

Olejki eteryczne : opis wybranych składników w oparciu o metody modelowania molekularnego = Essential oils : a description of their selected ingredients properties on the basis of molecular modeling methods.

---

Autorzy

Beata Kizior

Jarosław J. Panek

Aneta Jezierska

Rok wydania

2020

CzasopismoAesthetic Cosmetology and  
MedicineNumer woluminu

9

Strony

501-508

Kolekcja

Naukowa

Język

Polski

Typ publikacji

Artykuł

Streszczenie

Molecular Modeling is a set of methods, which are an important tool in theoretical description of molecules as well as in design of new compounds with defined physico-chemical features.

In this article, the results of theoretical investigations on the basis of selected methods of computational chemistry are presented. The chosen ingredients of essential oils served as model systems for our computations. Thanks to the diverse group of chemical compounds classified as essential oils, various fragrance notes are obtained and further used as the basic ingredients of perfumery products. Therefore, the essential oils are decisive concerning the composition and quality of perfumes. In addition, they exhibit healing properties, which is associated with an increasing interest in the group of these compounds. The chemical diversity of these compounds has caused us to show an application of computer simulations based on Density Functional Theory (DTF) for selected 12 ingredients of essential oils. We will present and discuss computed values of geometric parameters of these compounds, their physico-chemical properties (logP), maps of electrostatic potential, in order to show the reader potential applications of computational chemistry in cosmetology.

Modelowanie molekularne jest zbiorem metod, które stanowią ważne narzędzie w opisie teoretycznym cząsteczek, a także w projektowaniu nowych związków o określonych właściwościach fizyko-chemicznych.

W artykule zostały przedstawione rezultaty badań teoretycznych w oparciu o wybrane metody chemii obliczeniowej. Jako związki modelowe wybrano składniki olejków eterycznych. Dzięki różnorodnej grupie związków chemicznych zaliczanych do olejków eterycznych można uzyskać różnorakie nuty zapachowe, które są wykorzystywane jako bazowe komponenty wyrobów perfumeryjnych. Olejki eteryczne decydują o walorach oraz jakości perfum. Przejawiają one właściwości lecznicze, co powoduje, że zainteresowanie tą grupą związków jest coraz większe.

Pokazano zastosowanie symulacji komputerowych według Teorii Funkcjonału Gęstości (DFT) dla wybranych 12 składników olejków eterycznych. Zaprezentowano i omówiono wartości obliczonych parametrów geometrycznych oraz fizyko-chemicznych (logP), mapy potencjału elektrostatycznego, w celu przybliżenia wykorzystania chemii komputerowej w kosmetologii.

#### Słowa kluczowe

essential oils, perfumes, molecular modeling, density functional theory DTF

olejki eteryczne, perfumy, modelowanie molekularne, teoria funkcyjonału gęstości

#### Adres publiczny

<http://aestheticcosmetology.com/wp-content/uploads/2021/01/ke-2020-06-acm-kizior-olejki-eteryczne.pdf>