kompozisyonun “omurgası” seçilir. Parfümeride "esans omurgası" terimi, bileşimin ana kokusunu veya karakterini belirleyen, koku bakımından benzer veya farklı bir dizi aromatik madde olarak anlaşılır. Ana koku, iki, üç ve nadiren dört kokunun birleşiminden oluşur. Örneğin, bileşimin önde gelen kokusu, sedir, incir ve fesleğen kombinasyonundan oluşabilir.

Ardından, çiçek veya eşdeğer kokuların önceden seçilmiş komplekslerinden (bölümlerinden) oluşan uyumlu bir dolgu ve “motif” seçilir. Motif altında, kokunun özel karakteri veya “rengi” anlaşılır. Örneğin, gül yağına, gül kokusunun boğulmayacağı ve ikinci karakter kokusunun göze çarpmayacağı kadar miktarda vanilya eklerseniz, gülün kokusu vanilya ile yumuşatılır. Uyumlu dolgu, kompozisyonun doğasını değiştirmeden esans omurgasını zenginleştiren ek kokulardan oluşan bir komplekstir. Örneğin, gül esansiyel yağının kokusunu alırsanız, monoton aroması kısa sürede çekiciliğini kaybeder. Bunun nedeni, doğada bir çiçeğin kokusunun tek başına hissedilmemesi, her zaman yaprak, gövde ve çevre kokularının eşlik etmesidir. Bir parfüm bileşimi derlenirken seçilmesi gereken ahenkli dolgu olan çevredeki kokulardır. Uyumlu dolgunun her bölümde, önde gelen kokusu öne çıkıyor; keskin bir şekilde zıt kokuların bölümleri, doymuş bir kokudan daha hafif olana ve tersi geçiş adımlarıyla bağlanır. Daha sonra, kompozisyonun yapımını tamamlamak için gerekli olan kompozisyon arka plana uygulanır, kokunun bütünlüğü, uyumu ve benzersizliği yanılsamasını yaratır. Örneğin yoncanın kompozisyonu hoş kokulu sentetik bir karışımı andırırken, fona yasemin veya gül eklendiğinde kompozisyon doğal çiçek kokusuna yaklaşır. Kolonyalar arka plan olarak ferahlatıcı kokular kullanır. Meyvemsi kokular için, meyvemsi aromalara sahip esterler zorunlu bir arka plandır. Bir parfüm bileşimi oluşturmanın son adımı, gerekirse bir sabitleyicinin eklenmesidir.

Parfüm bileşimlerinin hazırlanması aşağıdaki aşamalardan oluşur:

- Bileşim bileşenlerinin formülasyona göre tartılması;
- Viskoz ve katı maddelerin erimesi veya çözünmesi;
- Bileşimin bileşenlerinin karıştırılması.

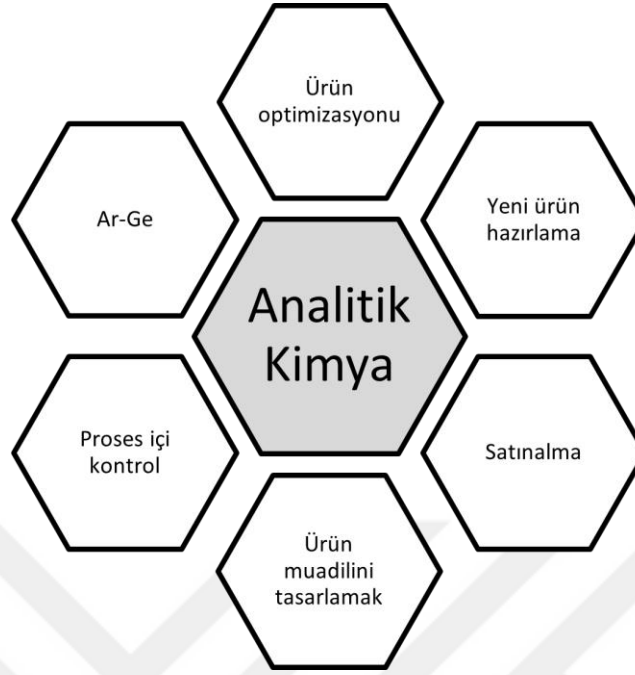
Bir kompozisyon oluştururken, kompozisyonun her bir bileşeninin miktarını gösteren bir formülasyon hazırlanır.

Viskoz kıvamdaki esanslar (ekstraksiyon yağları), erime noktasının biraz üzerindeki bir sıcaklıkta önceden ısıtılır. Katı kristalli maddeler, bu bileşimin sıvı bileşenlerinden birinde ısıtılarak çözülür. Daha sonra, biraz soğuduktan sonra (kristallerin çözeltiden çökmesine yol açtığı için karıştırma sırasında keskin bir sıcaklık düşüşünü önlemek için), bu maddeler bileşimin geri kalan bileşenleri ile karıştırılır. Kokulu maddeler tartılıp karışıma hazırlanırken reaktöre boşaltılır ve karıştırılır. Bileşime dahil edilen tüm kokulu

maddeler karıştırıldıktan ve düzenleyici ve analitik belgelere göre kalite değerlendirmesinin olumlu sonuçları ve parfümcünün onayına göre, karışım sevk edilmek üzere ambalajlara aktarılır.

1.8. Esans Kompozisyonlarının Analizi

Çoğu koku biyolojik kökenlidir ve bu nedenle genellikle ayrılmayı gerektiren çok çeşitli kimyasal ve fiziksel özelliklere sahip karmaşık kimyasal karışımlardan oluşur. Ek olarak, esans aktif maddeleri tipik olarak, analizi kolaylaştırmak ve ilgili bileşiklerin konsantrasyonunu araçsal tespit limitlerinin üzerine çıkarmak için ilgili bileşiklerin ekstraksiyonunu ve konsantrasyonunu gerektiren mikro bileşenlerdir. Analiz sürecinin amacı, doğasını (nitel analiz) veya miktarlarını (kantitatif analiz) belirlemek için bir ekstraktı bileşen kimyasallarına ayırmaktır. Esans endüstrisinde, elde edilen veriler bir şirket içindeki çeşitli gruplar tarafından belirli ihtiyaçları karşılamak için kullanılır. Örneğin, satın alma kararları, bir malzemenin kimlik, orijinallik, kimyasal saflık ve genel bileşen profili standartlarını içerebilecek belirli analitik spesifikasyonları karşılama kabiliyetine dayalıdır. İmalat sektörü, süreçleri kontrol etmek ve ekipman etkinliğini değerlendirmek için analitik bilgilere güvenir. Araştırma grupları, beklenen bir reaksiyonun eksiksizliğini ölçmek için benzersiz kimyasalları belirleme ve ölçme becerisine ihtiyaç duyar. Kalite kontrol grupları, tutarlı bir koku profilini sürdürmek ve ara sıra ortaya çıkan kötü kokuları belirlemek için başlıca koku etkisi bileşiklerini belirlemekle en çok ilgilenecektir. Şekil 1.2, analitik kimyanın koku şirketinin neredeyse her yönüyle nasıl ilişkilendirildiğini göstermektedir.



Şekil 1.3 Analitik kimyanın etkilediği şirket departmanları

Analitik metodolojinin bolluğu, karmaşıklığı ve uygulaması, ilgili bilgisayar donanımı ve yazılımı ile enstrümantal teknolojilerin ilerlemesiyle önemli ölçüde artmıştır. Hemen hemen tüm modern enstrümanlar, enstrümantal süreçleri kontrol etmek ve verileri kaydetmek için bilgisayarlar kullanır, böylece gözetimsiz analiz ve otomasyona izin verir. Modern analitik laboratuvarlar tipik olarak iz analizi yapabilen çok çeşitli enstrümantasyonla donatılmıştır. Geleneksel koku analizi, fiziksel, kimyasal ve duyuşal özelliklerin değerlendirilmesini içerir. Gaz ve sıvı kromatografisinden önce, klasik yöntemler renk ve berraklık gibi temel fiziksel niteliklere odaklanıyordu. Bu araçlar, uçucu yağların ve diğer koku malzemelerinin orijinalliğini belirlemek için kullanıldı. Günümüzde yöntemler, akla gelebilecek her matristeki tek tek kimyasalları tanımlamak ve ölçmek için özel olarak uyarlanmıştır. Fizikselden kimyasal öznitelik değerlendirmesine bu geçiş, belirli bileşenler için daha fazla enstrümantal seçicilik, geliştirilmiş detektör hassasiyeti ve bilgisayar kontrollü enstrümantal otomasyon nedeniyle mümkün olmuştur (Goodner ve Rouseff, 2011).

Koku endüstrisi için önemli olan ürünlerin bir takım fiziksel özellikleri vardır. Genel olarak, ürünün görünümü, yanıcılığı ve konsantrasyonu en önemlilerinden bazılarıdır ve sıklıkla ölçülür. Zaman içerisinde koku analizleri için çok sayıda teknik geliştirilmiş ve

uygulanmıştır. Bir kısmı ya daha hızlı ya da daha kolay uygulanabilen tekniklerle değiştirilirken, diğer yöntemler önemini korumuş ve sürekli olarak iyileştirilmiştir (Kubeczka, 2020).

1.8.1. Yoğunluk

Yoğunluk, sabit bir hacimdeki malzemenin ağırlığıdır ve genellikle santimetreküp başına gram olarak ifade edilir. Özgül ağırlık, 1 g/cc olan suyun yoğunluğuna göre bir malzemenin yoğunluğudur. Bu testin gerçekleştirilmesi kolaydır ancak birçok farklı sıvı ve sıvı karışımı aynı yoğunluğa sahip olacağından nispeten az bilgi sağlar. Numunenin yoğunluğu standardın yoğunluğuna uymuyorsa, numune standart ile aynı bileşime sahip değildir. Bununla birlikte, standart ile aynı yoğunluğa sahipse, bunun tersi geçerli değildir ve numune, standartla aynı olabilir veya olmayabilir. Bu nedenle genellikle diğer testlerle birlikte kullanılır. Yoğunluk genellikle doğru olarak dağıtılmış bir sıvı hacminin doğru bir şekilde tartılmasıyla ölçülür. Yoğunluk sıcaklığa göre değişir, bu nedenle ölçümün yapıldığı sıcaklık kaydedilmelidir (Sell, 2019).

1.8.2. Kırılma indisi

Kırılma indisi, bir maddede ışık hızının ne kadar azaldığının bir ölçüsüdür. Işık bir ortamdan diğerine geçerken yön değiştirir. İki ortam boyunca ışığın hızındaki fark ne kadar büyükse, gözlemlenen açı o kadar büyük olur. Kırılma indeksi, geçirgenlik veya yansıma ölçümü kullanılarak elde tutulan ve tezgah üstü arasında değişebilen bir refraktometre kullanılarak ölçülür. Kırılma indisi bir maddenin doğal bir özelliği olduğundan, özellikle kalite güvence ve kalite kontrol tipi bir departmanlarda numunelerin saflığını doğrulamak için yaygın olarak kullanılır. Kırılma indisinin özellikle yaygın bir kullanımı, sulu çözeltilerin konsantrasyonunu ölçmektir. Bir çözeltinin kırılma indisi, çözünen maddenin konsantrasyonu değiştikçe değişecektir. Bu ilişki ölçülebilir ve kırılma indisinden konsantrasyonu belirlemek için kullanılabilir (Born ve Wolf, 2000).

1.8.3. Viskozite

Bir ürünü tarif etmek için birçok fiziksel özellik yararlı olsa da muhtemelen analiz için daha önemli olanlardan biri viskozitedir. Viskozite çok yüksekse birçok pompa ve diğer

ekipman çalışmayacaktır. Viskozite, bir ürünün akışkanlığının bir ölçüsüdür. Viskozite ne kadar düşük olursa, ürün o kadar kolay akacaktır. Viskozite, cam eşyalardan tezgah üstü ünitelere kadar değişebilen bir viskozimetre ile ölçülebilir. Viskozite genellikle sentipoz birimlerinde rapor edilir. Bununla birlikte, viskozitenin bu açıklaması, gerçekten bu geniş konunun yüzeyini gözden geçirmektir. Kitapların tamamı yalnızca viskozite üzerine yazılmıştır ve viskozitenin ürünleri için önemli olup olmadığı araştırılmalıdır (Symon, 1971).

1.8.4. Parlama Noktası

Bir malzemenin parlama noktası, bir maddenin numunesinin açık bir aleve maruz kaldığında tutuştuğu sıcaklıktır. Taşıma ve depolama sırasında güvenlik amacıyla kullanılır. Bir sıvının parlama noktasını ölçmek için, numune kapalı bir kaba yerleştirilir ve önceden belirlenmiş bir sıcaklığa kadar ısıtılır. Kabin kapağı açılır ve aynı zamanda alev, sıvının üzerindeki buhar boşluğuna yönlendirilir. Sıvının sıcaklığı parlama noktasını aşarsa, buharlar genellikle pilot alevi söndürmek için yeterli güçle tutuşur. Bu işlem, parlama noktasına ulaşılan kadar farklı sıcaklıklarda tekrarlanır (Sell, 2019).

1.8.5. GC-MS

Gaz kromatografisinin kütle spektrometresi (GC-MS) ile kombinasyonu, koku analizinde muhtemelen en güçlü tek araçtır. Bir GC-MS cihazında, numune, bir GC cihazı aracılığıyla kütle spektrometresine verilir. Böylece, uçucu yağlar veya kokular gibi organik kimyasalların karmaşık karışımları, bir GC'den geçirilebilir ve böylece ayrı ayrı bileşenlere ayrılabilir, bunlar daha sonra bir kütle spektrometresi kaynağına beslenir ve bilinen bileşiklerin spektrum kitaplıklarıyla karşılaştırılır. Kimyasal bileşenlerin çoğu analist tarafından zaten bilineceğinden, bunların GC alıkonma süresi ve kütle spektrumunun standartlarla karşılaştırılması genellikle pozitif bir tanımlama sağlayacaktır. Kütle spektrumlarının elde edilmesi ve bir kitaplıkla karşılaştırılması o kadar hızlıdır ki, numuneler GC kolonundan ayrıştırılırken yapılabilir. Böylece, bir saatten daha kısa bir sürede, bir koku veya uçucu yağ, her biri tanımlanarak ve GC'deki pik alanlarından nicel oranlarda belirlenerek yüzlerce bileşenine ayrılabilir (Sell, 2019).

1.9. Amaç

Bu tez çalışmanın amacı, gizemli olduğu kadar da karmaşık endüstrisinin araştırma ve geliştirme sürecinde kullanılan analitik yöntemleri incelemek ve değerlendirmektir. Esans tasarım mesleği bilgi açısından en gizli mesleklerden biridir ve esans sektöründe uygulanan analitik metotlar hakkında bilgi edinmek oldukça zordur (Charles, 2008). Çalışmada tasarlanan esans kompozisyonu deneyim ve sanatsal bakış açısından esinlenmiş olsa da analitik kimya süreçleri oldukça önemli yer almaktadır. Tez çalışmasında anlatılan ve uygulanan yöntemler gelecek çalışmalara ışık tutacak niteliktedir. Hammadde ve üretim tesislerin yeteri sayıda olmasına rağmen bugüne kadar Türkiye’de esans üretimi ve tasarımı hakkında yüksek öğretim kapsamında herhangi çalışma yapılmamıştır (Ulusal Tez Merkezi, 2022). Bilimsel araştırmalarının ve geliştirmelerinin sayesinde Türkiye’de bu sektörün çok güçleneceğini ve yerli kaynakların daha verimli şekilde kullanılmasına olanak sağlayacaktır.

2. MATERİYAL VE YÖNTEM

2.1. Materyal

2.1.1. Kullanılan hammaddeler

Esans kompozisyonu hazırlık ve deneme aşamasında Tablo 2.1'deki hammaddeler kullanılmıştır.

Tablo 2.1 Çalışmada kullanılan hammaddeler

İsim	INCI isim	Cas No	Tedarikçi
bergamot oil	<i>Citrus bergamia mellarosa</i> peel oil expressed	92704-01-3	Indukern
β -ionone	4-(2,6,6-trimethylcyclohexen-1-yl)but-3-en-2-one	14901-07-6	Lluch
cedar leaf oil	<i>Thuja orientalis</i> leaf oil	91770-83-1	Lluch
cedarwood atlas oil	<i>Cedrus atlantica</i> wood oil	8023-85-6	Lluch
cedarwood chinese oil	<i>Cupressus funebris</i> wood oil	85085-29-6	Aromax
cis-3-hexenol	(Z)-hex-3-en-1-ol	928-96-1	Ventos
cis-3-hexenyl acetate	[(Z)-hex-3-enyl] acetate	3681-71-8	Firmenich
clove oil	<i>Syzygium aromaticum</i> L. leaf extract	84961-50-2	Ventos
coumarin	1-Benzopyran-2-one	91-64-5	Ventos
cumin oil %10 in dpg	<i>Cuminum cyminum</i> L. fruit extract %10 in DPG	84775-51-9	Ventos
cyclamen aldehyde	2-methyl-3-(4-propan-2-ylphenyl)propanal	103-95-7	Lluch
δ -3-carene	3,7,7-trimethylbicyclo[4.1.0]hept-3-ene	13466-78-9	Ventos
dihydromyrcenol	2,6-dimethyloct-7-en-2-ol	18479-58-8	Lluch
eucalyptus oil	eucalyptus globulus leaf oil	8000-48-4	Lluch
galaxolide %50 in IPM	1,3,4,6,7,8-hexahydro-4,6,6,7,8,8-hexamethylcyclopenta(g)-2-benzopyran %50 in IPM	1222-05-5	Lluch
γ -methyl ionone	(E)-3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohex-2-enyl)but-3-en-2-one	127-51-5	Lluch
γ -octalactone	5-butyloxolan-2-one	104-50-7	Lluch
γ -undecalactone	5-heptyloxolan-2-one	104-67-6	Indukern
γ -nonalactone	5-pentyloxolan-2-one	104-61-0	Trealt
herbanate	Ethyl 3-isopropylbicyclo[2.2.1]hept-5-ene-2-carboxylate	116126-82-0	Indukern
iso e super	1-(2,3,8,8-tetramethyl-1,3,4,5,6,7-hexahydronaphthalen-2-yl)ethanone	54464-57-2	Indukern

Tablo 2.2 (devam)Çalışmada kullanılan hammaddeler

İsim	INCI isim	Cas no	Tedarikçi
isobornyl acetate	[(1R,4S,6R)-1,7,7-trimethyl-6-bicyclo[2.2.1]heptanyl] acetate	125-12-2	Ventos
lavandin grosso oil	<i>Lavandula hybrida</i> grosso herb oil	8022-15-9	Ventos
phenethyl alcohol	Phenethyl alcohol	60-12-8	Ventos
sandalwood accord	Elso Kimya tarafından geliştirilmiş akor	yok	Elso Kimya
spearmint oil	<i>Mentha viridis</i> oil	84696-51-5	Lluch
stemone	N-(5-methylheptan-3-ylidene)hydroxylamine	22457-23-4	Lluch
styrallyl acetate	1-phenylethyl acetate	93-92-5	Lluch
triplal	2,4-dimethylcyclohex-3-ene-1-carbaldehyde	68039-49-6	Lluch
undecavertol	(E)-4-methyldec-3-en-5-ol	81782-77-6	Lluch
vertofix	1-[(1R,2R,5S,7R)-2,6,6,8-tetramethyl-9-tricyclo[5.3.1.0 ^{1,5}]undec-8-enyl]ethanone	32388-55-9	Lluch

2.1.2. Kullanılan cihazlar

Hassas Terazi: Bu çalışmada kullanılan kimyasalların tartımı, 0,01 g hassasiyetli Swock YP 20002 marka ve model terazi ile yapılmıştır.

Parlama Noktası Test Cihazı: Bu çalışmada parlama noktası ölçümü Eralytics Eraflash EF10 marka ve model parlama noktası test cihazı ile yapılmıştır.

Refraktometre: Bu çalışmada kırılma indisi ölçümü KRÜSS DR6000-T marka ve model refraktometre cihazı ile yapılmıştır.

Dansimetre: Bu çalışmada yoğunluk ölçümü Anton Paar DMA 35 Version 3 marka ve model dansimetre ile yapılmıştır.

Manyetik karıştırıcı: Bu çalışmada karıştırma işlemi Daihan SMHS-6 çoklu manyetik karıştırıcı ile yapılmıştır.

2.2. Yöntem

2.2.1. Parlama noktası

Cihazın ön tarafında bulunan koruma kapağı açılır ve numune haznesi cihaz dışına çıkartılır. Numune haznesinin içine 2ml esans eklenir ve numune haznesi geri

yerleştirilerek koruma kapağı kapatılır. Cihaz parlama noktasına ulaştıktan sonra verileri kaydedip soğuma aşamaya geçer ve numune alanını sıcaklığı 25 °C olduğunda sesli bildiri vermektedir. Cihaz ekranına parlama noktası değeri yansıtılır.

2.2.2. Kırılma indisi

Cihazın üstünde bulunan numune haznesine 1 ml esans konulur ve koruma kapağı ile kapanır. Ölçüm otomatik olarak 10 defa tekrarlanır ve ölçüm sonucu ekrana yansıtılır. Yansıtılan değer esansın kırılma indisidir.

2.2.3. Yoğunluk

Ölçüm öncesi esansın sıcaklığı 20 °C olduğuna dair kontrol edilir. Cihaz içindeki hazne esans ile tamamen doldurulur. Otomatik ölçme tamamlanınca cihaz esansın yoğunluğunu göstermektedir.

2.2.4. Esans kompozisyonunun hazırlanması

Hazırlanacak esans hedef hacminin iki katı büyüklüğünde beher içinde hazırlanır, içine etil alkol ile temizlenip kurutulan ve kokusuz olduğuna dair kontrol edilen manyetik balık eklenir. Karıştırıcı aktif duruma getirilerek kademeli olarak hızlandırılır. Karıştırıcının hızı esans içinde hava baloncukları oluşturmayacak şekilde ayarlanır. Karıştırma işlemi esans tamamen homojen görüntü alana kadar devam edilir, karıştırma süresi esans karışımındaki katı hammaddelerin miktarına bağlı olarak değişiklik göstermektedir.

2.2.5. Esans kompozisyonunun karıştırılması

Esans kompozisyonun hazırlanma metodu 65 yıllık parfümör Jean Carles'in geliştirdiği yöntemeye dayamaktadır (Carles, 2008). Esans omurgasında kullanılacak ürünler farklı oranlarda birbiri ile karıştırılarak homojen karışımlar hazırlanır. Bu karışım oranlanması başta iki ürünle başlar ve her sonraki adımda yeni eklenen ürün ile oranlama işlemi tekrarlanır. Esans omurgasının kokusu onaylandıktan sonra tamamlayıcı kokuların hammaddeleri eklenir. Bu aşamada herhangi yapay analitik cihaz kullanılmasa da doğa tarafından verilen en iyi koku analiz cihazı olan burun kullanılmaktadır.

3. BULGULAR VE TARTIŞMA

3.1. Esans Kompozisyonu İçin Ana Motifin Belirlenmesi

Esans tasarım sürecindeki en önemli iki analiz koku ve kimyasal analizlerdir. Parfümün birinci başarı kriteri, kullanıcıların koku taleplerini karşılaması, ikinci başarı kriteri ise üründen beklenen kimyasal performansı sağlamasıdır. Bu aşamada ürün, kimyasaldan çok koku açısından analiz edilir. Çalışma kapsamında hedeflenen doğal yağların kullanımının gerçekleştirilmesi için tasarlanacak ürünün ana motifi olarak bitki kokularının alınmasına karar verilmiştir.

Çeşitlilik ve tercih parametreleri göz önünde bulundurularak esans kompozisyonunun motifinin açılış notasında limon, bergamot ve lavanta arasından lavanta seçilmiştir. Lavanta tercih nedenleri arasında Elso Kimya'nın pazarlama departmanından müşteri talep analizi ve diğer iki seçenek ile çalışmaların fazlalığı gelmektedir.

Lavanta kokusunun bitkisel ve odunsu kokusunu devam ettirmek için temel kompozisyonun devamı olarak paçuli ve sedir kokuları arasında seçim yapılması gerekmektedir. Paçuli bitkisinin kokusunu verecek esans bileşimlerinde, genellikle paçulinin doğal esansiyel yağı ve patchoulol molekülüdür. Ancak sedir kokusunu vermek için hem doğal uçucu yağ (Cedarwood Atlas resinoid, Cedarwood oil Atlas, Cedarwood oil East Africa, Cedarwood oil Himalaya, Cedarwood oil Japanese, Cedarwood oil Lebanon, Cedarwood oil Port Orford, Cedarwood oil Texas, Cedarwood oil China, Cedarwood oil Virginia, Cedarleaf oil Canada) (Arctander, 1960) hem de moleküller halinde (cedrenyl acetate, cedryl acetate, cedrol, cedrene, tujosphen, iso E Super, vertofix, amber max, boisambrene forte, cysolide, cyclacet, piconia, plicatone, vs.) (Arctander, 1967) birçok farklı ham madde vardır.

Son olarak motifi doğal ve bitkisel bir koku ile tamamlamak için sandal ağacı kokusu seçilmiştir. Sandal ağacı yağının maliyetinin yüksek olması nedeniyle daha önceki çalışmalarda hazırladığım sandal ağacı akorunun kullanılmasına karar verildi. Hazırlanacak esans kompozisyonunun ana motifi olarak bu üç koku seçilmiştir.

3.2. Tamamlayıcı Kokularının Belirlenmesi

Seilen omurgaya yakışacak tamamlayıcı kokuları seçmek, omurganın oluşumu kadar önemli bir işlemdir. Tamamlayıcı kokular doğru seçildiğinde karışımındaki ham maddeler homojen bir şekilde buharlaşarak pürüzsüz buharlaşmayı ve esans bileşiminin algılanmasını etkiler.

Açılış kokusu olarak seçtiğimiz lavanta için tamamlayıcı koku olarak lavanta kokusunun bitkisel notalarını destekleyecek kokular seçilmelidir. Bu nedenle lavanta tamamlayıcı kokular olarak bergamot, çimen ve okaliptüs kokuları seçilmiştir. Genellikle doğal esansiyel yağların yüksek buharlaşma hızı ve bu kokuları veren moleküler buharlaşma nedeniyle lavanta kokusuna yakın bir buharlaşma hızına sahiptirler. Böylece bu kokular aynı süre ve hızda buharlaşacaktır.

Sedir kokusunun odun, baharat ve reçine kokularını tamamlayan kokular, sedir kokusunun tamamlayıcı kokusu olarak seçilmelidir. Odunsu kokusunu tamamlamak için karanfil ve sedir yaprakları, baharatlı kokusunu tamamlamak için kimyon ve reçine kokusunu tamamlamak için iris kökü seçilmiştir. Seçilen kokuları verecek doğal esansiyel yağlar ve moleküller, ilk omurga kokusu olarak seçilen lavanta ve tamamlayıcı kokularından daha düşük buharlaşma hızına sahip olmalıdır, bu nedenle bu tamamlayıcı kokular, sedir notası ile aynı zaman diliminde buharlaşacaktır.

Son olarak sandal ağacı kokusuna eşlik edecek tamamlayıcı kokular seçildi. Sandal ağacı kokusunun dip nota olarak belirlenmesinin sebebi ise kokuyu veren moleküllerin diğer moleküllere göre daha ağır olması ve buharlaşma hızının daha düşük olmasıdır. İnsan burnu 20'ye kadar karbon içeren moleküllerin kokusunu algılayabilir, bundan daha büyük moleküller insanlara kokusuz gelmeye başlar (Turin, 2007). Sandal ağacı kokusuna eşlik edecek kokular da aynı odunsu yumuşaklıkta ve tatlılıkta olmalıdır. Bunun için odunsu ve tatlı bir odunsu koku seçilecektir. Odunsu koku olarak galbanum sakızı, tatlı odunsu koku olarak tonka fasulyesi seçilmiştir. Bu iki kokuyu ve doğal uçucu yağları veren moleküller yüksek moleküler ağırlığa sahip olduklarından sandal ağacı kokusu ile aynı sürede buharlaşacaktır.

3.3. Kullanım Alanlarının Belirlenmesi

Esanslar günlük hayatımızda her yerde bulunur, ancak her kullanım için uçucu yağlardan beklenen performans standartları vardır. Üretim sırasında ısıtma işlemi uygulanan alanlarda kullanılacak esans bileşimi, yüksek sıcaklık (90-150 °C) uygulamalarında hızlı buharlaşmamalıdır. Asidik veya alkali ürünlerde kullanılan esanslar, ürünün agresif ortamında stabil olmalıdır. Doğal esansiyel yağlar farklı kimyasal özelliklere sahip moleküller içerdiğinden agresif kullanımlara uygun değildir. Dolayısıyla bu ürünler için en uygun kullanım alanları olacak kadar reaktif olmayan son ürünlerdir. Bu şartlara uygun kullanım alanlarına mumlar, bambu çubuklu oda kokulandırıcı ve kolonyalar gösterilebilir. Her ürünün esans bileşimi ile homojen bir karışım oluşturması ve ürün yapısını bozmaması için uygun çözücünün kullanılması gerekmektedir. Çözücü seçimi, esans üreticilerinin bilimsel ve deneysel sonuçlarına göre yapılmış olup, Elso Kimya veri tabanı kullanılmıştır. Mum için isopropyl myristate, bambu çubuklarla kokulu ortam için methoxymethyl butanol ve etil alkol, kolonya için alkol ve su seçilmiştir.

3.4. Esans Omurgasının Oluşturulması

Esans tasarım sürecindeki bu adımın bilimsel kararlardan ziyade sanatsal görüşlere ve mesleki deneyimlere dayandığına inanılmaktadır. Ama tecrübe deneme bilginin deneme yanılma yöntemiyle oluşan hammaddeler hakkında analitik bilgiden başka bir şey değildir. Esansın omurgası olarak adlandırılan karışım, keskin ve kendine özgü kokuları olmayan ve ürün kullanım süreci boyunca buharlaşmaya devam edecek olan doğal uçucu yağlar ve hammaddelerden oluşmaktadır. Bu karışımın temel amacı, ürünün beklenen kullanım süresi boyunca havaya buharlaşarak koku oluşturmaktır.

İlk adımda belirlenen koku omurgasının ilk notasını oluşturmak için lavanta kokusunu veren ürünler incelenmiştir. Koku tasarımında yaygın olarak kullanılan lavanta kokusunu veren veya lavanta kokusunu oluşturmak için yüksek oranda kullanılan ürünler Tablo 3.1'de sıralanmıştır. Tabloda ilk 5 ürün doğal esansiyel yağlar iken, bunu takip eden diğer ürünler ise moleküllerdir (ürünlerde üretim sırasında oluşabilen eser miktarda yan ürünler de bulunmaktadır). Listelenen moleküller doğal uçucu yağlarda bulunmasına rağmen ayrı ayrı da kullanılmaktadır (Bernard ve ark., 1989). Ürünün ilk notalarının buharlaşmasının koku açısından doğaya daha yakın olması ve doğal esansiyel yağın içeriğini değiştirmek

için lavanta kokusunu veren ürünler listesinden Lavandin oil Grosso ve isobornyl acetate seçilmiştir.

Tablo 3.1 Lavanta kokusunu veren bazı hammaddeler

Cas numarası	Genel isim	INCI isim
8022-15-9	Lavandin oil Grosso	<i>Lavandula hybrida</i> grosso herb oil
684214-37-7	Lavender absolute	Lavender absolute seville
8000-28-0	Lavender 40/42	<i>Lavandula angustifolia</i> L. herb oil
78-70-6	Linalool	3,7-dimethylocta-1,6-dien-3-ol
115-95-7	Linalyl acetate	3,7-dimethylocta-1,6-dien-3-yl acetate
78-36-4	Linalyl butyrate	3,7-dimethylocta-1,6-dien-3-yl butanoate
115-99-1	Linalyl formate	3,7-dimethylocta-1,6-dien-3-yl formate
125-12-2	Isobornyl acetate	[(1R,4S,6R)-1,7,7-trimethyl-6-bicyclo[2.2.1]heptanyl] acetate
10385-78-1	Isoborneol	1,7,7-trimethyl bicyclo(2.2.1)heptan-2-ol
470-82-6	Eucalyptol	4,7,7-trimethyl-8-oxabicyclo[2.2.2]octane
20126-76-5	Terninen-4-ol	(1R)-4-methyl-1-propan-2-ylcyclohex-3-en-1-ol

Esans omurgasında belirlenen ikinci koku ise sedir kokusu olup, ikinci adımda bu kokuyu verecek ürünler seçilmiştir. Sedir kokusunu veren ürünlerden bazıları Tablo 3.2'de listelenmiştir. Ürün sayısı oldukça fazladır ve bazı kokular arasındaki fark sadece yüksek konsantrasyonlarda fark edilir. Örneğin, Cedarwood oil Texas %30,70 α -cedrene ve %19 cedrol içerirken Cedarwood oil Virginia %21,10 α -cedrene ve %22,20 cedrol içerir (Adams, 1991). Esans karışımında eser miktarda bulunduğunda bu iki yağ arasında fark bulmak çok zordur, esans karışımında molekül olarak eklenen α -cedrene veya cedrol varsa bu imkansızdır. Bu nedenle sedir kokusu seçilirken koku karakteri ile birlikte kullanılacak ürünün satın alma kolaylığı ve fiyatı göz önünde bulundurulmuştur. 2022 Kasım ayı itibarı ile fiyat ve teklif seçenekleri değerlendirildiğinde en uygun yağ olarak Cedarwood oil China seçilmiştir. Sedir kokusunu verecek olan sentetik ürün, doğal esansiyel yağı ile birlikte eklendiğinde, doğal esansiyel yağın buharlaştığı veya koku gücünün yeterli olmadığı durumlarda sedir kokusunun verilmesi sağlanacaktır. Bunun için kullanıcılar tarafından parfüm kokusu olarak bilinen bir kokuya sahip olan ve parfüm endüstrisinde yaygın olarak kullanılan (Stepanyuk ve Kirschning, 2019) Iso E Super molekülü kullanılmıştır.

Tablo 3.2 Sedir kokusunu veren bazı hammaddeler

Cas no	Genel isim	INCI isim
8023-85-6	Cedarwood oil Atlas	<i>Cedrus atlantica</i> wood oil
68991-36-6	Cedarwood oil Himalaya	<i>Cedrus deodara</i> (roxb.) loud. wood oil
91771-60-7	Cedarwood oil Japanese	<i>Cryptomeria japonica</i> d. don. wood oil
89997-33-1	Cedarwood oil Lebanon	<i>Cedrus libani</i> wood oil lebanon
264201-23-2	Cedarwood oil Port Orford	<i>Chamaecyparis lawsoniana</i> wood oil
68990-83-0	Cedarwood oil Texas	<i>Juniperus mexicana</i> wood oil
85085-29-6	Cedarwood oil China	<i>Cupressus funebris</i> wood oil
8000-27-9	Cedarwood oil Virginia	<i>Juniperus virginiana</i> wood oil
8007-20-3	Cedarleaf oil	<i>Thuja occidentalis</i> l. leaf oil
1405-92-1	Cedrenyl acetate	(3R-(3 α ,3 β ,7 β ,8 α))-2,3,4,7,8,8a-hexahydro-3,8,8-trimethyl-1H-3a,7-methanoazulene-6-methyl acetate
77-54-3	Cedryl acetate	[(1S,2R,5S,7R,8R)-2,6,6,8-tetramethyl-8-tricyclo[5.3.1.0 ^{1,5}]undecanyl] acetate
77-53-2	Cedrol	(1S,2R,5S,7R,8R)-2,6,6,8-tetramethyltricyclo[5.3.1.0 ^{1,5}]undecan-8-ol
469-61-4	α -cedrene	(3R-(3 α ,3 β ,7 β ,8 α))-2,3,4,7,8,8a-hexahydro-3,6,8,8-tetramethyl-1H-3a,7-methanoazulene
470-40-6	Thujopsene	(1aS,4aS,8aS)-2,4a,8,8-tetramethyl-1,1a,4,5,6,7-hexahydrocyclopropa[j]naphthalene
54464-57-2	Iso E Super	1-(2,3,8,8-tetramethyl-1,3,4,5,6,7-hexahydronaphthalen-2-yl)ethanone
32388-55-9	Vertofix	1-[(1R,2R,5S,7R)-2,6,6,8-tetramethyl-9-tricyclo[5.3.1.0 ^{1,5}]undec-8-enyl]ethanone
929625-08-1	Amber max	2(2,2,7,7-tetramethyltricyclo[6.2.1.0 ^{1,6}](1,6)undec-5-en-5-yl)propan-1-ol+2-(2,2,7,7-tetramethyltricyclo[6.2.1.0 ^{1,6}](1,6)undec-4-en-5-yl)propan-1-ol
58567-11-6	Boisambrene forte	ethoxymethoxycyclododecane
13171-00-1	Crysolide	1-(6-tert-butyl-1,1-dimethyl-2,3-dihydroinden-4-yl)ethanone
54830-99-8	Cyclacet	3-tricyclo[5.2.1.0 ^{2,6}]dec-3-enyl acetate
23787-90-8	Piconia	2,2,7,7-tetramethyltricyclo[6.2.1.0 ^{1,6}]undecan-5-one
41724-19-0	Plicatone	octahydro-7-methyl-1,4-methanonaphthalen-6(2H)-one

Sandal ağacı kokusu sıralamada son sırada yer alır ve bilim adamları bu kokuyu veren ham maddeleri elde etmek için onlarca yıldır mücadele etmektedirler (Turin, 2007).

Sandal ağacı kokusu çok sevilse de gerçek sandal ağacı yağının fiyatından dolayı esansiyel bileşimlerde çok nadiren kullanılmaktadır. Bu nedenle, koku tasarımcıları ya bileşimlerinde tek sentetik moleküller kullanırlar (Tablo 3.3) ya da bileşimlerde kullanılmak üzere doğal sandal ağacı yağı yerine geçen bir ürün geliştirirler. Bu çalışmada daha önceki projeler için geliştirdiğim sandal ağacı akoru kullanılmıştır. Sandal ağacı yağı hiç içermemesine rağmen doğal sandal yağına göre 100 kat daha ucuz olduğu için istenilen miktarlarda esansiyel bileşimlerde kullanılabilir. Sedir ağacı kokusunu veren hammaddelerin çoğu çok hafif ve yumuşak bir kokuya sahiptir ve parfüm gibi doğrudan insan derisine uygulanan ürünler dışında pek hissedilmez. Bunu önlemek için sandal ağacı kokusu veren hammaddeler, odunsu koku ve sentetik sandal ağacı kullanılarak sandal ağacı kokusu güçlendirilir. Bu çalışmada takviye ajanı olarak vertofix ve galaxolide (iso propyl myristate içindeki %50 kütlece solüsyonu) molekülleri kullanılacaktır.

Tablo 3.3 Sandal ağacı kokusunu veren bazı hammaddeler

Cas numarası	Geleneksel isim	INCI isim
70788-30-6	timberol	1-(2,2,6-trimethylcyclohexyl)hexan-3-ol
139504-68-0	amber core	1-(2-tert-butylcyclohexyl)oxybutan-2-ol
211299-54-6	ambrocenide	(4aR,5R,7aS,9R)-octahydro-2,2,5,8,8,9a-hexamethyl-4h-4a,9-methanoazuleno(5,6-d)-1,3-dioxole
28219-61-6	bacdanol	(E)-2-ethyl-4-(2,2,3-trimethyl-1-cyclopent-3-enyl)but-2-en-1-ol
67801-20-1	ebanol	(Z)-3-methyl-5-(2,2,3-trimethyl-1-cyclopent-3-enyl)pent-4-en-2-ol
81786-73-4	koavone	(Z)-3,4,5,6,6-pentamethylhept-3-en-2-one
36306-87-3	kephalis	4-(1-ethoxyethenyl)-3,3,5,5-tetramethylcyclohexan-1-one
65113-99-7	sandalore	3-methyl-5-(2,2,3-trimethyl-1-cyclopent-3-enyl)pentan-2-ol
28219-60-5	sandal mysore core	(E)-2-methyl-4-(2,2,3-trimethyl-1-cyclopent-3-enyl)but-2-en-1-ol
70955-71-4	sandela	m-(isocamphyl-5)cyclohexanol
107898-54-4	supersantol	(E)-3,3-dimethyl-5-(2,2,3-trimethyl-3-cyclopenten-1-yl)-4-penten-2-ol
77-42-9	β -santalol	(Z)-2-methyl-5-(6-methyl-5-methylidene-6-bicyclo[2.2.1]heptanyl)pent-2-en-1-ol
41890-92-0	osyrol	7-methoxy-3,7-dimethyloctan-2-ol

Esans omurgası için kullanılacak hammaddeler belirlendikten sonra koku yönünden hoş kokulu bir karışım hazırlamak için denemeler yapılmıştır. Deneylerin amacı, karışımdaki

tüm ürünlerin hissedilmesini sağlamak ancak aynı zamanda karışımdaki hiçbir ürünün bağımsız olarak hissedilmemesidir. İlk karışım denemeleri, Lavandin oil Grosso ile isobornyl acetate arasındaki uygun oranı bulmak için yapılmıştır (Tablo 3.4). Yapılan denemeler sonucunda Lavandin Grosso yağı ile isobornyl acetate arasındaki uygun oran 5:1,5 olarak belirlendi. Bundan sonra bu karışım "Lavanta notası" adıyla kullanılacaktır.

Tablo 3.4 Lavanta notasını oluşturma denemeleri

No	Cas No	Ürün ismi	Miktar	Yorum
1	125-12-2	isobornyl acetate	5	Lavandin grosso oil kokusu çok baskın
	8022-15-9	lavandin Grosso oil	5	
2	125-12-2	isobornyl acetate	5	Lavandin grosso oil kokusu çok baskın
	8022-15-9	lavandin Grosso oil	4	
3	125-12-2	isobornyl acetate	5	Lavandin grosso oil kokusu çok baskın
	8022-15-9	lavandin Grosso oil	3	
4	125-12-2	isobornyl acetate	5	Lavandin grosso oil kokusu çok baskın
	8022-15-9	lavandin Grosso oil	2	
5	125-12-2	isobornyl acetate	5	İki ürünün kokusu dengeli
	8022-15-9	lavandin Grosso oil	1,5	

Sedir Ağacı Çin yağı ve Iso E Super arasındaki uygun oranı bulmak için ikinci karışım denemeleri yapıldı (Tablo 3.5). Yapılan denemeler sonucunda Cedarwood oil China yağı ile Iso E Super arasındaki uygun oran 5:1,6 olarak belirlendi. Bundan sonra bu karışım "Sedir notası" adıyla kullanılacaktır.

Tablo 3.5 Sedir notasını oluşturma denemeleri

No	Cas No	Ürün ismi	Miktar	Yorum
1	85085-29-6	cedarwood Chinese oil	5	Iso E Super kokusu çok baskın
	54464-57-2	iso e super	5	
2	85085-29-6	cedarwood Chinese oil	5	Iso E Super kokusu çok baskın
	54464-57-2	iso e super	4	
3	85085-29-6	cedarwood Chinese oil	5	Iso E Super kokusu çok baskın
	54464-57-2	iso e super	3	
4	85085-29-6	cedarwood Chinese oil	5	Iso E Super kokusu baskın
	54464-57-2	iso e super	2	
5	85085-29-6	cedarwood Chinese oil	5	Iso E Super kokusu zayıf kaldı, hafif arttırılmalı
	54464-57-2	iso e super	1,5	
6	85085-29-6	cedarwood Chinese oil	5	İki ürünün kokusu dengeli
	54464-57-2	iso e super	1,6	

Sandalwood accord, Galaxolide %50 IPM ve Vertofix arasındaki uygun oranı bulmak için üçüncü karıştırma denemeleri yapıldı (Tablo 3.6). İlk iki karışımdan farklı olarak bu karışımda aynı anda üç ürün arasında denge sağlanacak şekilde karışımlar hazırlanmıştır. Yapılan denemeler sonucunda Sandalwood akordu, Galaxolide %50 IPM ve Vertofix arasında uygun oran 5:10:10 olarak belirlendi. Bundan sonra bu karışım "Sandal ağacı notası" adıyla kullanılacaktır.

Tablo 3.6 Sandal ağacı notasını oluşturma denemeleri

No	Cas No	Ürün ismi	Miktar	Yorum
1	-	sandalwood accord	5	Koku yeterince güçlü hissedilmedi
	1222-05-5	galaxolide %50 in ipm	5	
	32388-55-9	vertofix	5	
2	-	sandalwood accord	5	Kokudaki odunsu notalar fazla
	1222-05-5	galaxolide %50 in ipm	5	
	32388-55-9	vertofix	10	
3	-	sandalwood accord	5	Koku yeterince güçlü hissedilmedi
	1222-05-5	galaxolide %50 in ipm	10	
	32388-55-9	vertofix	5	
4	-	sandalwood accord	10	Koku yeterince güçlü hissedilmedi
	1222-05-5	galaxolide %50 in ipm	5	
	32388-55-9	vertofix	5	
5	-	sandalwood accord	10	Kokuda odunsu notalar yeterince güçlü değil
	1222-05-5	galaxolide %50 in ipm	10	
	32388-55-9	vertofix	5	
6	-	sandalwood accord	10	Kokudaki odunsu notalar fazla
	1222-05-5	galaxolide %50 in ipm	5	
	32388-55-9	vertofix	10	
7	-	sandalwood accord	5	Üç ürünün kokusu dengeli
	1222-05-5	galaxolide %50 in ipm	10	
	32388-55-9	vertofix	10	

Esans omurgasını oluşturma çalışmalar sonucunda ana motif belirleme çalışmasında belirlenen kokuların dengeli kokuya sahip karışım elde edilmiştir. Elde edilen son karışımın üzerindeki küçük düzeltmeler ile birlikte Tablo 3.7’de gösterilen karışım formülü elde edilmiştir. Bundan sonra bu karışım “Esans omurgası” adı ile kullanılacaktır.

Tablo 3.7 Esans omurgası formülasyonu

Miktar(g)	CAS no	Geleneksel isim	INCI isim
9,60	125-12-2	isobornyl acetate	[(1R,4S,6R)-1,7,7-trimethyl-6-bicyclo[2.2.1]heptanyl] acetate
2,97	8022-15-9	lavandin grosso oil	<i>Lavandula hybrida</i> Grosso herb oil
34,34	85085-29-6	cedarwood Chinese oil	<i>Cupressus funebris</i> China wood oil
10,98	54464-57-2	iso e super	1-(2,3,8,8-tetramethyl-1,3,4,5,6,7-hexahydronaphthalen-2-yl)ethanone
17,84	1222-05-5	galaxolide %50 in ipm	1,3,4,6,7,8-hexahydro-4,6,6,7,8,8-hexamethylcyclopenta(g)-2-benzopyran %50 in IPM
8,54	-	sandalwood accord	Elso Kimya tarafından geliştirilmiş akor
15,73	32388-55-9	vertofix	1-[(1R,2R,5S,7R)-2,6,6,8-tetramethyl-9-tricyclo[5.3.1.0 ^{1,5}]undec-8-enyl]ethanone

3.5. Tamamlayıcı Kokuların Oluşturulması

Esans omurgası ile ilgili çalışmalar tamamlandıktan sonra tamamlayıcı kokular ile ilgili çalışmalara başlandı. Lavantanın tamamlayıcı kokuları olarak bergamot, çimen ve okaliptüs kokuları seçilmiş ve bu tamamlayıcı kokuları verecek hammaddeler ilk olarak esans omurgasına eklenmiştir. Yeni kokuların ve hammaddelerin eklenmesi yöntemi önceki adımda kullanılan yöntemle aynıdır ve ilk tamamlayıcı kokuların karışımları Tablo 3.8'de listelenmiştir. Denemeler sonucunda 4 no'lu karışım uygun olarak seçilmiştir. Bundan sonra bu karışım "EO+Lavanta" olarak kullanılacaktır.

Tablo 3.8 Lavanta tamamlayıcı kokularını oluşturma

No	Cas No	Ürün ismi	Miktar	Yorum
1	-	Esans omurgası	100	
	60-12-8	phenyl ethyl alcohol	10	Bergamot notası çok baskın,
	92704-01-3	bergamot oil	10	cis-3-heksenol çok baskın,
	68039-49-6	triplal	3	Eucalyptus oil kokusu
	8000-48-4	eucalyptus oil	2	yeterince ferahlık vermedi,
	928-96-1	cis-3-hexenol	0,15	koku triplal tarafından
	18479-58-8	dihydromyrcenol	5	kapatıldı
2	-	Esans omurgası	100	
	60-12-8	phenyl ethyl alcohol	12	Bergamot notası baskın, cis-
	92704-01-3	bergamot oil	7,5	3-heksenol dengelendi,
	68039-49-6	triplal	2	eucalyptus oil spearmint oil
	8000-48-4	eucalyptus oil	1	sayesinde dengelendi fakat
	84696-51-5	spearmint oil	1	baskın nota oluştu, triplal
	928-96-1	cis-3-hexenol	0,1	hala baskın,
	18479-58-8	cis-3-hexenyl acetate	0,1	dihydromyrcenol kokusu
	18479-58-8	dihydromyrcenol	5	kokuyu basitleştirdi

Tablo 3.9 (devamı) Lavanta tamamlayıcı kokularını oluşturma

No	Cas No	Ürün ismi	Miktar	Yorum
3	-	esans omurgası	100	Ürünlerin kokuları dengelendi, undecavertol kokusu fazla ön plana çıkıyor
	60-12-8	phenyl ethyl alcohol	13	
	92704-01-3	bergamot oil	6	
	68039-49-6	triplal	1,8	
	8000-48-4	eucalyptus oil	0,9	
	84696-51-5	spearment oil	0,6	
	928-96-1	cis-3-hexenol	0,1	
	18479-58-8	cis-3-hexenyl acetate	0,1	
	18479-58-8	dihydromyrcenol	3	
	13466-78-9	delta-3-carene	4,5	
	93-92-5	styrallyl acetate	1,3	
	81782-77-6	undecavertol	0,8	
4	-	esans omurgası	100	Ürünlerin kokuları dengelendi
	60-12-8	phenyl ethyl alcohol	13	
	92704-01-3	bergamot oil	6	
	68039-49-6	triplal	1,8	
	8000-48-4	eucalyptus oil	0,9	
	84696-51-5	spearment oil	0,6	
	928-96-1	cis-3-hexenol	0,1	
	18479-58-8	cis-3-hexenyl acetate	0,1	
	18479-58-8	dihydromyrcenol	3	
	13466-78-9	delta-3-carene	4,5	
	93-92-5	styrallyl acetate	1,3	
	81782-77-6	undecavertol	0,3	

Lavanta kokusunun tamamlayıcı kokuları ile ilgili çalışmalar bittikten sonra sedir kokusunun tamamlayıcı kokuları üzerine çalışmalar yapılmıştır. Tamamlayıcı kokular arasında, karanfil kokusu için clove oil, sedir yaprağı için Cedarleaf oil, kimyon kokusu için dipropilen glikolde %10 oranında çözünmüş cumin oil yer almıştır. Reçine kokusu için γ -methyl ionone, β -ionone, cyclamen aldehyde, γ -octalactone, γ -undecalactone ve herbanat hammaddelerinden oluşan bir karışım seçilmiştir. Yeni kokuların ve hammaddelerin eklenmesi yöntemi önceki adımda kullanılan yöntemle aynıdır ve ikinci tamamlayıcı kokuların karışımları Tablo 3.9'da listelenmiştir. İkinci deneyde yapılan karışımlardan 2 no'lu karışım uygun bulunmuştur. Bundan sonra bu karışım "EO+Lavanta+Sedir" olarak kullanılacaktır.

Tablo 3.10 Sedir tamamlayıcı kokularını oluşturma

No	Cas No	Ürün ismi	Miktar	Yorum
1	-	EO+Lavanta	100	Cedar leaf oil kokusu çok baskın oldu, Cumin oil %10 in DPG baskın oldu, Herbanate baskın oldu, Cedarwood atlas oil hissedilmiyor.
	91770-83-1	cedar leaf oil	0,5	
	84961-50-2	clove oil	3	
	127-51-5	γ -methyl ionone	3	
	14901-07-6	β -ionone	2,5	
	8023-85-6	cedarwood atlas oil	0,15	
	103-95-7	cyclamen aldehyde	0,8	
	84775-51-9	cumin oil %10 in dpq	0,5	
	104-50-7	γ -octalactone	0,3	
	104-67-6	γ -undecalactone	0,2	
	116126-82-0	herbanate	0,5	
2	-	EO+Lavanta	100	Ürünlerin kokuları dengelendi
	91770-83-1	cedar leaf oil	0,1	
	84961-50-2	clove oil	3	
	127-51-5	γ -methyl ionone	3	
	14901-07-6	β -ionone	2,5	
	8023-85-6	cedarwood atlas oil	1,5	
	103-95-7	cyclamen aldehyde	0,8	
	84775-51-9	cumin oil %10 in dpq	0,3	
	104-50-7	γ -octalactone	0,3	
	104-67-6	γ -undecalactone	0,2	
	116126-82-0	herbanate	0,1	

Bu aşamada yapılan karışımlar esans kompozisyon çalışmasındaki son karışımlardır, bu çalışmaların sonucunda başarılı bulunan karışım artık tamamlanmış ürün olarak bir sonraki işlemlerde kullanılmıştır. Sandal kokusunun tamamlayıcı kokuları odunsu olarak kasnı otu sakızı, tatlı odunsu olarak tonka fasulyesi seçilmişti. Kasnı otu sakızı kokusunu verecek ürün olarak stemone, tatlı odunsu kokusu olarak da γ -nonalactone ve coumarin kullanılmaya karar verilmiştir. Yeni kokuların ve hammaddelerin eklenme metodu önceki iki adımda kullanılan metotlar ile aynıdır ve Tablo 3.10’da son tamamlayıcı kokular için yapılan karışımlar sıralanmıştır. Bu çalışmada yapılan karışımlar arasında ikinci karışım kokusal olarak uygun bulunmuştur ve çalışmaların devamı bu karışım ile devam edilmiştir. Takip kolaylığı açısından bu aşamada onaylanan ürüne “Cedre Herbace” kod adı verilmiştir ve bundan sonraki çalışmalarda karışım bu isim ile kullanılacaktır.

Tablo 3.11 Sandal ağacı tamamlayıcı kokularını oluşturma

No	Cas No	Ürün ismi	Miktar	Yorum
1	-	EO+Lavanta+Sedir	100	Coumarin kokusu az oldu, stemone kokusu çok baskın oldu
	104-61-0	γ -nonalactone	3	
	91-64-5	coumarin	0,5	
	22457-23-4	stemone	0,5	
2	-	EO+Lavanta+Sedir	100	Ürünlerin kokuları dengeleni
	104-61-0	γ -nonalactone	3	
	91-64-5	coumarin	2	
	22457-23-4	stemone	0,25	
3	-	EO+Lavanta+Sedir	100	Coumarin kokusu az oldu, stemone kokusu dengeleni
	104-61-0	γ -nonalactone	3	
	91-64-5	coumarin	1	
	22457-23-4	stemone	0,25	

Çalışmalar sırasında ürün koku kontrolü için karışıma çok defa koklama kağıdı batırılmış ve bu daldırma işleminde toplam karışım miktarından 0,02 g esans karışımı azaltılmıştır. Nihai karışımın onaylanmasından sonra formülasyon kontrol amaçlı olarak tekrar karıştırılmıştır. Tüm koku oluşturma çalışmaları sonucunda oluşturulan Cedre Herbace formülasyonu Tablo 3.11'de listelenmiştir. Kontrol karışımının kokusu kontrol edilmiş ve son aşamada hazırlanan 2 no'lu karışım ile aynı olduğu görülmüştür.

Tablo 3.12 Cedre Herbace formülasyonu

Miktar	CAS no	Geleneksel isim	INCI isim
3,74	92704-01-3	bergamot oil	citrus bergamia mellarosa peel oil expressed
2,2	14901-07-6	β -ionone	4-(2,6,6-trimethylcyclohexen-1-yl)but-3-en-2-one
0,06	91770-83-1	cedar leaf oil	thuja orientalis leaf oil
1,26	8023-85-6	cedarwood atlas oil	cedrus atlantica wood oil
22,33	85085-29-6	cedarwood chinese oil	cupressus funebris wood oil
0,06	928-96-1	cis-3-hexenol	(Z)-hex-3-en-1-ol
0,06	3681-71-8	cis-3-hexenyl acetate	[(Z)-hex-3-enyl] acetate
2,44	84961-50-2	clove oil	syzygium aromaticum l. leaf extract
1,69	91-64-5	coumarin	1-Benzopyran-2-one
0,26	84775-51-9	cumin oil %10 in dpg	cuminum cyminum l. fruit extract %10 in DPG
0,65	103-95-7	cyclamen aldehyde	2-methyl-3-(4-propan-2-ylphenyl)propanal
2,97	13466-78-9	δ -3-carene	3,7,7-trimethylbicyclo[4.1.0]hept-3-ene
2,07	18479-58-8	dihydromyrcenol	2,6-dimethyloct-7-en-2-ol
0,57	8000-48-4	eucalyptus oil	eucalyptus globulus leaf oil
11,6	1222-05-5	galaxolide %50 in ipm	1,3,4,6,7,8-hexahydro-4,6,6,7,8,8-hexamethylcyclopenta(g)-2-benzopyran %50 in IPM
2,4	127-51-5	γ -methyl ionone	(E)-3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohex-2-enyl)but-3-en-2-one
0,22	104-50-7	γ -octalactone	5-butyloxolan-2-one
0,18	104-67-6	γ -undecalactone	5-heptyloxolan-2-one
2,6	104-61-0	γ -nonalactone	5-pentyloxolan-2-one
0,08	116126-82-0	herbanate	Ethyl 3-isopropylbicyclo[2.2.1]hept-5-ene-2-carboxylate

Tablo 3.13 (devamı) Cedre Herbace formülasyonu

Miktar	CAS no	Geleneksel isim	INCI isim
7,14	54464-57-2	iso e super	1-(2,3,8,8-tetramethyl-1,3,4,5,6,7-hexahydronaphthalen-2-yl)ethanone
6,24	125-12-2	isobornyl acetate	[(1R,4S,6R)-1,7,7-trimethyl-6-bicyclo[2.2.1]heptanyl] acetate
1,93	8022-15-9	lavandin Grosso oil	Lavandula hybrida grosso herb oil
8,59	60-12-8	phenethyl alcohol	Phenethyl alcohol (Phenyl ethyl alcohol)
5,55	-	sandalwood accord	(Elsa tarafından geliştirilmiş akor)
0,41	84696-51-5	spearmint oil	Mentha viridis oil
0,22	22457-23-4	stemone	N-(5-methylheptan-3-ylidene)hydroxylamine
0,87	93-92-5	styrallyl acetate	1-phenylethyl acetate
1,18	68039-49-6	triplal	2,4-dimethylcyclohex-3-ene-1-carbaldehyde
0,2	81782-77-6	undecavertol	(E)-4-methyldec-3-en-5-ol
10, 23	32388-55-9	vertofix	1-[(1R,2R,5S,7R)-2,6,6,8-tetramethyl-9-tricyclo[5.3.1.0 ^{1,5}]undec-8-enyl]ethanone

3.6. Taklitten korunma kontrolü

Doğal uçucu yağların koku bileşimlerine kattığı eşsiz koku ile hazırlanan formülasyonların taklidini zorlar. GC-MS analiz yöntemleri ile sentetik hammadde bulmak çok kolaydır, buradaki en önemli koşul moleküllerin MS veri tabanında tanımlı olmasıdır. Ancak doğal esansiyel yağlar bu konuda çok farklı davranmaktadır. Her bir doğal uçucu yağ, doğanın hazırladığı bir esans karışımı olarak ele alınırsa, GC-MS analizi sırasında karşılaşılan sorun daha kolay canlandırılabilir. GC-MS analiz sonuçlarında farklı doğal esansiyel yağlardan gelen aynı moleküller aynı pik altında toplandığından, esans karışımındaki uçucu yağ miktarını tahmin etmek zordur. Bazı durumlarda, uçucu yağlar, parmak izi adı verilen benzersiz bir molekül karışımına sahiptir ve bu parmak izi, doğal yağın algılanmasına yardımcı olur. Ancak diğer durumlarda bu prosedürü gerçekleştirmek çok zordur. Örnek olarak narenciye uçucu yağları verilirse, bu yağlar küçük miktarlarda kullanıldığında, GC-MS analizinde bıraktıkları genel pik sadece limonendir. Bu çalışma kapsamında hazırlanan Cedre Herbace esansının taklit edilme olasılığını kontrol etmek amacıyla, Cedre Herbace formülündeki tüm hammaddeler, sentetik hammaddeler ve doğal uçucu yağlar olmak üzere üç farklı karışım hazırlanmıştır. Her karışım aynı metot ile okunması şartıyla GC-MS analizine tabi tutulmuştur. Analiz sonucunda elde edilen içerik verileri formülasyona dönüştürülerek şahit numune ile koku kontrolüne tabi tutulmuştur.

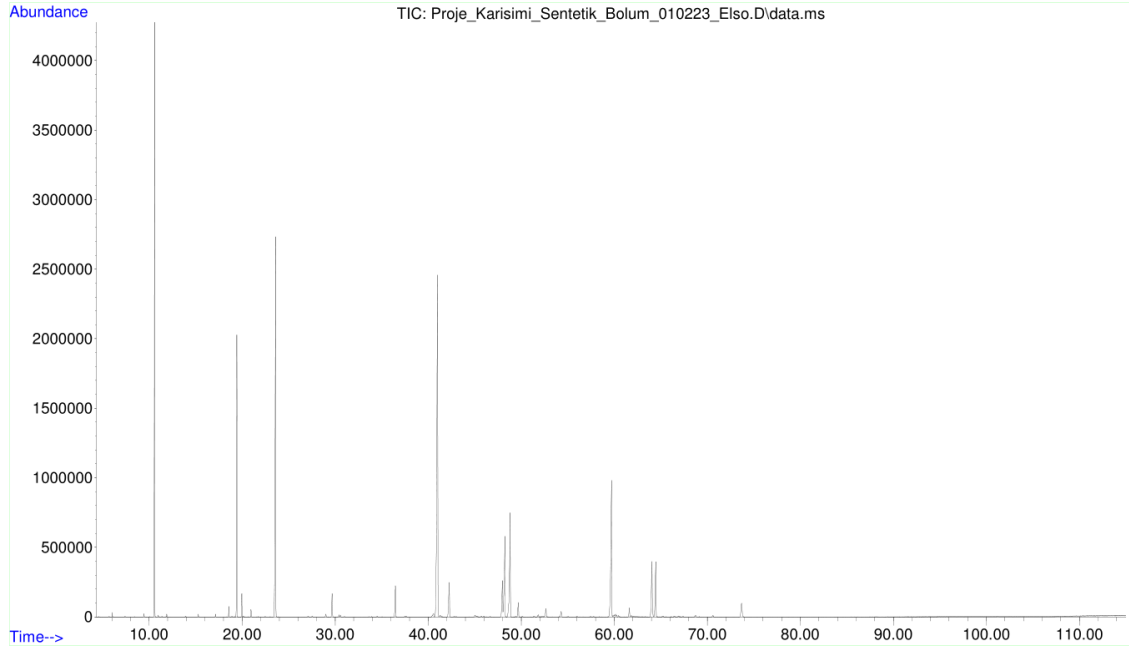
3.6.1. Sentetik moleküller karışımının taklitten korunma kontrolü

Bu aşamada Cedar Herbace formülasyonun içinde geçen akorlar ve doğal yağlar dışındaki bağımsız moleküllerden karışım hazırlanmıştır ve GC-MS analizine tabi tutulmuştur. Sentetik moleküllerden hazırlanan karışım Tablo 3.12’de listelenmiştir. Yapılan GC-MS analizin sonucundan (Resim 3.1) oluşturulan içerik formülasyonu Tablo 3.13’de listelenmiştir. GC-MS analizinden sonucundan oluşturulan formülasyon karışım hale getirilip koku kontrolüne tabi tutulmuştur, kontrol sonucunda şahit formülasyon ile analiz sonucu formülasyon yakın kokulara sahip olduğuna dair karar alınmıştır. Bu denemenin verileri değerlendirildiğinde, tamamen sentetik moleküllerden oluşan formülasyonun taklit edilmesi oldukça kolay olduğu görülmüştür. Deneme esnasında kontrol edilen formülasyonun içinde bulunan tüm moleküllerin MS veri tabanında bulunması, bu

sonuçları büyük ölçüde etkiliyor olsa da esans sektöründe kullanılan MS veri tabanlar sürekli güncellendiği ve tüm üreticilerinin neredeyse aynı veri tabanına sahip olduğunu varsayarak bu şartın tekrarlanabilirliği daneme kapsamında değerlendirilmemiştir. Aynı zamanda GC-MS sonuçlarında oluşturulan formülasyon karışımının fiziksel analiz sonuçları kontrole tabi tutulmaması, taklit olarak yapılan ürünlerinin en önemli kriterlerin arasında sadece kokusal benzerliğin olmasıdır.

Tablo 3.14 Sentetik moleküllerden hazırlanan formülasyon

Miktar	CAS no	Geleneksel isim
2,2	14901-07-6	beta ionone
0,06	928-96-1	cis-3-hexenol
0,06	3681-71-8	cis-3-hexenyl acetate
1,69	91-64-5	coumarin
0,65	103-95-7	cyclamen aldehyde
2,97	13466-78-9	delta-3-Carene
2,07	18479-58-8	dihydromyrcenol
11,6	1222-05-5	galaxolide %50 in IPM
2,4	127-51-5	gamma methyl ionone
0,22	104-50-7	gamma octalactone
0,18	104-67-6	gamma undecalactone
2,6	104-61-0	gamma-nonalactone
0,08	116126-82-0	herbanate
7,14	54464-57-2	iso e super
6,24	125-12-2	isobornyl acetate
8,59	60-12-8	phenethyl alcohol
0,22	22457-23-4	stemone
0,87	93-92-5	styrallyl acetate
1,18	68039-49-6	triplal
0,2	81782-77-6	undecavertol
10,23	32388-55-9	vertofix



Şekil 3.1 Sentetik moleküllerden hazırlanan karışımın GC-MS analiz sonucu

Tablo 3.15 Sentetik moleküllerden hazırlanan formülasyonunun GC-MS analiz sonucundan oluşturulan formülasyon

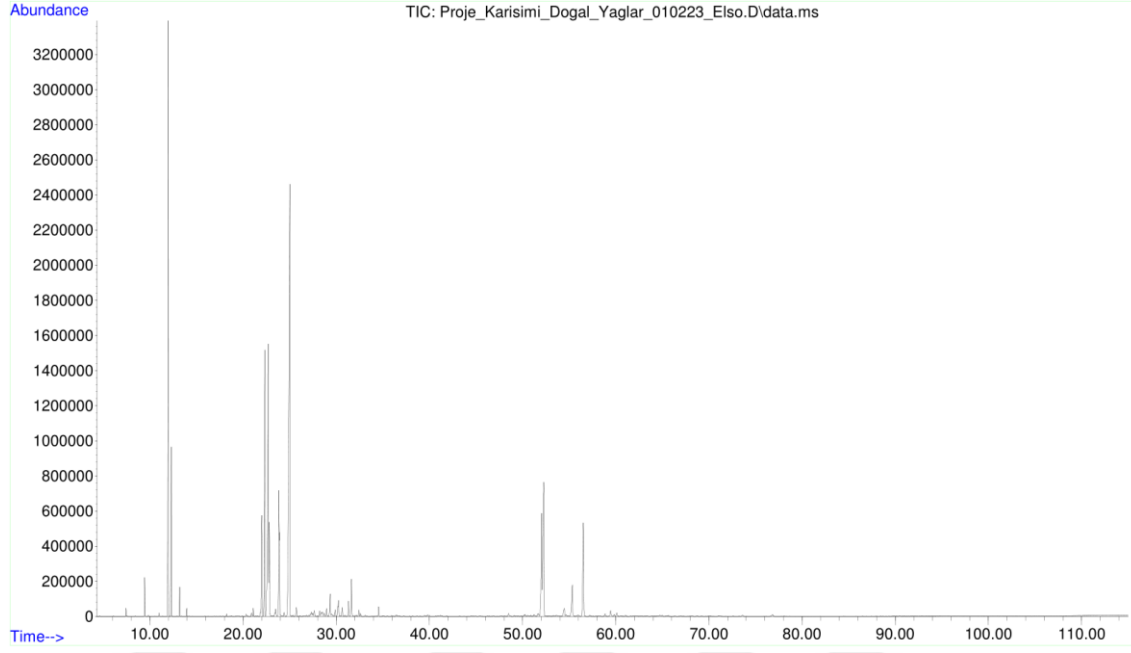
Miktar	CAS no	Geleneksel isim
2,27	14901-07-6	beta ionone
0,08	928-96-1	cis-3-hexenol
0,01	3681-71-8	cis-3-hexenyl acetate
1,50	91-64-5	coumarin
0,98	103-95-7	cyclamen aldehyde
15,78	13466-78-9	delta-3-carene
6,60	18479-58-8	dihydromyrcenol
6,90	1222-05-5	galaxolide
1,53	127-51-5	gamma methyl ionone
5,17	104-50-7	isopropyl myristate
0,34	104-67-6	gamma undecalactone
2,12	104-61-0	gamma-nonalactone
0,01	116126-82-0	herbanate
6,28	54464-57-2	iso e super
18,36	125-12-2	isobornyl acetate
23,93	60-12-8	phenethyl alcohol
0,10	22457-23-4	stemone
1,00	93-92-5	styrallyl acetate
0,63	68039-49-6	triplal
0,35	81782-77-6	undecavertol
9,44	32388-55-9	vertofix

3.6.2. Doğal uçucu yağlar ve akorlar karışımının taklitten korunma kontrolü

Bu aşamada Cedar Herbace formülasyonundaki akorlar ve doğal esansiyel yağlardan oluşan bir karışım hazırlanmış ve GC-MS analizine tabi tutulmuştur. Hazırlanan karışım Tablo 3.14'te listelenmiştir. GC-MS analizi (Resim 3.2) sonucundan oluşturulan içerik formülasyonu Tablo 3.15'te listelenmiştir. GC-MS analizi sonucu oluşan formülasyon karıştırılmamıştır çünkü analiz sonuçlarından oluşan formülasyonda tek başına esans sektöründe kullanılmayan ürünler bulunmaktadır. Koku üretiminde kullanılan moleküllerden formülasyonda tek bir molekül olarak karışım hazırlandığında koku kontrolünde şahit karışıma benzemediğine karar verildi. Bu denemenin verileri değerlendirildiğinde, tamamen doğal uçucu yağlardan oluşan formülasyonun sadece GC-MS analiz yöntemi ile taklit edilmesinin mümkün olmadığı belirlendi. GC-MS analizine ek olarak, doğal uçucu yağ karışımları üzerine yeterince eğitilmiş yapay zeka çözümleri uygulandığında, formülasyonun taklit edilme olasılığı teorik olarak önemli ölçüde artırılabilir ancak çalışma sırasında bu yöntemle ilgili herhangi bir kaynak bulunamadı. Böylece sadece GC-MS analiz yöntemleri ile elde edilen sonuçların doğal uçucu yağların karışımını taklit etmek için yeterli olmadığı belirlenmiştir. Şahit formülasyonunda yapay akorların kullanılması, doğal yağlarının arasına sentetik moleküllerin eklenmesi ile taklit sürecini daha da zorlaştırmaktadır.

Tablo 3.16 Sentetik akordan ve doğal uçucu yağlardan hazırlanan formülasyon

Miktar	CAS no	Geleneksel isim
3,74	92704-01-3	bergamot oil
0,06	91770-83-1	cedar leaf oil
1,26	8023-85-6	cedarwood Atlas oil
22,33	85085-29-6	cedarwood Chinese oil
2,44	84961-50-2	clove oil
0,26	84775-51-9	cumin oil %10 in dpg
0,57	8000-48-4	eucalyptus oil
1,93	8022-15-9	lavandin Grosso oil
5,55	yok	sandalwood accord
0,41	84696-51-5	spearmint oil



Şekil 3.2 Sentetik akordan ve doğal uçucu yağlardan hazırlanan formülasyonunun GC-MS analiz sonucu

Tablo 3.17 Sentetik akordan ve doğal uçucu yağlardan hazırlanan formülasyonunun GC-MS analiz sonucundan oluşturulan formülasyon

Miktar	CAS no	Geleneksel isim
0,75	3387-41-5	sabinene
13,38	5989-27-5	limonene
2,73	470-82-6	eucalyptol
0,49	99-85-4	γ -terpinene
3,46	586-62-9	terpinolene
7,92	115-95-7	linalyl acetate
15,48	469-61-4	α -cedrene
2,67	58319-04-3	sesquisabinene
5,59	20307-83-9	β -sesquiphellandrene
25,57	470-40-6	thujopsene
0,89	18368-95-1	para-menthatriene
1,29	483-76-1	δ -cadinene
4,78	71932-97-3	4-ethyl-2-hexynal
7,95	77-53-2	α -cedrol
1,87	100-51-6	benzyl alcohol
5,17	97-53-0	eugenol

3.6.3. Cedar Herbace formülün taklitten korunma kontrolü

Fiziksel ölçümler esans kompozisyonunun karakterizasyon ve kalite kontrol aşamalarında çok önem taşımaktadır. GC-MS analizlerinin bile net sonuç gösteremediği durumlarda fiziksel ölçümlerin değerleri yapılan ürünün doğruluğunu kontrol etmeye yardımcı olmaktadır. Tez çalışması kapsamında Cedre Herbace esansın yoğunluğu, parlama noktası ve kırılma indisi ölçülmüştür.

3.7. Cedar Herbace Fiziksel Analizlerinin Ölçülmesi

Cedre Herbace esansının parlama noktası ölçülmeden önce pür linalool ile cihaz kalibrasyonu gerçekleştirilmiştir. Linalool parlama noktası 77,9 °C olarak bulunmuştur. Cedre Herbace parlama noktası ölçümün sonucu 88,0 °C olarak bulunmuştur. Cedre Herbace esansının GC-MS analizinden oluşturulan formülasyonun parlama noktası ölçümün sonucu 85,0 °C olarak bulunmuştur.

Cedre Herbace esansının parlama noktası ölçülmeden önce saf su ile cihaz kalibrasyonu gerçekleştirilmiştir. Saf su kırılma indisi 1,3328 olarak bulunmuştur. Cedre Herbace kırılma indisi ölçümün sonucu 1,4984 olarak bulunmuştur. Cedre Herbace esansının GC-MS analizinden oluşturulan formülasyonun kırılma indisi ölçümün sonucu 1,2365 olarak bulunmuştur

Cedre Herbace esansının parlama noktası ölçülmeden önce saf su ile cihaz kalibrasyonu gerçekleştirilmiştir. Saf su yoğunluğu 23 °C'de 0,9988 g/cm³ olarak bulunmuştur. Cedre Herbace yoğunluk ölçme sonucu 0,9559 g/cm³ olarak bulunmuştur. Cedre Herbace esansının GC-MS analizinden oluşturulan formülasyonun yoğunluk ölçme sonucu 0,9297 g/cm³ olarak bulunmuştur.

4. SONUÇ

Son yıllarda doğal uçucu yağlar popülerlik kazanmaya başlamıştır. Kozmetik, kozmesötik ve koku endüstrilerinde doğal yağların kullanılması ürünlere eşsiz kokular vermekle kalmaz, aynı zamanda ürün içeriğindeki doğal ham madde miktarını da artırır. Doğal esansiyel yağların tüketici tarafından neredeyse hiç fark edilmeyen ancak çok önemli bir özelliği, esansiyel formülün diğer üreticiler tarafından taklit edilmekten korunmasıdır. Doğal uçucu yağların içerdiği yüksek molekül sayısı nedeniyle, temel formülasyonun karmaşıklığı mevcut analitik yöntemleri tamamen taklit edecek düzeyde değildir.

Bu çalışmada, bir uçucu yağ bileşiminin tasarım aşamasında uygulanan sanatsal, biyokimyasal ve fizikokimyasal yöntemler incelenmiş ve uygulanmıştır. Çalışma sonucunda hazırlanan esans bileşiminin sentetik içeriği, doğal içeriği ve toplam içeriği GC-MS analizi ile incelenmiştir.

Çalışma süresince uygulanan esans tasarımı yönteminin istenilen koku motifine uygun olarak kısa sürede esans hazırlamaya uygun olduğu kanıtlanmıştır. Tek seferde esans bileşimi hazırlamak yerine her bir koku notası üzerinde ayrı ayrı çalışmak hem kokuya odaklanmayı hem de kullanılan hammaddelerin daha az tüketilmesini sağlamıştır.

Çalışma esnasında yapılan GC-MS analizlerinin sonuçları tamamen sentetik moleküllerden oluşan esans formülasyonunun taklit edilmesine karşı çok az korunmalı olduğu tespit edilmiştir, analiz sonucunda oluşturulan formülasyon kokusu şahit kokusuna yeterli seviyede benzer bulunmuştur. Bunun aksine sentetik ürünler ile birlikte doğal uçucu yağları içeren formülasyonunun GC-MS analiz yöntemleri ile taklit edilmeye yetecek kadar sonuç vermediği doğrulanmıştır, analiz sonucundan oluşturulan formülasyonunun kokusu şahit kokusuna benzemediği bulunmuştur.

Bununla birlikte çalışma kapsamında esans üretiminde özgüllük kontrolü amaçlı yapılan yoğunluk, parlama noktası ve refraktif indisi analizlerin güvenilirliği kontrol edilmiştir. Yapılan analizlerin sonucunda şahit formülün ve GC-MS analiz sonucundan oluşturulan formülün sonuçları karşılaştırılmıştır ve aynı olmadığı tespit edilmiştir. Böylece bu üç analizin oluşturdukları veri kümesi esans özgüllüğünü değerlendirmek için uygun olduğu kanıtlanmıştır.

KAYNAKLAR

- Adams R. P. (1991), Cedarwood oil- analyses and properties. In Modern methods of plant analysis new series. Vol. 12. Essential Oils and Waxes. Edits., H. F. Linskens and J. F. Jackson, Springer Verlag. New York, 159-173
- Adlard, E. (2010) Handbook of Essential Oils. Science, Technology and Applications; Springer: Berlin, Germany,
- Aguilar-Hernández, M.G.; Sánchez-Bravo, P.; Hernández, F.; Carbonell-Barrachina, Á.A.; Pastor-Pérez, J.J.; Legua, P. (2020) Determination of the Volatile Profile of Lemon Peel Oils as Affected by Rootstock. Foods 2020, 9, 241.
- Ahuja, K.; Singh, S. (2019) Essential Oils Market Size by Application (Orange oil, Lemon oil, Eucalyptus oil, Clove oil, Peppermint oil, Jasmine oil, Rosemary oil, Cornmint oil, Citronella oil, Geranium, Spearmint oil, Lavender oil, Tea tree oil and others) by Application (Food & beverage, Aromatherapy, Cosmetics & Toiletries, Pharmaceuticals, Cleaning & Home care, Animal Feed, Fragrances and Others) Industry Analysis Report, Regional Outlook, Growth Potential, Competitive Market Share & Forecast, 2019–2026. Global Market Insights, Inc.
- Alejo-Armijo, A.; Altarejos, J.; Salido, S. (2017) Phytochemicals and biological activities of Laurel tree (*Laurus nobilis*). Nat. Prod. Commun. 12, 743–757.
- Arctander, S. (1967) Perfume and Flavor Chemicals.
- Arctander, S. (1960) Perfume and flavor materials of natural origin. *Perfum. Flavor Mater. Nat. Origin.* 105-110, 370
- Ashour, M.; Wink, M.; Gershenzon, J. (2018) Biochemistry of terpenoids: Monoterpenes, sesquiterpenes and diterpenes. *Annu. Plant Rev.* 40, 258–303
- Babita, S.; Sellam, P.; Jayoti, M.; Puja, R. (2014) Floral essential oils: Importance and uses for mankind. *HortFlora Res. Spectr.* 3, 7–13.
- Bakkali, F.; Averbeck, S.; Averbeck, D.; Idaomar, M. (2008) Biological effects of essential oils—A review. *Food Chem. Toxicol.* 46, 446–475
- Balick, R. (2019) A peek into safe use of essential oils. *Pharm. Today* 25, 22–23

- Barbieri, C.; Borsotto, P. (2018) Essential Oils: Market and Legislation; El-Shemy, H., Ed.; Potential of Essential Oils, IntechOpen: London, UK, 107–127.
- Baser, K.H.C.; Buchbauer, G. (2015) Handbook of Essential Oils: Science, Technology, and Applications; CRC Press: Boca Raton, FL, ABD
- Baser, K.H.C.; Demirci, F. (2007) Chemistry of essential oils. In Flavours and Fragrances: Chemistry, Bioprocessing and Sustainability; Berger, R.G., Ed.; Springer: New York, NY, USA, 43–86.
- Battaglia, S. (2019) Essential oil Monograph: Atlas Cedarwood.
- Bernard T., F. Perineau, M. Delmas and A. Gaset, (1989) Extraction of essential oils. Part III. Two-stage production of the oil of *Lavandula angustifolia* Mill. J. Essent. Oil Res., 1, 261.267
- Bhattacharyya, D. K. (2009). Introduction. In Perfumery materials: Production & Applications, Studium Press, 1–4
- Bouchiha, H.; Rouabhi, R.; Bouchama, K.; Djebbar-Berrebah, H.; Djebbar, M. (2016) Potential toxicity of essential oil extracted from medicinal plant (*Mentha piperita*) on an alternative cellular model paramecium sp. Rev. Kasmera 2015, 43, 114–130. 106. Buckle, J. Essential Oil Toxicity and Contraindications. In Clinical Aromatherapy (Third Edition) Essential Oils in Healthcare; Churchill Livingstone: London, UK, 73–94.
- Burger, P.; Landreau, A.; Watson, M.; Janci, L.; Cassisa, V.; Kempf, M.; Azoulay, S.; Fernandez, X. Vetiver Essential Oil in Cosmetics: What Is New? Medicines 2017, 4, 41
- Burnett, C.L.; Fiume, M.M.; Bergfeld, W.F.; Belsito, D.V.; Hill, R.A.; Klaassen, C.D.; Liebler, D.C.; Marks, J.G., Jr.; Shank, R.C.; Slaga, T.J. (2019) Safety Assessment of Citrus-Derived Peel Oils as Used in Cosmetics. Int. J. Toxicol., 38, 33–59.
- Butnariu, M.; Sarac, I. (2018) Essential oils from plants. J. Biotechnol. Biomed. Sci., 1, 35.
- Carson, P.A. (2002) Hazardous Chemicals Handbook; Elsevier: Amsterdam, The Netherlands.

Cavanaugh, J.L. (2013) Examining the Differential Effects of Natural and Synthetic Aromas of Lavender and Peppermint on Cognition, Mood, and Subjective Workload. Ph.D. Thesis, University of Colorado, Denver, CO, USA.

Charles J, (2008) A Method of Creation & Perfumery

Chastrette, M., Desaintlaumer, J. Y., Sauvegrain, P. (1991) Analysis of a System of Description of Odors by Means of 4 Different Multivariate Statistical-Methods, Chemical Senses, 16 (1): 81-93.

Chouhan, S.; Sharma, K.; Guleria, S. (2017) Antimicrobial activity of some essential oils—Present status and future perspectives. Medicines, 4, 58.

Coppen, J.J. (1995) Flavours and Fragrances of Plant Origin; FAO: Rome, Italy.

Da Silva-Santos, A.; Antunes, A.; D'avila, L.; Bizzo, H.; Souza-Santos, L. (2005) The use of essential oils and terpenics/terpenoids in cosmetics and perfumery: A study identifies the major uses of essential oils and terpenics/terpenoids through granted patents. *Perfum. Flavor.*, 30, 50–55

De Groot, A.C. (2016) Schmidt, E. Essential oils, part IV: Contact allergy. *Dermatitis*, 27, 170–175.

De Silva, T. (1995) Development of essential oil industries in developing countries In *A Manual on the Essential Oil Industry*; United Nations Industrial Development Organization: Vienna, Austria, Chapter 1.

Dhifi, W.; Bellili, S.; Jazi, S.; Bahloul, N.; Mnif, W. (2016) Essential oils' chemical characterization and investigation of some biological activities: A critical review. *Medicines*, 3, 25.

Ellena, J. C. (1987) Des Odeurs et des Mots, *Parf. Cosmet. Aromes*, 76: 63-64

Es, I.; Khaneghah, A.M.; Akbariirad, H. (2017) Global regulation of essential oils. In *Essential Oils in Food Processing: Chemistry, Safety and Applications*; Wiley-Blackwell: Hoboken, NJ, USA, 327–338.

European Commission. (2022). Commission Regulation (EU) .../... of XXX amending Regulation (EC) No 1223/2009 of the European Parliament and of the Council as regards labelling of fragrance allergens in cosmetic products

- Franz, C.; Novak, J. (2010) Sources of essential oils. In Handbook of Essential Oils and Science, Technology and Applications; Hüsni Can Baser, K., Buchbauer, G., Eds.; CRC Press Taylor & Francis Group: Boca Raton, FL, USA, 39–81.
- Gilbert, A. (2008) What the Nose Knows-The Science of Scent in Everyday Life, New York, NY, Crown Publishers.
- Goodner, K., Rouseff, R. (2011) Practical analysis of flavor and Fragrance Materials, Wiley, 45–47.
- Groom, N.F. The Perfume Handbook; Groom, N. (1992) Springer Netherlands: Dordrecht, The Netherlands, 81–89.
- Grosch, W. (2007) Gas Chromatography—Olfactometry of Aroma Compounds. In Flavours and Fragrances; Springer: Berlin, Germany, 363–378.
- Haddad, R., Lapid, H., Harel, D., Sobel, N. (2008) Measuring Smells, Current Opinion in Neurobiology, 18 (4): 438-444.
- ISO 3140:2019 (E). Essential Oil of Sweet Orange Expressed (*Citrus sinensis* L.). (2019) <https://www.sis.se/api/document/preview/80011724/> , 15 Aralık 2022.
- ISO 3525: 2008(E). Oil of Amyris *Balsamifera* L. (2008) <https://www.sis.se/api/document/preview/910039/> ,15 Aralık 2022.
- ISO 4733: 2004(E). Essential Oil of Cardamom. (2004) <https://www.sis.se/api/document/preview/904961/> ,15 Aralık 2022.
- ISO 8896: 2016(E). Essential Oil of Caraway (*Carum carvi* L.) (2016) <https://www.sis.se/api/document/preview/920364/> ,15 Aralık 2022.
- ITC, (2020). International Trade Center, TradeMap Veri tabanı, <https://www.trademap.org/Index.aspx>
- Jain, S.; Arora, P.; Popli, H. (2020) A comprehensive review on *Citrus aurantifolia* essential oil: Its phytochemistry and pharmacological aspects. Braz. J. Nat. Sci. 3, 354.
- Jinks, A., Laing, D. G. (2001) The Analysis of Odor Mixtures by Humans: Evidence for a Configurational Process, Physiology & Behavior, 72 (1-2): 51-63
- Judžentienė, A. (2016) Hyssop (*Hyssopus officinalis* L.) Oils. In Essential Oils in Food Preservation, Flavor and Safety; Elsevier: Amsterdam, The Netherlands, 471–479.

- Kladar, N.V.; Anac'kov, G.T.; Rat, M.M.; Srd'enovic', B.U.; Grujic', N.N.; Šefer, E.I.; Božin, B.N. (2015) Biochemical characterization of *Helichrysum italicum* (Roth) G. Don subsp. *italicum* (Asteraceae) from Montenegro: Phytochemical screening, chemotaxonomy, and antioxidant properties. *Chem. Biodivers.* 12, 419–431.
- Kubeczka, K.-H. (2020) History and Sources of Essential Oil Research. In *Handbook of Essential Oils*; CRC Press: Boca Raton, FL, USA, 3–39
- Kusuma, H.S.; Mahfud, M. (2016) Chemical Composition of Essential Oil of Indonesia Sandalwood Extracted by Microwave-Assisted Hydrodistillation. *AIP Conf. Proc.*
- Lahlou, M. (2004) Essential oils and fragrance compounds: Bioactivity and mechanisms of action. *Flavour Fragr. J.* 19, 159–165
- Laing, G. G. (1987) Optimum Perception of Odours by Humans, Report, North Ryde, Australia, CSIRO—Division of Food Research
- Laska, M.; Teubner, P. (1999) Olfactory discrimination ability of human subjects for ten pairs of enantiomers. *Chem. Senses*, 24, 161–170.
- Lavabre, M. (1996) *Aromatherapy Workbook*; Inner Traditions/Bear & Co: Windsor County, VT, USA.
- Lawless, J. (2013) *The Encyclopedia of Essential Oils: The Complete Guide to the Use of Aromatic oils in Aromatherapy, Herbalism, Health, and Well Being*; Conari Press: San Francisco, CA, USA.
- Lis-Balchin, M. (2006) *Aromatherapy Science: A Guide for Healthcare Professionals*; Pharmaceutical Press: London, UK.
- Llana-Ruiz-Cabello, M.; Pichardo, S.; Maisanaba, S.; Puerto, M.; Prieto, A.I.; Gutierrez-Praena, D.; Jos, A.; Camean, A.M. (2015) In vitro toxicological evaluation of essential oils and their main compounds used in active food packaging: A review. *Food Chem. Toxicol.* 81, 9–27
- Mahmood, Z.; Ahmed, I.; Saeed, M.U.Q.; Sheikh, M.A. (2013) Investigation of physico-chemical composition and antimicrobial activity of essential oil extracted from lignin-containing *Cupressus sempervirens*. *BioResources.* 8, 1625–1633.

- Maia, J.G.S.; Andrade, E.H.A.; Couto, H.A.R.; Da Silva, A.C.M.; Marx, F.; Henke, C. (2007) Plant sources of Amazon rosewood oil. *Quim. Nova.* 30, 1906–1910.
- Maia, J.G.S.; Mourão, R.H.V. (2016) Amazon Rosewood (*Aniba rosaeodora* Ducke) Oils. In *Essential Oils in Food Preservation, Flavor and Safety*; Elsevier: Amsterdam, The Netherlands, 193–201.
- Majewska, E.; Kozłowska, M.; Kowalska, D.; Gruczyn'ska, E. (2017) Characterization of the essential oil from cone-berries of *Juniperus communis* L. (Cupressaceae). *Herba Pol.* 63, 48–55.
- Masango, P. (2001) Towards Understanding Steam Distillation of Essential Oils by Differential Quantification of Principal Components Using Capillary Gas Chromatography. Ph.D. Thesis, University of Surrey, Guildford, UK.
- Mata, V. G., Gomes, P. B., Rodrigues, A. E. (2004) Science Behind Perfume Design, Second European Symposium on Product Technology (Product Design and Technology), Groningen, The Netherlands.
- Mortimer, S.; Reeder, M. (2016) Botanicals in dermatology: Essential oils, botanical allergens, and current regulatory practices. *Dermatitis*, 27, 317–324.
- Noudogbessi, J.; Yedomonhan, H.; Alitonou, G.; Chalard, P.; Figueredo, G.; Adjalian, E.; Avlessi, F.; Chalchat, J.; Sohounhloué, D. (2012) Physical characteristics and chemical compositions of the essential oils extracted from different parts of *Siphonochilusaethiopicus* (Schweinf.) BL Burt (Zingiberaceae) harvested in Benin. *J. Chem. Pharm. Res.* 4, 4845–4851.
- Olujimi, O.; Fatoki, O.S.; Odendaal, J.P.; Okonkwo, J. (2010) Endocrine disrupting chemicals (phenol and phthalates) in the South African environment: A need for more monitoring. *Water SA*, 36, 5.
- Pavela, R. (2015) Essential oils for the development of eco-friendly mosquito larvicides: A review. *Ind. Crops Prod.* 76, 174–187
- Pitman, V. (2004) *Aromatherapy: A Practical Approach*; Nelson Thornes: Cheltenham, UK.

- Rao, B.R.R.; Rajput, D.K.; Patel, R.P.; Purnanand, S. (2010) Essential oil yield and chemical composition changes during leaf ontogeny of palmarosa (*Cymbopogon martinii* var. *motia*). *Nat. Prod. Commun*, 5, 1947–1950.
- Ridder, M. (2020) Essential Oils Market Worldwide-Statistics & Facts.
- Rokbeni, N.; M'rabet, Y.; Dziri, S.; Chaabane, H.; Jemli, M.; Fernandez, X.; Boulila, A. (2013) Variation of the chemical composition and antimicrobial activity of the essential oils of natural populations of Tunisian *Daucus carota* L. (Apiaceae). *Chem. Biodivers*, 10, 2278–2290.
- Sadgrove, N.; Jones, G. (2015) A contemporary introduction to essential oils: Chemistry, bioactivity and prospects for Australian agriculture. *Agriculture*, 5, 48–102
- Saito, H., Chi, Q. Y., Zhuang, H. Y., Matsunami, H., Mainland, J. D. (2009) Odor Coding by a Mammalian Receptor Repertoire, *Science Signaling*
- Salgueiro, L.; Martins, A.; Correia, H. (2010) Raw materials: The importance of quality and safety. A review. *Flavour Fragr. J*, 25, 253–271.
- Sarkic, A.; Stappen, I. (2018) Essential oils and their single compounds in cosmetics—A critical review. *Cosmetics* 2018, 5, 11
- Sawamura, M. (2011) *Citrus Essential Oils: Flavor and Fragrance*; John Wiley & Sons: Hoboken, NJ, USA.
- SCCNFP. (1999) The Scientific Committee on Cosmetic Products and Non-Food Products Intended for Consumers, *Fragrance Allergy in Consumers. A Review of the Problem. Analysis of the Need for Appropriate Consumer Information and Identification of Consumer Allergens*.
- Scientific Committee on Consumer Safety. (2012). *Opinion on Fragrance allergens in cosmetic products*
- Sell, C. S. (2019). Chapter 10, *Fundamentals of Fragrance Chemistry*, Wiley-VCH. 108-110, 187–196.
- Sell, C.S. (2006) *The Chemistry of Fragrances: From Perfumer to Consumer*; Royal Society of Chemistry: London, UK, .

Soares, B.V.; Morais, S.M.; dos Santos Fontenelle, R.O.; Queiroz, V.A.; Vila-Nova, N.S.; Pereira, C.M.; Brito, E.S.; Neto, M.A.; Brito, E.H.; Cavalcante, C.S.; et al. (2012) Antifungal activity, toxicity and chemical composition of the essential oil of *Coriandrum sativum* L. fruits. *Molecules* 2012, 17, 8439–8448.

Stepanyuk, Alexey & Kirschning, Andreas. (2019). Synthetic terpenoids in the world of fragrances: Iso E Super ® is the showcase. *Beilstein Journal of Organic Chemistry*. 15. 2590-2602.

Symon, K. (1971) *Mechanics*, 3rd edn, Addison-Wesley, New York, USA

Şanlı, A.; Karadoğan, T. (2017) Geographical impact on essential oil composition of endemic *Kundmannia anatolica* Hub.-Mor. (Api-aceae). *Afr. J. Tradit. Complementary Altern. Med.*, 14, 131–137.

Tisserand, R.; Young, R. (2014) Essential oil profiles. In *Essential Oil Safety A Guide for Health Care Professionals*, 2nd ed.; Elsevier: London, UK, 187–482

Tongnuanchan, P.; Benjakul, S. (2014) Essential oils: Extraction, bioactivities, and their uses for food preservation. *J. Food Sci.*, 79, 1231–1249.

Turek, C.; Stintzing, F.C. (2013) Stability of essential oils: A review. *Compr. Rev. Food Sci. Food Saf.*, 12, 40–53.

Turin, L. (2007). In *The secret of scent: Adventures in perfume and the science of Smell*, Faber and Faber, 52–54, 108.

TÜİK, (2020). *Dış Ticaret İstatistikleri*

Ulusal Tez Merkezi, 2022, <https://tez.yok.gov.tr/UlusalTezMerkezi/tezSorguSonucYeni.jsp> , 31 Ocak 2023

Van Oosten, E.J.; Schuttelaar, M.L.A.; Coenraads, P.J. (2009) Clinical relevance of positive patch test reactions to the 26 EU-labelled fragrances. *Contact Dermat.*, 61, 217–223.

Van Vuuren, S.F.; Kamatou, G.P.; Viljoen, A.M. (2010) Volatile composition and antimicrobial activity of twenty commercial frankincense essential oil samples. *S. Afr. J. Bot.*, 76, 686–691.

Vostinaru, O.; Heghes, S.C.; Filip, L. (2020) Safety Profile of Essential Oils. In Essential Oils-Bioactive Compounds, New Perspectives and Applications; IntechOpen: London, UK.

Wang, K.; Zhu, R.-Z.; Qu, R.-F.; Li, Z.-Y. (2012) Comprehensive two-dimensional gas chromatography–time-of-flight mass spectrometry for the analysis of volatile components in Neroli essential oil. *Mendeleev Commun.*, 1, 45–46.

Warshaw, E.M.; Zug, K.A.; Belsito, D.V.; Fowler, J.F., Jr.; DeKoven, J.G.; Sasseville, D.; Maibach, H.I.; Mathias, C.T.; DeLeo, V.A.; Taylor, J.S. (2017) Positive patch-test reactions to essential oils in consecutive patients from North America and Central Europe. *Dermatitis*, 28, 246–252

Zarzo, M., Relevant Psychological Dimensions in the Perceptual Space of Perfumery Odors, *Food Quality and Preference*, 19 (3): 315-322, 2008

EK 1-Tablo 1 Kozmetik ve/veya parfümlerde koku olarak kullanılan uçucu yağların koku profili

Uçucu Yağların Elde Edildiği Bitki Türleri	Yaygın isim	Kullanılan Parça(lar)	Temel Bileşenler ^a	Yağların Renk Aralığı	Koku Tanımı	Referanslar
1. <i>Amyris balsamifera</i> L.	Balsam meşalesi Odun		Elemol , γ - <i>epi</i> -eudesmol, γ -eudesmol , valerianol , α -eudesmol, 7- α - <i>epi</i> -eudesmol, β -eudesmol	Soluk sarı ila kehribar sarısı	Karakteristik, odunsu	ISO 3525: 2008(E)
2. <i>Angelica archangelica</i>	Melek otu	Kökler ve rizomlar	Felandren, pinen, limonen, linalool ve borneol; osthol, Angelicin	Renksiz veya soluk sarı	Zengin otsu topraklı notası	Lawless, 2013
		Tohum		Renksiz	Daha taze, baharatlı üst nota	
3. <i>Aniba rosaeodora</i> Ducke	Gül ağacı	Ahşap/yaprak	α -Pinen, β -pinen, limonen, 1,8-sineol, trans-linalool oksit, cis-linalool oksit, linalool, trans-linalool oksit, α -terpineol	Soluk sarı	Çiçekli, tatlı, odunsu ve sitrik	Maia, 2013 Maia, 2016
4. <i>Boswellia sacra</i> Flueck	Buhur	Sakız	α -Pinen, α -tujen, β -pinen, mirsen , sabinen, limonen, p-simen	Şeffaf veya sarı	Balzamik, kafur benzeri, baharatlı, odunsu, hafif limonsu	Lavabre, 1996 Van Vuuren, 2010
5. <i>Cananga odorata</i> Hook F. and Thoms	Ylang ylang	Çiçek	Prenil asetat, p-kresil metil eter, metil benzoat, linalool, benzil asetat, geraniol, geraniol asetat, (E)-sinnamil asetat, β -karyofilen	Soluk sarıdan koyu sarıya	Karakteristik, çiçeksi, yasemin anımsatan	ISO3063:2004(E)
6. <i>Carum carvi</i> L.	Kimyon	Olgun meyve	Mirsen, limonen, cis-dihidrokarvo, trans-karveyol, cis-karveyol , karvon	Renksiz ila soluk sarı	Taze, otsu, baharatlı	ISO 8896: 2016(E)
7. <i>Cedrus atlantica</i> (Endl.) Manetti ex Carrière	Sedir ağacı	Ahşap/talaş	Himakalen , α -himakalen , β -himakalen , cis-bisabolen ,himakalol , allo-himakalol	Sarımsıdan turuncu-sarıya veya koyu kehribar rengi	Kafurumsu - tarçınımsı ve mimosayı anımsatan tatlı, odunsu alt tonlu	Battaglia, 2019
8. <i>Cinnamomum verum</i> J. Presl	Tarçın	Kabuk	(E)-Sinnamaldehit, öjenol, β -karyofilen, α -felandren, linalol	Kırmızımsı kahverengi	Karakteristik baharatlı	De Groot, 2016 Lavabre, 1996

9. <i>Citrus aurantiifolia</i> (Christm.) Swingle	Misket Limonu	Kabuk	Limonen, β -pinen , γ -terpinen, sitral	Renksiz ila yeşilimsi sarı	Hafif narenciye, çiçeksi	Burnett, 2019 Jain, 2020
10. <i>Citrus aurantium</i> var. <i>amara</i> L.	Neroli/acı portakal	Çiçek	Linalool, β -pinen, α -terpineol, limonen, sabinen, nerol, nerolidol, linalil asetat ve α -pinen	Açık sarıdan kahve kahverengiye	Tatlı, taze ve çiçek kokusu	Sarkic, 2018 Wang, 2012
11. <i>Citrus bergamia</i> Risso	Bergamot	Meyve kabuğu	Linalil asetat, limonen, α -terpinen , β -pinen, γ -terpinen, geraniol, linalool, laktonlar, bergapten, β -bisabolen	Açık yeşil-sarı	Hafif çiçeksi/tatlı/balzamik karakterli hafif	Pitman, 2004
12. <i>Citrus limon</i> (L.) Osbeck	Limon	Kabuk	Limonen, β -pinen, γ -terpinen, sabinen , α -pinen, geraniol, neral , α -tujen, β -bisabolen, terpinolen, trans- α -bergamotene , α -terpineol, α -terpinene , neril asetat, linalol,	Renksiz ila soluk sarı	Taze limon kabuğu	Burnett, 2019 Aguilar-Hernández, 2020
13. <i>Citrus reticulata</i> Blanco	Mandalina	Kabuk	Limonen, γ -terpinen, terpinolen, mirsen, α -pinen, ρ -simen, α -thujene	Koyu turuncudan kırmızımsı-turuncuya veya kahverengimsi-turuncuya	Portakal benzeri	Burnett, 2019 De Groot, 2016
14. <i>Citrus sinensis</i> (L.) Osbeck	Tatlı portakal	Kabuk	Limonene, α -pinen, β -pinen, sabinen, mirsen, geraniol , n-octanal, n-decanal, n-nonanal, neral , β -sinensal , valensen, linalool	Sarıdan kırmızımsı sarıya	Karakteristik, portakal kabuğu kokusu	ISO 3140:2019 (E)
15. <i>Citrus paradisi</i> Macfad.	Greyfurt	Meyve kabuğu	Limonen, sitronelal, sitral, sinensal, geraniol asetat, paradisol, geraniol, ketonlar, laktonlar, aurapten,	Sarı veya yeşilimsi	Taze, keskin, narenciye aroması (üst nota)	Pitman, 2004
16. <i>Commiphora myrrha</i> (Nees) Engl.	Mür	Zamk	Furanoeudesma-1,3-dien, curzeren, β -elemen, lindestren, furanodien	Sarıdan kırmızımsı kahverengiye	Hoş balzamik, kafur benzeri, küflü, tütsü benzeri	De Groot, 2016 Lavabre, 1996
17. <i>Coriandrum sativum</i> L.	Kişniş	Meyve	Borneol, 2E-decanal, kafur, dodecanal, n-decanal, neril asetat, geraniol, linalol	Renksiz ila soluk sarı	Çiçeksi, balzamik alt tonlu ve biberli-odunsu tatlı üst nota	Arctander, 1996 Soares 2002
18. <i>Cupressus sempervivens</i> L.	Selvi	Yaprak	α -Pinen, Δ -karene, limonen, seskiterpen, α -terpinen, sabinen,	Sarımsı	Hoş bir şekilde dumanlı, odunsu koku ve amber benzeri	Groom, 1992 Mahmood, 2013

19. <i>Cymbopogon citratus</i> (DC.) Staf	Limon otu	Yaprak	Sitral, mîrsen, dipenten, linalol, geraniol, nerol, sitronellol	Sarı veya soluk şeri renkli	Limon damllarını anımsatan yoğun tatlı limonsu (üst nota)	Pitman, 2004
20. <i>Cymbopogon martini</i> (Roxb.) W. Watson	Palmarosa	Yaprak	Myrcene, linalool, β -karyofillen, α -terpineol, geranil asetat, geranyl isobutirat, geraniol,	Sarı	Taze gül benzeri	Lavabre, 1996 Rao, 2010
21. <i>Daucus carota</i> L.	Havuç	Tohum	β -bisabolen, elemisin, geranil asetat ve sabinen	Sarımsı kahverengi renk	Yumuşak, tatlı dünyevi toprak aroması	Rokbeni, 2013
22. <i>Elettaria cardamomum</i> (L.) Maton	Kakule	Meyve	α -pinene, sabinen, mîrsen, limonen, 1,8-sineol, linalol, linalil asetat, terpinen-4-ol, α -terpineol	Neredeyse renksiz ıla soluk sarı	Karakteristik, baharatlı, sineolik	ISO 4733: 2004(E)
23. <i>Eucalyptus globulus</i> Labill.	Okalıptüs	Yaprak	1,8-Sineol, α -pinene, limonen, aromadendren, ρ -simen, globulol	Sarıdan kırmızıya	Taze balzamik kafur benzeri	De Groot, 2016 Lavabre, 1996
24. <i>Feniculum vulgare</i> Mill.	Rezene	Tohum	Fenoller, trans-anetol, metil kavikol, α -pinene, α -tujene, γ -terpinen	Sarımsı	Güçlü, anason, kafur	Pitman, 2004 Lavabre, 1996
25. <i>Helichrysum italicum</i> (Roth) G. Don	Balkaymak	Toprak üstü parçaları	Neril asetat, g-kurkümen, neril propiyonat ve ar-kurkümen	Soluk sarıdan kırmızıya	Güçlü, bal benzeri aroma	Sarkic, 2018 Kladar, 2019
26. <i>Hyssopus officinalis</i> L.	Çördük	Toprak üstü parçaları	İzopinokamfon, pinokamfon, β -pinen	Açık sarı	Sıcak ve baharatlı, kafur benzeri kokular	Judžentiene, 2016
27. <i>Illicium verum</i> Hook.f.	Yıldız anason	Meyve	Trans-anetol (%80-90)	Soluk sarı	Sıcak, baharatlı, tatlı, meyanköku benzeri koku	Lawless, 2013
28. <i>Jasminum officinale</i> L.	Yasemin	Çiçek	benzil asetat, linalil asetat, benzil benzoat, metil jasmonat, metil antranilat, linalol, nerol, geraniol	Koyu, turuncu-kahverengi	Son derece yoğun, zengin, tatlı, çiçek kokusu	Pitman 2004
29. <i>Juniper communis</i> L.	Ardıç	Olgun meyve	α -pinen, sabinen, β -pinen, β -mîrsen, α -felandren, limonen, terpinen-4-ol, bornil asetatve β -aryofillen	Renksiz veya soluk sarı-yeşil	Taze meşe ağacı veya terebentin benzeri/kozalaklı ağaç benzeri aroma	Groom, 1992 Alejo-Armijo, 2017
30. <i>Laurus nobilis</i> L.	Defne	Yaprak	1,8-sineol, sabinen, α -terpinil asetat, linalool, öjenol, metil öjenol, α -pinen	Sarı	Aromatik, baharatlı	Alejo-Armijo, 2017

ÖZGEÇMİŞ

EĞİTİM BİLGİLERİ:

2012-2017 Lisans: Marmara Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Kimya-İSTANBUL

2021-2023 Yüksek Lisans: Marmara Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Analitik Kimya-İSTANBUL

