



Ahmet İnce

Ar-Ge Müdürü / R&D Manager
3-S Mühendislik



Ertuğrul Kaya

Ar-Ge Yöneticisi / R&D Executive
3-S Mühendislik

Kozmetikte ilerici adımlar: Kaprilik kaprik asitin esterlerinin sentezi ve kullanım alanları

Progressive steps in cosmetics: Synthesis and applications of caprylic/capric acid esters

Esterler, çeşitli sektörlerde geniş bir kullanım alanına sahip olan çok yönlü oleokimyasallardır. Esterler, biyobazlı yapıları sayesinde kozmetik sektöründe geniş bir kullanım alanı bulan ve farklı uygulama olanakları sunan bileşiklerdir. Örneğin, benzil asetat gibi kısa zincirli esterler genellikle parfüm formülasyonlarında tercih edilirken, Orta zincirli karbon atomu içeren bazı esterler, yumuşatıcı olarak kullanılmakta ve kişisel bakım ürünlerinin formülasyonlarına çeşitli faydalar sağlamaktadır. Bu esterler, geleneksel yağlara kıyasla daha az yağlı bir his bırakarak formüllerin duyuşal özelliklerini iyileştirmekte, ayrıca organik UV filtrelerini çözme ve pigmentlerin ıslanmasını kolaylaştırma gibi işlevler sunmaktadır. Bu nitelikleri sayesinde esterler, güneş koruyucular ve renkli kozmetik ürünlerde

Esters are versatile oleochemicals with a wide range of applications across various industries. Due to their bio-based structures, esters are particularly valued in the cosmetics sector, where they offer diverse application opportunities. For instance, short-chain esters such as benzyl acetate are commonly used in perfume formulations, while certain medium-chain esters serve as emollients, providing multiple benefits in personal care product formulations. These esters enhance the sensory properties of formulations by leaving a less greasy feel compared to conventional oils. Additionally, they perform functions such as dissolving organic UV filters and facilitating pigment wetting. Thanks to these attributes, esters play a key role in sunscreens and color cosmetics, while also improving the textural properties of skincare products. Longer-chain esters,

önemli bir bileşen olarak yer almakta ve cilt bakım ürünlerinin dokusal özelliklerini geliştirmektedir. Daha uzun zincirli esterler ise emülsiyonların kıvamını artırmak ve stabilitesini sağlamak amacıyla kullanılmaktadır kozmetik sektöründe kullanılmaktadır [1].

Kozmetik sektöründe, esterler genellikle yumuşatıcılar, çözücüler, koyulaştırıcı maddeler, yüzey aktif maddeler ve kokular gibi çeşitli fonksiyonlarda etkin bir şekilde kullanımı yaygındır [2]. Son yıllarda artan çevre duyarlılığı, kozmetik sektörünü sentetik esterlerden ziyade biyobozunur ve çevre dostu alternatiflere yönelmeye teşvik etmektedir. Bu çerçevede, kaprilik kaprik asit gibi bitkisel yağ asitlerinden elde edilen biyobozunur esterler, çevresel etkileri azaltmayı ve sürdürülebilir üretim hedeflerini desteklemeyi amaçlayan kozmetik sektörü için cazip bir seçenek sunmaktadır. Kaprilik kaprik asit, doymuş yağ asitlerinden türetilmiş ve biyolojik olarak aktif bir yağ asidi türü olup, kısa ve orta zincirli yağ asitleri sınıfına dahildir. Hindistancevizi, palm meyvesi ve süt ürünleri gibi doğal kaynaklarda bulunmakta ve sindirim ile metabolizma süreçlerinde diğer yağ asitlerine kıyasla daha hızlı işlenmektedir [3]. Kaprilik kaprik asit türevi esterler, kozmetik ürünlerde biyobozunur özellik kazandırırken aynı zamanda estetik ve işlevsel avantajlar da sunmaktadır. Bu çevre dostu bileşikler, kozmetik endüstrisinde sürdürülebilirlik çabalarına katkı sağlamakta ve tüketicilerin çevresel bilinçlenme beklentilerini karşılamaktadır. Çalışmamızda, kaprilik kaprik asidin biyobazlı alkollerle reaksiyonu sonucu elde edilen esterlerin incelenmesi hedeflenmiştir. Bu araştırma, hem kozmetik endüstrisinin sürdürülebilirlik hedeflerine destek olmayı hem de kaprilik kaprik asit ve türevlerinin kozmetik formülasyonlardaki etkin kullanımını ön plana çıkarmayı amaçlamaktadır.

Kullanılan Metotlar

Sentezlenen ürünlere asit numarası (ASTM D974), sabunlaşma değeri (AOCS T1 1a-64), viskozite (ASTM D445), iyot indisi (AOCS Tg 1a-64), parlama noktası (ASTM D92), yoğunluk (ASTM D1298) gibi spesifik parametreler bakılmıştır. Sentezlenen ürünlerin Tablo 1'de bu analizlere ait sonuçlar paylaşılmıştır.

Sentezlenen Gliserin Kaprilik Kaprat Süksinat sentezine ait sentez mekanizması Şekil 1'de, ¹H-NMR ve ¹³C-NMR spektrumları Şekil 2 ve 3'te verilmiştir. Sentezlenen esterlerin görünimleri Şekil 4'te verilmiştir.

on the other hand, are employed to increase viscosity and ensure the stability of emulsions in cosmetic formulations [1].

In the cosmetics industry, esters are effectively utilized in various functions, including as emollients, solvents, thickening agents, surfactants, and fragrance components [2]. In recent years, growing environmental awareness has encouraged the cosmetics sector to shift from synthetic esters to biodegradable and eco-friendly alternatives. Within this context, biodegradable esters derived from vegetable fatty acids, such as caprylic/capric acid, offer an attractive option for reducing environmental impact and supporting sustainable production goals in the cosmetics sector.

Caprylic/capric acid is a type of saturated fatty acid with biological activity, belonging to the class of short- and medium-chain fatty acids. It is naturally found in sources such as coconut oil, palm kernel oil, and dairy products and is metabolized more rapidly than other fatty acids during digestion and metabolic processes [3]. Esters derived from caprylic/capric acid not only impart biodegradable properties to cosmetic products but also provide aesthetic and functional advantages. These eco-friendly compounds contribute to the sustainability efforts of the cosmetics industry and meet consumers' growing expectations for environmentally conscious products.

This study aims to examine esters synthesized from the reaction of caprylic/capric acid with bio-based alcohols. The research seeks to support the sustainability goals of the cosmetics industry while highlighting the effective utilization of caprylic/capric acid and its derivatives in cosmetic formulations.

Methods

Specific parameters such as acid value (ASTM D974), saponification value (AOCS T1 1a-64), viscosity (ASTM D445), iodine value (AOCS Tg 1a-64), flash point (ASTM D92), and density (ASTM D1298) were evaluated for the synthesized products. The results of these analyses are presented in Table 1.

The synthesis mechanism of Glycerin Caprylic Caprate Succinate is shown in Figure 1, while the ¹H-NMR and ¹³C-NMR spectra are provided in Figures 2 and 3, respectively. The visual appearances of the synthesized esters are displayed in Figure 4.

Sonuçlar ve Tartışma / Results and Discussion

Tablo 1. Sentezlenen ürünlere ait parametre sonuçları.
Table 1. Results of Parameters for Synthesized Products

Ürünler Product Code	Ürün Tanımı Product Description	Viskozite (40°C) Viscosity (40°C)	Viskozite (100°C) Viscosity (100°C)	Viskozite İndeksi Viscosity Index	Yoğunluk Density	Asit numarası Acid Value	Parlama Noktası Flash Point	Sabunlaşma Değeri Saponification Value	İyot İndisi Iodine Value
		mm ² /s	mm ² /s	-	(kg/m ³) (20 °C)	(mgKOH/g)	°C	(mgKOH/g)	(gI ₂ /100g)
TRIEST CMCT-0811	Gliserin Kaprilik Kapat Süksinat Glycerin Caprylic Caprate Succinate	76,5	11,9	150	1010	1,0	262	433	0,35
TRIEST MCT-6411	Gliserin Kaprilat Kapat Glycerin Caprylate Caprate	14,9	3,9	168	947,3	0,4	246	340,2	0,21
TRIEST LMCC-0611	Lauril miristil kaprilat kapat Lauryl Myristyl Caprylate Caprate	6,3	2,2	185	861,5	0,3	190	173	0,61

Asit değeri, bir maddenin içerdiği karboksilik asit gruplarının miktarını belirler ve ürün stabilitesini doğrudan etkilemektedir. Yüksek asit değerleri, kimyasal bozunmaya yol açarak kozmetik ürünlerin performansını olumsuz etkileyebilir. Esterlerde sabunlaşma sayısı, formülde kaç ester bağının bulunduğunu ve bu bağların hidrolizle ne kadar kolay parçalanabileceğini göstermektedir. Sabunlaşma sırasında ester bağları, bazik koşullarda su ile reaksiyona girerek sabun ve alkol oluşturur [4].

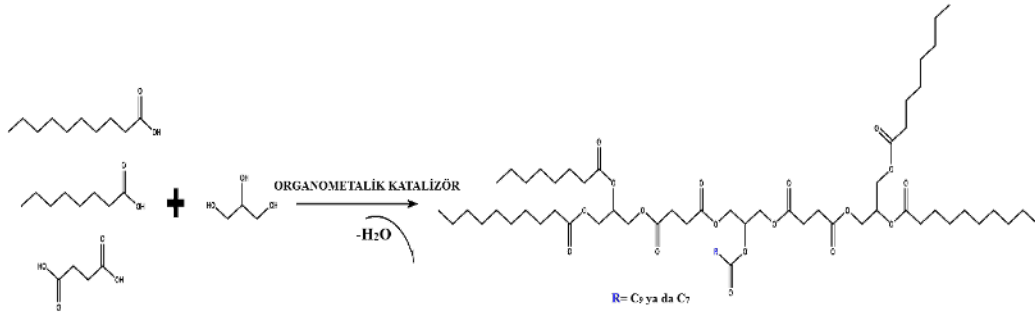
Esterlerin viskozitesi, ürünlerin uygulama hissini ve formülasyon akışkanlığını etkilemektedir. Düşük viskozite daha hızlı akış sağlarken, yüksek viskozite daha yoğun bir his yaratır. Viskozite indeksi, bir esterın sıcaklık değişimlerine karşı viskozitesindeki kararlılığı ifade etmektedir. Yüksek viskozite indeksine sahip esterler, geniş sıcaklık aralıklarında daha stabil bir performans gösterir ve kozmetik formülasyonlar için avantajlıdır [5].

İyot değeri, esterın yapısındaki doymamış yağ asitlerini ve çift bağ sayısını ölçerek oksidasyona karşı dayanıklılığını belirler. Düşük iyot değerleri, esterlerin daha kararlı ve uzun raf ömrüne sahip olduğunu gösterir, bu da kozmetik ürünlerin dayanıklılığını artırır. Bu özellikler, esterın kozmetik endüstrisindeki performansını ve stabilitesini optimize etmek için kritik öneme sahiptir [6].

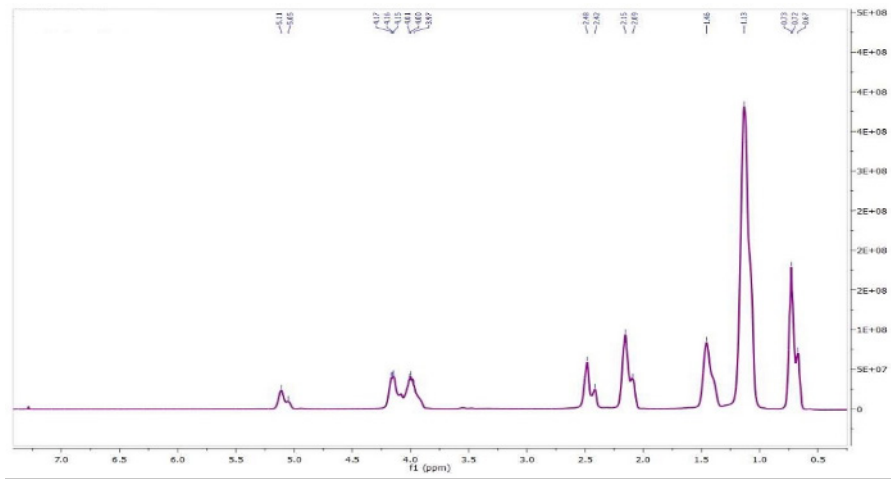
The acid value determines the amount of carboxylic acid groups in a substance and directly impacts the stability of the product. High acid values can lead to chemical degradation, adversely affecting the performance of cosmetic products. In esters, the saponification value indicates the number of ester bonds in the formulation and their susceptibility to hydrolysis. During saponification, ester bonds react with water under basic conditions to produce soap and alcohol [4].

The viscosity of esters influences the sensory feel during application and the fluidity of formulations. Low viscosity facilitates faster flow, while high viscosity creates a richer texture. The viscosity index represents the stability of an ester's viscosity against temperature changes. Esters with a high viscosity index exhibit more stable performance across a wide temperature range, making them advantageous for cosmetic formulations [5].

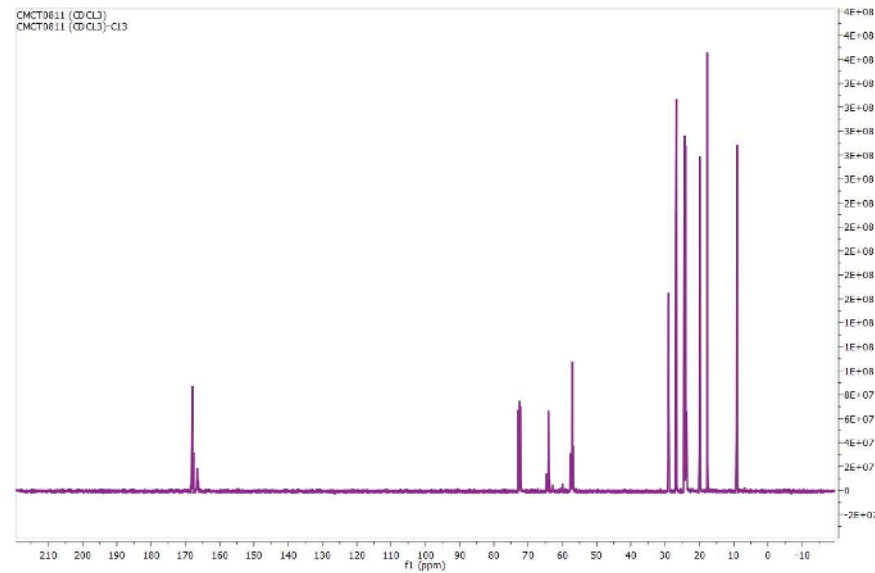
The iodine value measures the unsaturated fatty acids and the number of double bonds in the ester structure, indicating resistance to oxidation. Low iodine values suggest that esters are more stable and have a longer shelf life, which enhances the durability of cosmetic products. These properties are critical for optimizing the performance and stability of esters in the cosmetics industry [6].



Şekil 1. Gliserin Kaprilik Kaprat Süksinat sentez mekanizması.
Figure 1. Synthesis Mechanism of Glycerin Caprylic Caprate Succinate.



Şekil 2. Gliserin Kaprilik Kaprat Süksinat ester ürünün 1H-NMR spektrumu.
Figure 2. 1H-NMR Spectrum of Glycerin Caprylic Caprate Succinate Ester Product.



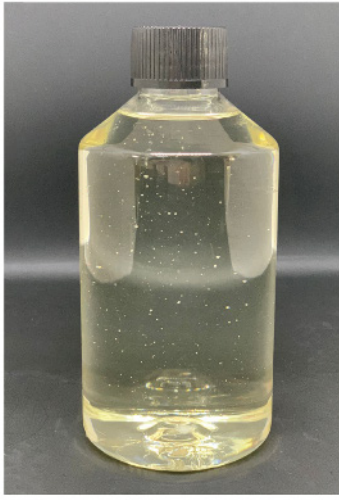
Şekil 3. Gliserin Kaprilik Kaprat Süksinat ester ürünün 13C-NMR spektrumu.
Figure 3. 13C-NMR Spectrum of Glycerin Caprylic Caprate Succinate Ester Product.

Gliserin Kaprilik Kaprat Süksinat ester ürünlerinin yapıları $1H$ ve $13C$ NMR spektrumları ile karakterize edilmiştir. $1H$ ve $13C$ NMR spektrumları incelendiğinde birbirleriyle korelasyon gösterdiği ve beklenen değerlerin gözlemlendiği belirlenmiştir. Bu sonuçlar, sentezlenen ester ürünün kimyasal yapısının öngörülen yapı ile uyumlu olduğunu göstermektedir.

Esterin yapısındaki CH_3 grubundan gelen proton, $1H$ 0.72 ppm'de görünürken, yapıdaki $-CH_2$ grubundan gelen protonlar ise 1.13 ppm'de görünmektedir.

The structures of Glycerin Caprylic Caprate Succinate ester products were characterized using $1H$ and $13C$ NMR spectra. Analysis of the spectra revealed correlations between the two, with observed values aligning with expected chemical shifts. These findings confirm that the chemical structure of the synthesized ester product is consistent with the predicted structure.

In the $1H$ NMR spectrum, the proton from the CH_3 group in the ester structure appears at 0.72 ppm, while the protons from the $-CH_2$ group are observed at 1.13 ppm.



TRIEST CMCT-0811



TRIEST MCT-6411



TRIEST LMCC-0611

Şekil 4. Kaprilik kaprik asit esterlerinin görünüşleri.
Figure 4. Visual Appearances of Caprylic/Capric Acid Esters.

Uygulama alanları

Gliserin Kaprilat Kaprat (TRIEST MCT-6411)

Cilt Bakım Ürünleri: MCT, hafif ve hızlı emilen bir yağ olduğu için cilt bakım ürünlerinde yaygın olarak kullanılır. Cilt üzerinde yağlı bir his bırakmadan hızla emilir ve cilde yumuşaklık ve esneklik sağlar.

Saç Bakım Ürünleri: MCT, saç kremi, şampuan ve saç bakım maskeleri gibi ürünlerde kullanılabilir. Saç tellerine kolayca nüfuz eder, saçları nemlendirir ve yumuşatır.

Makyaj Ürünleri: MCT, makyaj ürünlerinde taşıyıcı yağ olarak kullanılabilir. Özellikle cilt üzerinde hafif bir his bırakmak isteyen makyaj ürünlerinde tercih edilir.

Parfüm ve Kokular: Bazı parfüm ve kokuların formülasyonlarında MCT kullanılabilir. Bu yağ, parfüm notalarını taşır ve cilde uygulandığında hızla emilir.

Applications

Glycerin Caprylate Caprate (TRIEST MCT-6411)

Skin Care Products: MCT is commonly used in skin care products due to its light and fast absorption properties. It quickly absorbs into the skin without leaving an oily residue, providing softness and flexibility to the skin.

Hair Care Products: MCT can be used in hair care products such as conditioners, shampoos, and hair masks. It easily penetrates the hair fibers, moisturizing and softening the hair.

Makeup Products: MCT can be used as a carrier oil in makeup formulations, particularly in products that aim to leave a light sensation on the skin.

Perfumes and Fragrances: MCT can be used in the formulation of certain perfumes and fragrances. This oil helps carry perfume notes and quickly absorbs into the skin when applied.

Gliserin Kaprilik Kaprat Süksinat (TRIEST CMCT-0811)

Cilt Bakım Ürünleri: Kremeler ve losyonlarda düşük yayılabilirliğe sahip, yağsız yumuşatıcı yağ bileşenleri olarak kullanılmaktadır. Cilt, yüz ve bebek yağlarında oksitleyici olmayan yağ fazı, pürüzsüz, uzun süreli bir etki sağlamaktadır. Güneş kremlerinde cilt hissinde iyileşme ve yayılma kontrolü sağlamaktadır.

Makyaj Ürünleri: Pigmentlerle uyumlu, dispersiyon yağ bileşeni olarak kullanılmaktadır.

Lauril Miristil Kaprilik Kaprat (TRIEST LMCC-0611)

Cilt Bakım Ürünleri: Bu ester, cilt bakım ürünlerinde genellikle hafif bir yağlama ve nemlendirme etkisi sağlamak için kullanılır. Ciltte yumuşak ve pürüzsüz bir his bırakabilir.

Saç Bakım Ürünleri: Lauril miristil kaprilat kaprat esteri, saç bakım ürünlerinde kullanılarak saçları nemlendirir, yumuşatır ve parlaklık kazandırmaktadır.

Makyaj Ürünleri: Fondötenlerde ve bazlarda yayılabilirlik ve hafif bir his sağlamak için kullanılabilir. Ayrıca rujlar, göz farları ve allıklar gibi ürünlerde de formülasyonun stabilitesini artırmak için kullanılabilir.

3-S Ar-Ge Merkezi'nde TRIEST markası altında üretilen kaprilik kaprik asit bazlı esterler, çevre dostu üretim anlayışıyla formüle edilerek, kozmetik sektörü başta olmak üzere birçok endüstride sürdürülebilirlik ve yüksek performans hedeflerini bir araya getiren yenilikçi çözümler sunmaktadır.

REFERANSLAR

- [1] Wilson, F., Laghran, D. (2017). The link between function and structure of esters, Personal Care Europe, Aston Chemicals, UK, 56-60.
- [2] Rico, F., Mazabel, A., Egurrola, G., Pulido, J., Barrios, N., Marquez, R. (2023). Meta-Analysis and Analytical Methods in Cosmetics Formulation: A Review, Cosmetics, 11, 1.
- [3] Harsh J., Annapure, S. (2023). Triglycerides of medium-chain fatty acids: a concise review, Jour. Food Sci Technol., 60, 2143-2152.
- [4] Patel, N. K., Shah, S.N. (2015), Biodiesel from Plant Oils, Food, Energy and Water, 11, 277-307.
- [5] Nasab, S. G., Semnani, A., Marini, F., Biancolillo, A. (2018). Prediction of viscosity index and pour point in ester lubricants using quantitative structure-property relationship (QSPR). Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, 183, 59-78.
- [6] Tsupko, P. (2020). Sugar-Derived Oleogels in Cosmetics and Food Applications: a Case Study of Trehalose- and Mannitol-Based Gelators, A Master's Thesis Submitted to the Graduate Faculty in Chemistry in Partial Fulfillment of the Requirements for the Degree of Master of Science, The City University of New York.

Glycerin Caprylic Caprate Succinate (TRIEST CMCT-0811)

Skin Care Products: Used as a non-oxidizing oil phase in creams and lotions, providing smooth, long-lasting effects. It is also used in skin, face, and baby oils, offering a smooth texture and lasting effect without high spreadability. In sunscreens, it improves skin feel and provides spreadability control.

Makeup Products: Used as a dispersion oil phase that is compatible with pigments, enhancing the overall performance of makeup formulations.

Lauryl Myristyl Caprylic Caprate (TRIEST LMCC-0611)

Skin Care Products: This ester is commonly used in skin care products for its light lubrication and moisturizing effect. It provides a soft and smooth feel on the skin. **Hair Care Products:** Lauryl myristyl caprylate caprate ester is used in hair care products to moisturize, soften, and add shine to the hair.

Makeup Products: It can be used in foundations and primers to enhance spreadability and create a light feel. Additionally, it can improve the stability of formulations in products such as lipsticks, eyeshadows, and blushes.

At 3-S R&D Center, caprylic/capric acid-based esters produced under the TRIEST brand are formulated with an environmentally friendly approach, providing innovative solutions that combine sustainability and high performance across various industries, especially the cosmetics sector.