**ПРОЕКТ «КАЛЬКУЛЯТОР ЗАПАХА»**

Научный руководитель: Фатькин Александр Юрьевич

Команда (студенты 1 курса):

Стучилов Артур 106 гр.

Снеткова Дарья 110 гр.

Никушкин Илья 101 гр.

Казначеева Арина 113 гр.

Агафонова Дарья 114 гр.

**Цель исследования:** разработка принципов и методологии исследования зависимости интенсивности запаха вещества от его концентрации.

**Задачи исследования:** 1) написать программный код для автоматизации расчетов пошагового разбавления раствора до целевой концентрации; 2) разработать удобный и точный метод приготовления растворов в домашних условиях; 3) приготовить необходимое количество растворов в соответствии с установленным методом; 4) провести серию экспериментов; 5) записать результаты экспериментов в формализованном виде, выделив те параметры, которые позволят нам в дальнейшем определить: верхний и нижний пороги запаха, а также минимальный «шаг» в восприятии различия концентраций; 6) определить: верхний и нижний пороги запаха, а также минимальный «шаг» в восприятии различия концентраций; 7) сделать выводы и визуализировать результаты исследования.

**Материалы и оборудование:** дистиллированная вода, этилацетат (Марка «А», Высший сорт, ГОСТ 8981-78), уксусная кислота пищевая 70%; стеклянные пробирки с резиновыми крышками объёмом 20 мл, шприцы объёмом 1мл, 2.5 мл и 10 мл. Автоматизация расчётов производилась на персональных ноутбуках в программе «Python» версии 3.x.

**Актуальность работы:** Разработка принципов и методологии исследования зависимости интенсивности запаха вещества от его концентрации востребована в таких областях как: ароматерапия, фармакология, парфюмерия, косметология. Наша работа направлена на создание методики, следуя которой, желающий сможет рассчитать такую концентрацию конкретного вещества, при которой человек будет ощущать его с определённой интенсивностью, условно измеряемой в процентах (<20% очень плохо, 20-40% плохо, 40-60% удовлетворительно, 60-80% хорошо, 80-100% очень хорошо). В вышеперечисленных областях важным этапом создания продукта зачастую является разработка его аромата. Так, например, в косметологии и фармакологии нередко требуется замаскировать отталкивающий запах лекарственных компонентов более приятным для потребителя, так чтобы аромат в целом ощущался гармонично. Особенно важно соотношение интенсивности запахов при создании аромата в парфюмерии. Нахождение оптимальных концентраций веществ также актуально и для ароматерапии: с одной стороны, концентрация ароматического масла должна быть достаточной для проникновения в организм через дыхательные пути; с другой, запах не должен быть ни слишком интенсивным, ни неощутимым.

**Ключевые понятия:**

**«Минимальный шаг» или «минимальный порог распознавания разницы запахов»** - минимальная разница интенсивности запахов (и следовательно, минимальная разница между концентрациями пахучих веществ) распознаваемая человеком.

**«Нижний порог запаха»** - минимальная концентрация пахучего вещества, позволяющая человеку идентифицировать наличие запаха. ПОРОГ ВОСПРИЯТИЯ??? ПОРОГ РАСПОЗНАВАНИЯ???

**«Верхний порог запаха»** - такая концентрация пахучего вещества, которая обеспечивает максимальное заполнение обонятельных рецепторов пахучими частицами так, что даже при дальнейшем увеличении концентрации, восприятие интенсивности запаха не меняется (все обонятельные рецепторы уже «заняты»).

**Ход работы:**

1. Определив цель и задачи исследования, мы приступили к выбору реактивов для разработки принципов и методологии исследования зависимости интенсивности запаха вещества от его концентрации. Требования к реактивам: 1) низкая токсичность и аллергичность; 2) доступность; 3) низкая цена; 4) хорошая растворимость в воде (вода использовалась как растворитель). Исходя из вышеперечисленных критериев, нами были выбраны: этилацетат, пищевая уксусная кислота.
2. Для автоматизации дальнейших расчётов мы написали программный код, рассчитывающий пошаговое разбавление раствора вещества до целевой концентрации.
3. Далее, для упрощения приготовления растворов веществ в домашних условиях (в малых объёмах), нами был выработан упрощённый алгорим.

Для этилацетата:

Этилацетат Марка «А», Высший сорт, ГОСТ 8981-78.  
Плотность: 0,902 г/куб. см, молекулярный вес: 88,1 г/моль, растворимость этилацетата в воде составляет 10–12 % по массе при температуре 20–25 °C.

**Простой способ разбавления растворов Этилацетата (ЭТА)**

 == 1,02 \* 10 ммоль / мл

1. Берем ЭТА 1 мл \* 10 ммоль / мл = 10 ммоль

Добавляем 9 мл растворителя получаем 10 ммоль/ 10 мл **1 ммоль / мл**

2. Берем полученного раствора 1мл \*1 ммоль / мл = 1ммоль

Добавляем 9 мл растворителя получаем 1 ммоль/ 10 мл **0,1 ммоль / мл.** 3. Повторяем процедуру несколько раз и получаем набор растворов, **отличающихся на порядок по молярной концентрации.**

Для уксусной кислоты:

Уксусная кислота пищевая 70%, зарегистрирована как пищевая добавка E260.

Массовая доля уксусной кислоты 70 (+/-1) % .Превосходно растворяется в воде.

Хим. формула: CH3COOH. Молярная масса: 60,05 г/ моль. Плотность 70% уксусной к-ты - 1,0695 г/см³.

**Простой способ разбавления 70% уксусной кислоты водой**

**== 1, 25\* 12,5 ммоль / мл**

1. Берем 70% уксуса 8 мл \* 12,5 ммоль / мл = 100 ммоль

Добавляем 2 мл растворителя получаем 100 ммоль/ 10 мл 10 ммоль / мл

2. Берем полученного раствора 1мл \*10 ммоль / мл = 10ммоль

Добавляем 9 мл растворителя получаем 10 ммоль/ 10 мл 1 ммоль / мл (1000 мкмоль / мл)

3. Повторяем процедуру несколько раз и получаем набор растворов, отличающийся на порядок по молярной концентрации (100, 10, 1, 0,1 мкмоль / мл)

1. Приготовили растворы с концентрациями [С, мкмоль/мл] для ЭТА: 10000, 1000, 100, 56, 32, 18, 10, 5.6, 3.2, 1.8, 1, 0.56, 0.32, 0.18, 0.1, 0 – дистиллированная вода; для уксусной кислоты: 12500, 10000, 5600, 3200, 1800, 1000, 560, 320, 180, 100, 56, 32, 18, 10, 5.6, 3.2, 1. 8, 1, 0.56, 0 – дистиллированная вода, и пронумеровали их.
2. Установили дополнительные параметры формализации данных: lgC (десятичный логарифм от значения концентрации образца), △С% - процентная разница между концентрациями сравниваемых образцов, △lgC – разница в долях от единицы (2 знака после запятой) между логарифмами концентраций сравниваемых образцов. Также добавили: указание состава образца (пример: в 10 мл р-ра № 7 содержится 4,48 мл №0); ячейку, для записи результатов трехкратной слепой пробы-сравнения с другим образцом (в виде: «True», «False», «Разница неразличима»); ячейку, для указания временных интервалов между измерениями (в секундах).
3. Эмпирическим путем определили время восстановления чувствительности обонятельных рецепторов для определения разности концентраций данных образцов (через различные промежутки времени вслепую определяли, в каком из образцов запах ощущается интенсивнее, пока не находили оптимальное время отдыха, обеспечивающее максимальную точность различения концентраций).
4. Произвели серию «слепых» экспериментов. Брали 2 пронумерованных образца, не смотря на них, несколько раз переставляли (чтобы обмануть себя), затем так же вслепую открывали крышки склянок, последовательно вдыхали запах каждого образца (в основном от 2 до 4 раз) и пытались определить, где концентрация является большей. Для определения **минимального порога чувствительности** сравнивали образцы **с наименьшими ощутимыми концентрациями**, для определения **максимального** – **с наибольшими**. Для определения **минимального шага** – **уменьшали разницу между «соседними» сравниваемыми концентрациями** на всем диапазоне измерения. Результаты внесли в таблицу.
5. Проанализировав полученные данные, предположили, что функция Харрингтона может стать удобной моделью для их визуализации. Однако это решение оказалось ошибочным, так как эта математическая модель применима лишь в том случае, если во всех измерениях и у всех испытуемых определён верхний порог чувствительности. Нам, по ряду причин, не удалось повсеместно определить верхний порог чувствительности (Некоторые испытуемые отказались вдыхать наиболее концентрированные образцы из-за индивидуальных аллергических реакций; доступные в продаже вещества недостаточно концентрированы, чтобы находиться в верхнем пороге чувствительности человека). К примеру, в случае с поиском порога чувствительности запаха уксусной кислоты, разница концентраций 2 «верхних» образцов оказалась ниже минимального порога чувствительности (12500 мкмоль/мл и 10000 мкмоль/мл, разница = 2500 мкмоль/мл или △lg(C) = 0.1. Но «минимальный шаг различения» составляет △lg(C) = 0.25). Теоретически, мы могли бы взять уксусную кислоту более высокой концентрации, чтобы добиться разницы △lg(C) = 0.25, однако такой концентрированной уксусной кислоты нет в открытой продаже и работать с ней в домашних условиях небезопасно.