



19



OFICINA ESPAÑOLA DE
PATENTES Y MARCAS

ESPAÑA

11 Número de publicación: **2 360 645**

51 Int. Cl.:
C07C 255/31 (2006.01)

12

TRADUCCIÓN DE PATENTE EUROPEA

T3

96 Número de solicitud europea: **05815905 .4**

96 Fecha de presentación : **20.12.2005**

97 Número de publicación de la solicitud: **1828108**

97 Fecha de publicación de la solicitud: **05.09.2007**

54

Título: **5-(2,2-dimetil-ciclopropil)-3-metil-pent-2-enitrilo como fragancia y aroma.**

30

Prioridad: **24.12.2004 GB 0428306**

45

Fecha de publicación de la mención BOPI:
07.06.2011

45

Fecha de la publicación del folleto de la patente:
07.06.2011

73

Titular/es: **GIVAUDAN S.A.**
chemin de la Parfumerie 5
1214 Vernier-Genève, CH

72

Inventor/es: **Schröder, Fridtjof**

74

Agente: **Durán Moya, Carlos**

ES 2 360 645 T3

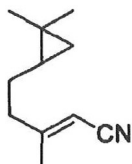
Aviso: En el plazo de nueve meses a contar desde la fecha de publicación en el Boletín europeo de patentes, de la mención de concesión de la patente europea, cualquier persona podrá oponerse ante la Oficina Europea de Patentes a la patente concedida. La oposición deberá formularse por escrito y estar motivada; sólo se considerará como formulada una vez que se haya realizado el pago de la tasa de oposición (art. 99.1 del Convenio sobre concesión de Patentes Europeas).

DESCRIPCIÓN

5-(2,2-dimetil-ciclopropil)-3-metil-pent-2-enenitrilo como fragancia y aroma

5 La presente invención se refiere a un nuevo compuesto.

La presente invención da a conocer el compuesto 5-(2,2-dimetil-ciclopropil)-3-metil-pent-2-enenitrilo.



10 Son conocidos en la técnica compuestos de este tipo general, por ejemplo, de las Solicitudes de Patente Internacionales WO 03/053901 y WO 03/053902. Sin embargo, no se ha identificado en la técnica este compuesto específico, ni se ha descrito su perfil olfativo.

15 El compuesto se puede preparar mediante cualquier método conveniente, siendo un método especialmente preferente la ciclopropanación de un alqueno sustituido adecuado, que comprende la reacción del alqueno con un carbenoide, generado a partir de dibromometano y un compuesto de tri-(C₂-C₈)-alquilaluminio.

20 El compuesto es útil como ingrediente en aplicaciones de fragancias o de aroma. Por lo tanto, la presente invención también da a conocer la utilización en una aplicación de fragancia o de aroma de 5-(2,2-dimetil-ciclopropil)-3-metil-pent-2-enenitrilo. La aplicación de fragancia puede ser en cualquier sector de fragancia fina o funcional, por ejemplo, perfumes, artículos de tocador, cosméticos, jabones, lavado de ropa y productos para el hogar y abrillantadores. La aplicación de aroma puede ser en cualquier tipo de producto alimenticio o condimento.

25 En dichas aplicaciones, se puede combinar con otros materiales de fragancia o de aroma conocidos para proporcionar propiedades de fragancia o de aroma deseables.

La presente invención se describe más en referencia al siguiente ejemplo.

EJEMPLO

30 Ciclopropanación de *EZ*-Geranitrilo: *EZ*-5-(2,2-dimetil-ciclopropil)-3-metil-pent-2-enenitrilo.



35 Se añade FeCl₃ anhidro (5 g, 30 mmol) con agitación y nitrógeno a *EZ*-Geranitrilo (dr = 1:1) (77 g, 0,52 mol) en dibromometano (720 ml, 10,3 mol) a 10°C - 20°C, seguido de la adición lenta de triisobutilaluminio puro (358 g, 1,8 mol) a esta temperatura. La mezcla se agita durante 17 horas a 25°C, a continuación se enfría hasta -10°C - 0°C y se bombea a través de una aguja doble en NaOH al 25% a -10°C - 0°C. La mezcla bifásica se calienta lentamente hasta temperatura ambiente con agitación. Se separa la fase orgánica, se seca sobre MgSO₄, se filtra y el disolvente se evapora bajo presión reducida.

40 El residuo oleoso obtenido de esta manera se somete al mismo ciclo de ciclopropanación mencionado anteriormente utilizando FeCl₃ anhidro (5 g, 30 mmol), dibromometano (720 ml, 10,3 mol) y triisobutilaluminio puro (358 g, 1,8 mol). Después de 17 horas a 25°C la mezcla se enfría hasta -10°C - 0°C y se bombea a través de una aguja doble en NaOH al 25% a -10°C - 0°C. La mezcla bifásica se calienta lentamente hasta temperatura ambiente con agitación. Se separa la fase orgánica, se lava con ácido oxálico al 4%, a continuación con NaHCO₃ concentrado hasta pH ~ 8, se seca sobre MgSO₄ y se filtra. Después de evaporar los disolventes bajo presión reducida, el residuo oleoso se purifica mediante destilación (pe 95°C/0,08 mbar (0,06 Torr) obteniéndose 50 g (59%) del producto de ciclopropanación (71% de pureza por CG, 8% de aldehído, 11% de alcohol, dr = 1:1) como aceite incoloro. ¹H-RMN (CDCl₃, 400 MHz): 5,1 (1 H), 2,5 (m, 1 H), 2,25 (m, 1 H), 2,05 (s, 1,5 H), 1,9 (s, 1,5 H), 1,6 - 1,3 (2 H), 1,05 (6 H) 0,45 (2 H), -0,1 (1 H) ppm. ¹³C-RMN (CDCl₃, 400 MHz): 165,43 y 165,4 (2 s), 117,2 y 117,0 (2 s), 95,6 y 95,0 (2 d), 39,1 y 36,7 (2 t), 27,6 y 27,5 (2 t), 27,39 y 27,37 (2 q), 28,9 y 23,8 (2 d), 22,9 y 21,0 (2 q), 19,9 y 19,8 (2 q), 15,6 y 15,5 (2 s) ppm. CG/MS: 162 (20%), 148 (1%, [M-15]⁺), 94 (20%), 81 (55%), 55 (100%). IR (película): 2952 (s), 2867 (m), 2218 (w), 1676 (w), 1632 (w), 1454 (m), 1377 (m), 1365 (m), 1120 (w), 1020 (m), 866 (w), 801 (w). Olor: hesperídico, potente, fresco, geranitrilo.

REIVINDICACIONES

1. 5-(2,2-dimetil-ciclopropil)-3-metil-pent-2-enenitrilo.
- 5 2. Utilización de 5-(2,2-dimetil-ciclopropil)-3-metil-pent-2-enenitrilo en una aplicación de fragancia.
3. Aplicación de fragancia que comprende 5-(2,2-dimetil-ciclopropil)-3-metil-pent-2-enenitrilo.
4. Utilización de 5-(2,2-dimetil-ciclopropil)-3-metil-pent-2-enenitrilo en una aplicación de aroma.
- 10 5. Aplicación de aroma que comprende 5-(2,2-dimetil-ciclopropil)-3-metil-pent-2-enenitrilo.