

Trabajo Fin de Grado en Farmacia

La fisicoquímica de los perfumes

Ayesha Parveen

Tutora: Miriam C. Rodríguez González

Co-tutor: Javier Izquierdo Pérez

Área: Fisicoquímica

Curso: 2022-2023

Índice

Resumen y Abstract.....	3
Introducción.....	4
Hipótesis.....	6
Objetivos.....	6
Materiales y métodos.....	7
Resultados.....	11
Conclusiones.....	14

Resumen

Desde el punto de vista fisicoquímico, el principio de un perfume consiste en una mezcla compleja entre aceites esenciales, agua y etanol. Para la obtención de diferentes tipos de perfumes, se emplean diagramas ternarios en los que se muestran las proporciones de aceite-agua-etanol en las que se puede obtener un sistema monofásico homogéneo. En este TFG se han empleado moléculas que intervienen en estas fragancias en su forma pura, eucaliptol, linalol, geraniol y limoneno, para simplificar la interpretación del sistema ternario. Se formularon diferentes tipos de perfumes utilizando el linalol y a continuación se midieron las propiedades fisicoquímicas de las mezclas como la densidad y el pH, comparándolas con las de perfumes comerciales, consiguiendo extrapolar estos resultados a las propiedades de los sistemas sencillos que se habían formulado.

Abstract

From the physicochemical point of view, the principle of a perfume consists of a complex mixture between essential oils water, and ethanol. To obtain different types of perfumes, ternary diagrams are used as it shows the proportions of oil-water-ethanol with which a homogeneous monophasic system can be obtained. With the objective of simplifying the diagram interpretation, pure molecules involved in such fragrances such as eucalyptol, linalool, geraniol, and limonene were used. Applying a ternary diagram, different types of perfumes were formulated using linalool and its physicochemical properties such as pH level, density and viscosity were measured and compared to those of commercial perfumes, thus extrapolating the results to the properties of the simple systems previously formulated.

Introducción

Un perfume es la unión perfecta entre el arte y la ciencia; es una mezcla compleja no ideal de componentes provenientes de la extracción de aceites esenciales naturales o sintéticos. Para la preparación de una fragancia se pueden combinar varios componentes en distintas proporciones, dando origen a un proceso que suele ser costoso y lento.¹

La palabra perfume deriva del latín “*per fumum*” que quiere decir “a través del humo” aludiendo así al humo y vapor que fueron realmente el origen de los primeros perfumes. Estos consistían en inciensos que se utilizaban como ofrenda a los dioses con el fin de purificar y divinizar el cuerpo y alejar el mal. Desde la antigüedad los aceites esenciales son utilizados en gran cantidad de aplicaciones, entre las que destacan estos elementos aromáticos. Hasta mitades del siglo XIX el perfume se consideraba un producto de lujo y se reservaba para los estratos más ricos de la sociedad. El siglo XX supuso un crecimiento importante para el uso de las fragancias, se desarrolló la química moderna dando lugar a una nueva profundidad y visión al mundo de los perfumes. En la actualidad las fragancias forman parte de una gran variedad de productos de uso cotidiano como jabones, detergentes, etc. Esto se debe a que, gracias al avance en los métodos de síntesis, la mayoría de las fragancias pueden obtenerse de manera sencilla a nivel industrial, aunque siguen existiendo fragancias naturales que no se pueden replicar.²

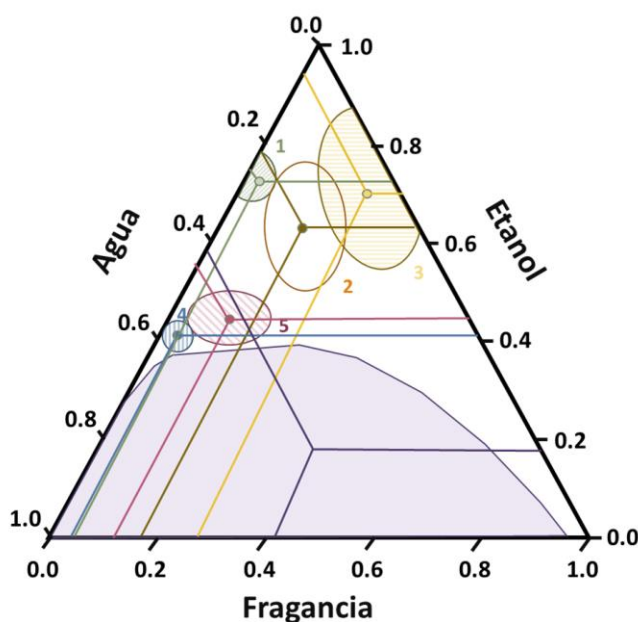


Figura 1. Diagrama ternario en el que se muestra la región donde se encuentra cada tipo de formulación comercial. La región en violeta consiste en la región bifásica por debajo de la denominada curva de solubilidad. En las diferentes regiones se indican las composiciones más comunes para 1) *eau de cologne* (verde), 2) *eau de parfum* (naranja), 3) perfume (amarillo), 4) *aftershave* (azul) y 5) *eau de toilette* (violeta).^{adaptado de referencia 10.}

¹Stora T, Escher S, Morris A. The physicochemical basis of perfume performance in consumer products. *Chimia* (Aarau) [Internet]. 2001 [citado el 29 de abril de 2023];55(5):406. Disponible en: https://www.chimia.ch/chimia/article/view/2001_406

²Fortineau A-D. Chemistry perfumes your daily life. *Journal of Chemical Education*. 2004;81(1):45. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1021/ed081p45>

La aproximación de considerar un perfume como la mezcla de agua, etanol y fragancia, permite la construcción de un sistema ternario como el mostrado en la **Figura 1**. Un diagrama ternario está compuesto por 3 lados en el que cada vértice indica el 100% de cada componente y extrapolando las proporciones de los 3 componentes se obtienen la composición de cada punto. Debido a que el agua y el aceite son parcialmente inmiscibles, para que formen una fase necesitan un componente en el que ambos sean miscibles como, por ejemplo, el etanol. Simplificando que uno de los lados del ternario sea la fragancia se forma un diagrama ternario que ayuda a distinguir las composiciones para las que se obtiene un sistema monofásico o bifásico. Como hemos dicho, considerar la fragancia como un solo elemento es una aproximación dado que la fragancia no consiste en un solo compuesto químico, sino que es muchísimo más compleja. Conocer la composición y las proporciones de los distintos componentes en un aceite esencial continúa siendo un reto para la química. Es por ello por lo que para poder establecer una relación cuantitativa en este trabajo se emplea para la construcción de los diagramas ternarios una sola molécula.

Para poder clasificar a los perfumes se recurre a la concentración de la esencia. El agua de colonia contiene la menor concentración de esencia diluida en alcohol, entre el 3 y 5% y tiene fragancias muy suaves. El *Eau de Toilette* tiene una concentración de esencia más alta y que se encuentra entre el 5 y 10% y es la que más se utiliza. El *Eau de Parfum* tiene con concentración del 10 al 15%. En la cúspide de los perfumes se encuentran las esencias o extractos que tienen la concentración más alta, en torno al 30%.³

La química juega un papel fundamental en el desarrollo y elaboración de los productos en perfumería, desde la extracción de las distintas esencias hasta el análisis de los productos finales para su comercialización. Entre las propiedades fisicoquímicas más importantes de un perfume tenemos el pH, la densidad y la viscosidad. El control de estos parámetros es de relevancia a la hora de diseñar un producto que satisfaga al consumidor.

La viscosidad caracteriza la fluidez de un líquido. Una viscosidad elevada significa un líquido espeso, mientras que una viscosidad baja da como resultado un líquido fluido. En el caso de la industria de los perfumes y cosméticos, la viscosidad es un parámetro clave que garantiza tanto la correcta aplicación del producto como la sensación que tenemos al aplicarlo. En cuanto a la densidad, se puede definir como la relación de la masa entre el volumen. Este valor de este parámetro es una consecuencia directa de la composición. El etanol tiene menor densidad que la del agua por lo que un perfume tiene una alta proporción de etanol la densidad suele ser menor que el agua.

Por último, tenemos el pH. Este parámetro determina el grado de acidez o alcalinidad que tiene una sustancia, y se mide en una escala de 0 a 14. De 0 a 7 el pH es ácido, a 7 el pH es neutro y de 7 a 14 el pH es alcalino (o básico). Controlar el pH es fundamental en lo que se refiere a su interacción con la piel, al igual que otros productos de higiene como,

³ Gámez DT. PERFUMES: EL AROMA DE LA ALQUIMIA [Internet]. Gobiernodecanarias.org. [citado el 29 de abril de 2023]. Disponible en: <https://www3.gobiernodecanarias.org/medusa/ecoblog/cizqper/files/2012/06/perfumes.pdf>

por ejemplo, los jabones.⁴ Además, el pH ideal va asociado al tipo de piel donde se aplique ya que un pH muy diferente podría irritar la piel. En caso de piel con pH ácido el perfume no se fija adecuadamente, pero en caso de pieles alcalinas el perfume se fija mejor gracias a la hidratación de la piel. Al ponerlo sobre la piel desnuda de una persona, el aroma cambia debido a la biología y a la química de la propia piel. Esto sucede porque la piel humana tiene su propio olor, debido a características como el pH, las secreciones sebáceas o la temperatura corporal. Es la combinación del perfume con el olor característico de nuestra piel lo que hace que la misma fragancia pueda oler de forma distinta en cada persona.⁵

Hipótesis

La hipótesis de este trabajo es que es válido aproximar un sistema complejo como un perfume a un sistema ternario agua-etanol-fragancia, y que la proporción de estos componentes da lugar a diferentes propiedades fisicoquímicas que pueden ser extrapoladas a las formulaciones comerciales.

Objetivo

El objetivo es establecer un modelo sencillo que permita el análisis fisicoquímico de perfumes. Una de las características estéticas más importantes del perfume es que se mantenga en su forma monofásica durante toda su vida útil. Al ser una mezcla entre aceite esencial, agua y etanol se obtiene un sistema monofásico a determinadas composiciones. Para hacer el estudio de las correspondientes fracciones molares a las que se obtiene una mezcla homogénea recurriremos a la construcción de diagramas ternarios agua-etanol-aceite.

Empleando el diagrama ternario, se elaborarán diferentes mezclas agua-etanol-aceite para posteriormente medir sus propiedades fisicoquímicas como el pH, densidad y viscosidad y se compararán con perfumes comerciales para ver si existe correlación entre los resultados.

Para comprobar la validez de la aproximación se aumentará el contenido en agua de perfumes comerciales y se observarán los cambios en el producto.

⁴ ¿Qué es el pH en un cosmético? [Internet]. Cursos de cosmética natural - Mentactiva. Mentactiva; 2020 [citado el 29 de abril de 2023]. Disponible en: <https://www.mentactiva.com/que-es-el-ph-en-un-cosmetico/>

⁵ Perfumes E. Qué perfume usar según el pH de la piel [Internet]. Esenzia Perfumes. 2023 [citado el 29 de abril de 2023]. Disponible en: <https://www.esenzia.com/blog/blog-perfumes-originales-curiosidades-frascos/que-perfume-usar-segun-el-ph-de-la-piel>

Materiales y Métodos

Productos.

Eucaliptol (Sigma Aldrich; 99%; PM= 154.25 g/mol; d= 0.921 g/mL); Linalol (Sigma Aldrich; 97%; PM= 154.25 g/mol; d= 0.87 g/mL); Geraniol (Sigma Aldrich; 98%; PM= 154.25 g/mol; d= 0.879 g/mL); Limoneno (Sigma Aldrich; 97%; PM= 136.23 g/mol; d= 0.842 g/mL) y etanol (99%). Las fórmulas moleculares se ilustran en la Figura 2. Se han empleado además diferentes perfumes comerciales que denominaremos agua de colonia, Cologne, Eau de Parfum 1, Eau de Parfum 2, Eau de Toilette 1 y Eau de Toilette 2.

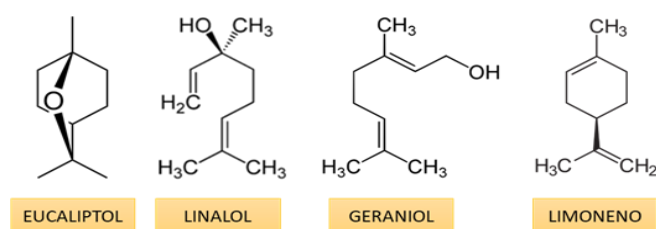


Figura 2. Moléculas empleadas para la construcción de diagramas ternarios. Estas moléculas se han elegido dado que son frecuentemente empleadas como fragancias.

Construcción de diagramas ternarios.

El diagrama ternario está formado por diferentes fracciones molares de agua, aceite esencial y etanol. Para poder delimitar la zona en la que se obtiene una mezcla en una sola fase se elaboraron 2 sistemas, uno rico en agua y otro rico el aceite. El procedimiento se puede observar en la **Figura 3**.

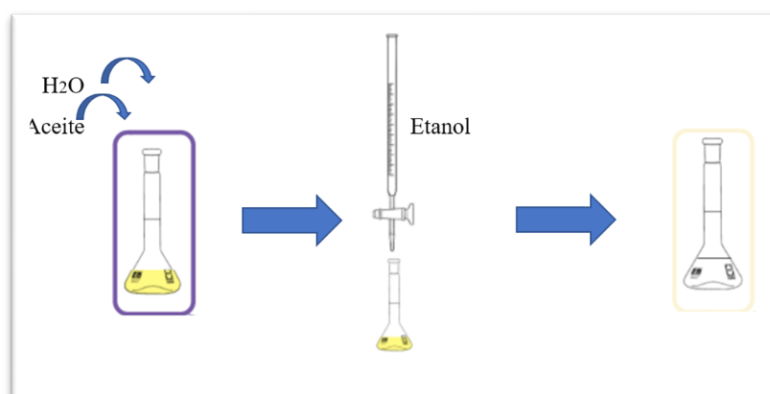


Figura 3. Se añade en un matraz aforado los mL predeterminados de aceite y agua y se añade etanol gota a gota hasta que se observa una fase. El proceso se repite añadiendo un volumen pequeño de aceite/agua según sea sistema rico en aceite o agua

Para poder llevar a cabo esta medición se utilizó un matraz aforado en el que se introdujo la fracción rica en agua o en aceite y se añadieron cantidades crecientes del componente

inmiscible, y tras observar la turbidez se siguió añadiendo etanol hasta que se obtuvo una fase homogénea:

- Para la fase rica en agua se midió 1 mililitro de agua y a continuación se le añadió un volumen pequeño de aceite, se observó que se forma un sistema bifásico y a continuación se fue añadiendo gota por gota etanol para observar cuando se forma un sistema homogéneo y; una vez obtenido, se volvió a añadir un volumen pequeño de aceite. Se repitieron los pasos mencionados anteriormente para conocer a qué proporciones de los tres componentes se observa un sistema homogéneo.
- Para la fase rica en aceite se tomaron 2 mililitros de aceite esencial y a continuación se añadieron cantidades pequeñas y crecientes de agua y etanol para conocer las proporciones a las que el sistema es monofásico.

Con los datos de volúmenes obtenidos se calculó la fracción molar de cada componente en cada adición, aplicando factores de conversión según la densidad del aceite y su peso molecular para conocer el número de moles.

Como ejemplo se muestra en la Tabla 1 los datos para el eucaliptol y el resto de las tablas se encuentran en el anexo adjunto

Tabla 1. Resultados para la construcción del diagrama ternario eucaliptol-agua-etanol. La tabla muestra los datos de los volúmenes obtenidos en cada punto y su paso a fracciones molares para su representación en los diagramas ternarios. ($H_2O \equiv$ Agua; $ec \equiv$ eucaliptol; $et \equiv$ etanol)

V_{H_2O} (mL)	V_{ec} (mL)	V_{Et} (mL)	m_{H_2O} (g)	m_{ec} (g)	m_{Et} (g)	n_{H_2O}	n_{ec}	n_{Et}	n_T	X_{H_2O}	X_{ec}	X_{Et}
1,0	0,0	0,6	1,00	0,02	0,49	0,056	0,000	0,011	0,066	0,84	0,00	0,16
1,0	0,1	0,7	1,00	0,05	0,57	0,056	0,000	0,012	0,068	0,82	0,00	0,18
1,0	0,1	0,9	1,00	0,09	0,73	0,056	0,001	0,016	0,072	0,77	0,01	0,22
1,0	0,2	1,1	1,00	0,18	0,89	0,056	0,001	0,019	0,076	0,73	0,02	0,25
1,0	0,4	1,3	1,00	0,37	1,05	0,056	0,002	0,023	0,081	0,69	0,03	0,28
1,0	0,6	1,5	1,00	0,55	1,22	0,056	0,004	0,026	0,086	0,65	0,04	0,31
1,0	0,7	1,6	1,00	0,64	1,26	0,056	0,004	0,027	0,087	0,64	0,05	0,31
0,0	2,0	0,2	0,02	1,84	0,16	0,001	0,012	0,004	0,017	0,07	0,72	0,21
0,1	2,0	0,4	0,05	1,84	0,32	0,003	0,012	0,007	0,022	0,13	0,55	0,32
0,1	2,0	0,7	0,10	1,84	0,57	0,006	0,012	0,012	0,030	0,19	0,40	0,41
0,2	2,0	1,0	0,20	1,84	0,81	0,011	0,012	0,018	0,041	0,27	0,29	0,43
0,4	2,0	1,3	0,40	1,84	1,05	0,022	0,012	0,023	0,057	0,39	0,21	0,40
0,6	2,0	1,7	0,60	1,84	1,38	0,033	0,012	0,030	0,075	0,44	0,16	0,40
0,7	2,0	1,9	0,70	1,84	1,54	0,039	0,012	0,033	0,084	0,46	0,14	0,40

Para comprobar que la homogeneidad entre las 3 fases se rompe cuando se perturban las fracciones molares se añadió agua a 5 mililitros de perfume comercial con una bureta gota a gota hasta que se observó la turbidez, que indicaría ruptura del equilibrio.

Preparación de mezclas agua-etanol-aceite.

Basándonos en el diagrama ternario de la Figura 1, se establecieron mezclas en diferentes proporciones para la obtención de modelos de los distintos productos comerciales (Tabla

2). Las propiedades fisicoquímicas de estas mezclas fueron evaluadas para la identificación de la influencia de la composición en las mismas.

Tabla 2. Proporciones de linalol-agua-etanol seleccionadas para la evaluación de sus propiedades fisicoquímicas.

		Fracciones molares	V (mL)
<i>Eau de Cologne</i>	Linalol	0,03	1,6
	Etanol	0,74	12,9
	Agua	0,23	1,2
<i>Eau de Toilette</i>	Linalol	0,11	4,9
	Etanol	0,43	6,1
	Agua	0,46	2,1
<i>Eau de Parfum</i>	Linalol	0,17	6,0
	Etanol	0,63	7,2
	Agua	0,20	0,7
<i>Parfum</i>	Linalol	0,27	8,0
	Etanol	0,71	6,7
	Agua	0,02	0,1

Medidas de pH.

Para la medida de pH se utilizó un pHmetro de sobremesa modelo Sension+ PH3 de la casa comercial Hach (Figura 4) perfectamente calibrado.⁶ Este medidor incorpora un sensor de vidrio y un tubo de referencia. La sonda de pH mide la actividad de los iones de hidrógeno mediante la generación de una pequeña cantidad de tensión en el sensor y el tubo de referencia. El medidor de voltaje convierte a un valor de pH con una precisión de 0,02 unidades de pH.



Figura 4. Sistema empleado en este TFG para la medida de pH. Imagen tomada de la página comercial.

⁶ Funcionamiento, cuidado y calibrado del medidor de pH [Internet]. Medidordeph.com. [citado el 1 de mayo de 2023]. Disponible en: <https://medidordeph.com/funcionamiento-cuidado-calibrado-medidor-de-ph>

Medidas de densidad.

Para la medida de densidades se ha empleado un picnómetro Gay-Lussac (Figura 5a).⁷ Este consiste en un recipiente formado por un matraz con forma de pera de boca esmerilada y un tapón autoenrasante. Como su volumen es conocido, puede llenarse con un líquido y pesando podemos determinar la densidad de ese líquido. La calibración del picnómetro se ha realizado con agua Milli-Q, cuya densidad es conocida a cada temperatura para establecer el volumen.⁸ Posteriormente, por diferencia de pesada se ha podido determinar la densidad de las muestras analizadas en g/mL.

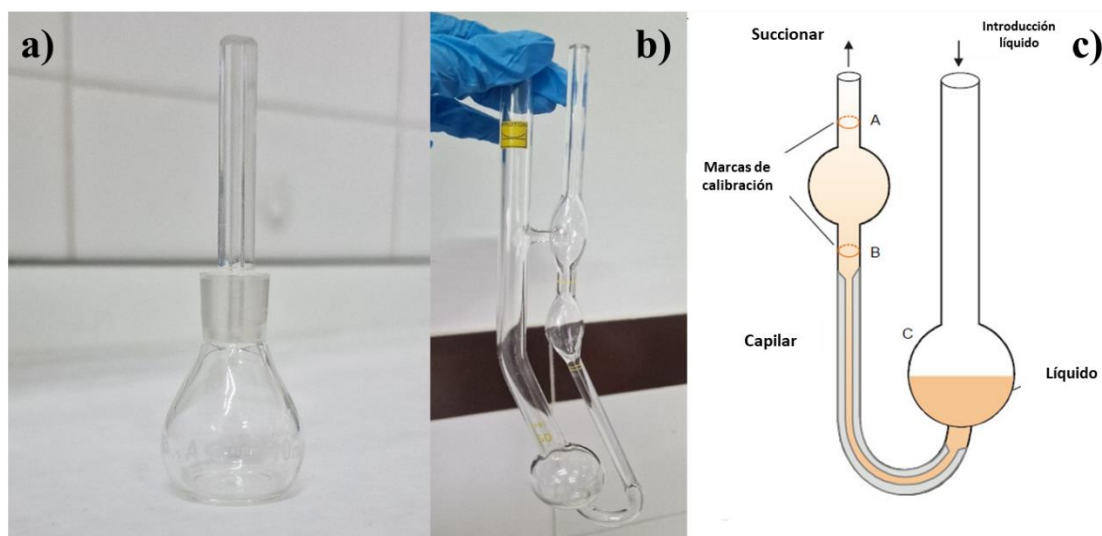


Figura 5. a) picnómetro de Gay-Lussac empleado para la medición de densidades; b) viscosímetro de Ostwald empleado en este TFG; c) esquema del diseño básico de un viscosímetro capilar de Ostwald.

Medidas de viscosidad.

Para la medición de la viscosidad de los perfumes comerciales se empleó un viscosímetro capilar conocido como viscosímetro de Ostwald (Figura 5b y 5c).⁹ Básicamente se mide el tiempo en que un fluido tarda en recorrer una distancia determinada por dos marcas o medidas. El viscosímetro de Ostwald está formado por un capilar unido por su parte inferior a una ampolla C y su parte superior a otra ampolla. En la primera se introduce el agua por el tubo principal; por su parte, en la segunda, el líquido es introducido por el bulbo que posee las marcas de nivel A y B, aquí se controlará el descenso de la muestra. Debajo del bulbo principal hay uno secundario, este permite el almacenamiento de líquido. En nuestro caso, se realizaron medidas a 40°C. Una vez se alcanzada la temperatura deseada tras un tiempo de estabilización en un baño termostático, se cronometró cuanto tarda el líquido en llegar desde el primer enfase al segundo. El producto entre la constante del viscosímetro (en nuestro caso, 0.0042594 según el fabricante), el tiempo en segundos

⁷ quercusblog. Método del picnómetro para calcular densidades [Internet]. El blog de QuercusLab. 2015 [citado el 1 de mayo de 2023]. Disponible en: <https://quercuslab.es/blog/metodo-del-picnometro-para-determinar-densidades/>

⁸ Densidad del agua [Internet]. Química | Química Inorganica. [citado el 1 de mayo de 2023]. Disponible en: <https://www.fullquimica.com/2012/04/densidad-del-agua.html>

⁹ Ruiz G. ▷ Viscosímetro de Ostwald [Internet]. Net Interlab. Net-InterLab S.A.; 2021 [citado el 1 de mayo de 2023]. Disponible en: <https://net-interlab.es/viscosimetro-de-ostwald/>

y la densidad en g/mL, se obtuvieron los resultados de las viscosidades absolutas en centipoise.

$$\text{Viscosidad absoluta} = C \times t \times d$$

Resultados

Los diagramas ternarios construidos para cada molécula empleada se muestran en la Figura 6. Se ha representado en cada eje la fracción molar de agua (verde), etanol (azul) y la molécula empleada (rosa) Para todos los casos se puede delimitar una curva de solubilidad trazada por los puntos de equilibrio establecidos según la parte experimental. Estos puntos de equilibrio representan aquellas situaciones en las que se ha pasado de un sistema bifásico a uno monofásico. Cualquier punto por debajo de la curva (región violeta) define un sistema bifásico. Y toda el área encima de la curva indica las composiciones a las que el sistema es monofásico y, por tanto, homogéneo.

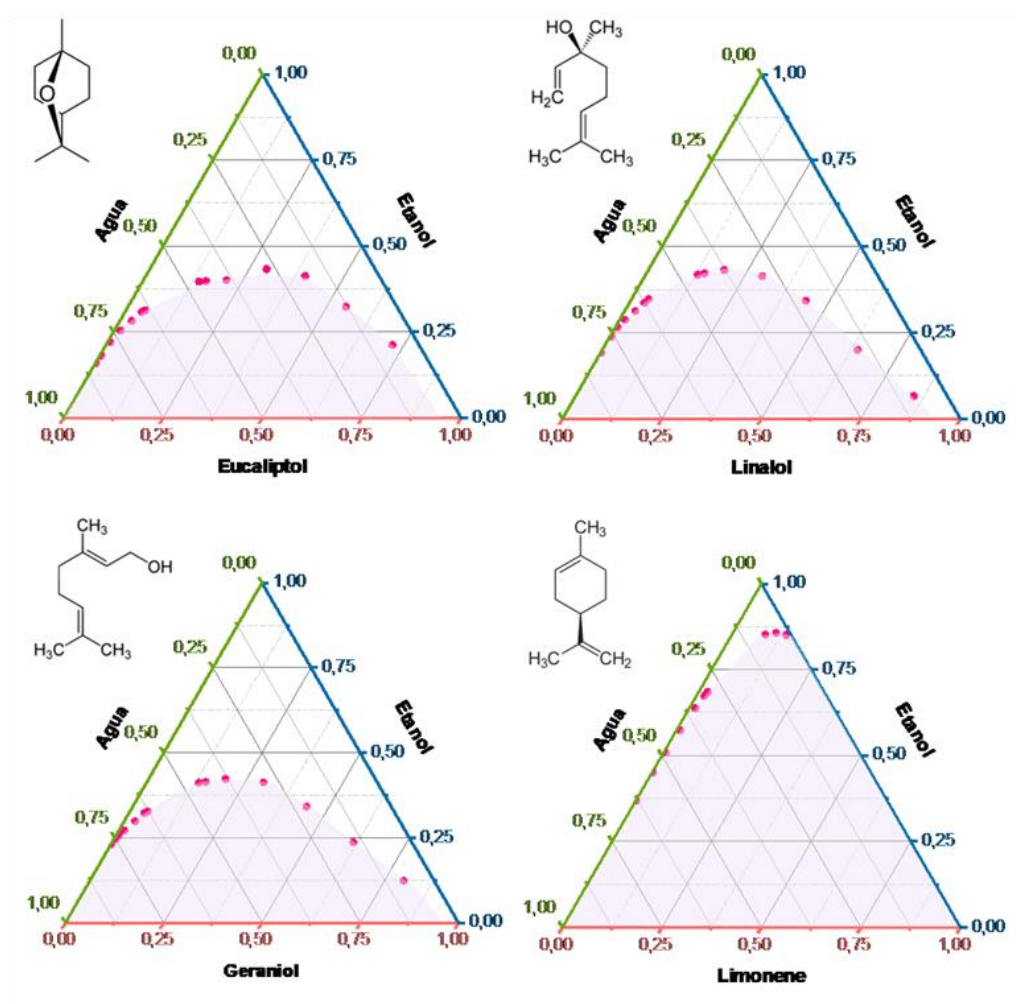


Figura 6. Diagramas ternarios construidos. Panel superior: eucaliptol y linalol. Panel inferior: geraniol y limoneno.

Como se puede observar en los diagramas, para tres de las cuatro moléculas el comportamiento es similar. Por encima de cierto porcentaje de etanol (40%) se obtiene en todos

los casos un sistema homogéneo monofásico excepto para el limoneno. La razón de esto radica en que comparado con los otros aceites esenciales el limoneno es mucho menos soluble en agua, (como se puede ver en la Tabla 3) necesitando un volumen mucho más elevado de etanol (90%).¹⁰

Tabla 3. Solubilidades en agua de los aceites empleados en este TFG medidas a 25°C.¹¹

Moléculas	Solubilidades (mg/L)
Eucaliptol	3500
Linalol	1590
Geraniol	100
Limoneno	7.5

Se obtuvieron resultados de las densidades y el pH de las diferentes mezclas formuladas. (Tabla 4).

Tabla 4. Propiedades fisicoquímicas medidas para diferentes mezclas linalol-agua-etanol.

		Fracciones molares	V (mL)	Densidad (g/mL)	pH
<i>Eau de Cologne</i>	Linalol	0,03	1,6	0,831	5,6
	Etanol	0,74	12,9		
	Agua	0,23	1,2		
<i>Eau de Toilette</i>	Linalol	0,11	4,9	0,875	4,8
	Etanol	0,43	6,1		
	Agua	0,46	2,1		
<i>Eau de Parfum</i>	Linalol	0,17	6,0	0,846	4,0
	Etanol	0,63	7,2		
	Agua	0,20	0,7		
<i>Parfum</i>	Linalol	0,27	8,0	0,841	4,9
	Etanol	0,71	6,7		
	Agua	0,02	0,1		
Etanol				0,803	4,8
Agua				1,000	5,1

Como se puede observar en la Tabla 4 el etanol tiene menor densidad (0.803 g/mL) que el agua (1 g/mL). Por lo tanto, a priori, se podría asumir que un perfume que tenga mayor contenido en etanol tendrá una menor densidad que un perfume que tenga mayor cantidad de agua. Esto se puede comprobar en las mezclas formadas que la densidad más baja (0.831 g/ mL) corresponde al *Eau de Cologne* que es el que mayor cantidad de etanol tiene. Y la mayor densidad corresponde con *el Eau de Toilette* (0.875 g/mL) que es el que tiene mayor cantidad de agua. Por tanto, podríamos concluir que la proporción de etanol y agua en el producto va a tener una influencia directa en el valor obtenido de la densidad.

¹⁰ Marcus J, Klossek ML, Touraud D, Kunz W. Nano-droplet formation in fragrance tinctures: Nano-droplet formation in fragrance tinctures. *Flavour Fragr J* [Internet]. 2013;28(5):294–9. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1002/ffj.3172>

¹¹ PubChem. PubChem.Nih.gov. [Internet]. [citado el 9 de mayo de 2023]. Disponible en: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>

Sin embargo, se precisa cautela con los valores de pH obtenidos dado que al trabajar con etanol como disolvente, la escala de pH difiere de la de medios acuosos. Cuando un disolvente distinto del agua está presente en cantidades considerables, se produce un cambio en la lectura del pH debido a los efectos de los disolventes no acuosos en la actividad de los iones de hidrógeno. Por ejemplo, el agua pura tiene un pH de 7,0, pero para el etanol puro este es 7,44. Esto no quiere decir que el etanol tenga un pH más básico, simplemente que la actividad de los iones hidrógeno cambia en dicho disolvente.

En la Tabla 5 se muestran los valores de densidad, pH y viscosidad obtenidos para las diferentes formulaciones comerciales. Como se puede ver entre los perfumes comerciales, el Agua de Colonia es el que mayor densidad tiene por lo que se podría suponer que es el que mayor cantidad de agua tiene; y el *Cologne* es el que menor densidad tiene por lo que debería tener una mayor cantidad de etanol.

Tabla 5. Propiedades fisicoquímicas medidas para diferentes perfumes comerciales.

	Densidad (g/ml)	pH	Viscosidad (cP)
Agua de Colonia	0,98	6,6	1,40
<i>Cologne</i>	0,85	5,1	1,94
<i>Eau de Toilette 1</i>	0,86	7,0	2,18
<i>Eau de Toilette 2</i>	0,86	7,9	2,27
<i>Eau de Parfum 1</i>	0,86	5,0	2,21
<i>Eau de Parfum 2</i>	0,86	5,6	1,98
Agua	1,00	5,1	0,80
Etanol	0,80	4,8	1,38

A la hora de utilizar un perfume se busca por fines estéticos que no deje residuo tras su uso; por este motivo la viscosidad es un parámetro muy importante y se busca que el perfume tenga la menor viscosidad posible para que al evaporarse el etanol no existan restos en la piel, además de para facilitar su aplicación. Se observa que el perfume menos viscoso es el Agua de colonia y es el que mayor cantidad de agua tiene, lo cual concuerda con los resultados obtenidos para los componentes puros. Los *Eau de Toilette* y *Eau de Parfum* tienen viscosidades parecidas.

No es posible extrapolar los datos del pH de nuestro modelo sencillo a los perfumes comerciales porque el pH depende mucho más de los componentes de la fragancia que de la proporción etanol-agua. Cada componente de una fragancia aporta acidez o basicidad al perfume y esto depende de su pKa y porcentaje en el perfume. Teniendo en cuenta que todas las mezclas formuladas tienen un pH ácido y la mayoría de los perfumes comerciales son ácidos también excepto uno, podemos concluir que dicho producto contiene algún componente que hace que su valor de pH varíe con respecto al resto. Saber la composición exacta de los productos comerciales no es una tarea fácil dado que la información proporcionada es limitada. Sin embargo, en la lista de ingredientes del producto que nos da un pH superior es el glicerol, que no aparece en el resto de los productos. El glicerol o glicerina genera un pH generalmente alrededor de 7,¹² lo cual puede explicar el valor que

¹² Foodb.ca. [citado el 9 de mayo de 2023]. Disponible en: <https://foodb.ca/compounds/FDB000756>

obtenemos en este caso. Además, este compuesto es conocido por ser un líquido con una viscosidad alta, lo cual explicaría por qué la viscosidad de este producto comercial en concreto es ligeramente más alta que la del resto.

A la hora de diluir los perfumes comerciales se observa que según el tipo de perfume que sea el equilibrio se rompe a un volumen de agua diferente (efecto ilustrado en la Figura 7). A la hora de formular un perfume siempre existe un exceso de etanol, y dependiendo de cuanto etanol haya se necesita más o menos cantidad de agua. En caso del *Cologne* es el que tiene más agua y es el que mayor volumen de agua ha necesitado (1.05 mL) para romper el equilibrio. Para el *Eau de Toilette* (0.55 mL) que en principio tiene mayor cantidad de etanol debido a su viscosidad y comparado con el *Cologne* se ha consumido menos agua que para el *Eau de Parfum* (0.9 mL), esto confirmaría que cuando más agua tenga el perfume, debido al exceso de etanol que tiene, hasta cierto punto de exceso de agua no se percibe la rotura de fases, pero pasado ese punto sí.



Figura 7. Se puede observar el perfume antes (izquierda) de que se le añada agua y después (derecha) de añadir el agua. Se puede observar la ruptura del sistema monofásico.

Conclusiones

Un perfume está compuesto por agua, etanol y una fragancia que conforman un diagrama ternario. Se han construido diagramas ternarios agua-etanol-aceite esencial; para ello se han empleado como aceite esencial moléculas frecuentemente utilizadas en la industria como el eucaliptol, linalol, geraniol y limoneno. Se obtuvieron resultados similares para el eucaliptol, linalol y geraniol; pero el limoneno mostró un diagrama ternario diferente debido a su baja solubilidad en agua, debiendo emplearse alrededor de un 90% de etanol para obtener un sistema monofásico.

Se observa correlación entre los perfumes comerciales y los formulados en cuanto a densidad y viscosidad, propiedades que dependen exclusivamente de la proporción agua/etanol; se puede llegar a la conclusión de que dependiendo de cuanto etanol tenga el perfume su densidad se ve disminuida debido a que la densidad del etanol es menor que el agua y cuanto más agua tenga el perfume menos viscoso es porque el agua es el componente menos viscoso de los que conforman el diagrama ternario y es quien ayuda a que el perfume se fije a la piel y no deje residuo. No se ha encontrado correlación entre los datos de los pH porque depende mayoritariamente de las moléculas de la fragancia y no se pudo extrapolar a un sistema sencillo de una sola molécula.

Se ha comprobado que todos los perfumes siguen un sistema ternario para poder permanecer como una sola fase durante su vida útil al observar la formación de dos fases al perturbar las fracciones molares con la adición de agua.

ANEXO

V H ₂ O (mL)	V Linalol (mL)	V Etanol (mL)	m H ₂ O (g)	m Linalol (g)	m Etanol (g)	n H ₂ O	n Linalol	n Etanol	n Totales	X H ₂ O	X Linalol	X Etanol
1,0	0,0	0,8	1,00	0,02	0,61	0,056	0,000	0,013	0,069	0,81	0,00	0,19
1,0	0,1	1,0	1,00	0,04	0,81	0,056	0,000	0,018	0,073	0,76	0,00	0,24
1,0	0,1	1,2	1,00	0,09	0,93	0,056	0,001	0,020	0,076	0,73	0,01	0,26
1,0	0,2	1,3	1,00	0,17	1,05	0,056	0,001	0,023	0,080	0,70	0,01	0,29
1,0	0,4	1,5	1,00	0,35	1,22	0,056	0,002	0,026	0,084	0,66	0,03	0,31
1,0	0,6	1,7	1,00	0,52	1,38	0,056	0,003	0,030	0,089	0,63	0,04	0,34
1,0	0,7	1,8	1,00	0,61	1,46	0,056	0,004	0,032	0,091	0,61	0,04	0,35
0,0	2,0	0,1	0,02	1,74	0,04	0,001	0,011	0,001	0,013	0,08	0,85	0,07
0,1	2,0	0,2	0,05	1,74	0,16	0,003	0,011	0,004	0,018	0,16	0,64	0,20
0,1	2,0	0,5	0,10	1,74	0,41	0,006	0,011	0,009	0,026	0,22	0,44	0,34
0,2	2,0	0,9	0,20	1,74	0,73	0,011	0,011	0,016	0,038	0,29	0,30	0,41
0,4	2,0	1,5	0,40	1,74	1,17	0,022	0,011	0,025	0,059	0,38	0,19	0,43
0,6	2,0	1,9	0,60	1,74	1,50	0,033	0,011	0,033	0,077	0,43	0,15	0,42
0,7	2,0	2,1	0,70	1,74	1,66	0,039	0,011	0,036	0,086	0,45	0,13	0,42

V H ₂ O (mL)	V Geraniol (mL)	V Etanol (mL)	m H ₂ O (g)	m Geraniol (g)	m Etanol (g)	n H ₂ O	n Geraniol	n Etanol	n Totales	X H ₂ O	X Geraniol	X Etanol
1,0	0,0	1,0	1,00	0,02	0,77	0,056	0,000	0,007	0,072	0,707	0,000	0,23
1,0	0,1	1,1	1,00	0,04	0,85	0,056	0,000	0,008	0,074	0,705	0,000	0,25
1,0	0,1	1,1	1,00	0,09	0,89	0,056	0,001	0,009	0,075	0,704	0,001	0,26
1,0	0,2	1,2	1,00	0,18	0,97	0,056	0,001	0,011	0,078	0,701	0,001	0,27
1,0	0,4	1,4	1,00	0,35	1,13	0,056	0,002	0,015	0,082	0,607	0,003	0,30
1,0	0,6	1,6	1,00	0,53	1,30	0,056	0,003	0,018	0,087	0,604	0,004	0,32
1,0	0,7	1,7	1,00	0,62	1,34	0,056	0,004	0,019	0,089	0,603	0,005	0,33
0,0	2,0	0,1	0,02	1,76	0,08	0,001	0,001	0,002	0,014	0,008	0,800	0,12
0,1	2,0	0,3	0,05	1,76	0,20	0,003	0,001	0,004	0,019	0,015	0,610	0,24
0,1	2,0	0,5	0,10	1,76	0,41	0,006	0,001	0,009	0,026	0,022	0,440	0,34
0,2	2,0	0,9	0,20	1,76	0,73	0,011	0,001	0,016	0,038	0,029	0,300	0,41
0,4	2,0	1,4	0,40	1,76	1,13	0,022	0,001	0,025	0,058	0,038	0,200	0,42
0,6	2,0	1,8	0,60	1,76	1,46	0,033	0,001	0,022	0,076	0,044	0,150	0,41
0,7	2,0	2,0	0,70	1,76	1,62	0,039	0,001	0,025	0,085	0,046	0,130	0,41

V H ₂ O (mL)	V Limoneno (mL)	V Etanol (mL)	m H ₂ O (g)	m Limoneno (g)	m Etanol (g)	n H ₂ O	n Limoneno	n Etanol	n Totales	X H ₂ O	X Limoneno	X Etanol
1,0	0,0	1,9	1,00	0,02	1,50	0,056	0,000	0,033	0,088	0,63	0,00	0,37
1,0	0,1	2,6	1,00	0,04	2,11	0,056	0,000	0,046	0,102	0,55	0,00	0,45
1,0	0,1	3,3	1,00	0,08	2,67	0,056	0,001	0,058	0,114	0,49	0,01	0,51
1,0	0,2	4,4	1,00	0,17	3,52	0,056	0,001	0,076	0,133	0,42	0,01	0,57
1,0	0,4	5,8	1,00	0,34	4,70	0,056	0,002	0,102	0,160	0,35	0,02	0,64
1,0	0,6	7,0	1,00	0,50	5,63	0,056	0,004	0,122	0,181	0,31	0,02	0,67
1,0	0,7	7,4	1,00	0,59	5,99	0,056	0,004	0,130	0,190	0,29	0,02	0,68
0,0	2,0	4,4	0,02	1,68	3,52	0,001	0,012	0,076	0,090	0,01	0,14	0,85
0,1	2,0	5,5	0,07	1,68	4,46	0,004	0,012	0,097	0,113	0,03	0,11	0,86
0,2	2,0	7,1	0,17	1,68	5,75	0,009	0,012	0,125	0,147	0,06	0,08	0,85