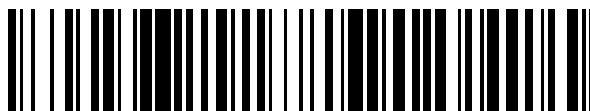


19



OFICINA ESPAÑOLA DE
PATENTES Y MARCAS

ESPAÑA



11 Número de publicación: **2 439 041**

51 Int. Cl.:

C07C 43/166 (2006.01)

C11B 9/00 (2006.01)

C11D 3/50 (2006.01)

12

TRADUCCIÓN DE PATENTE EUROPEA

T3

96 Fecha de presentación y número de la solicitud europea: **16.11.2010 E 10191450 (5)**

97 Fecha y número de publicación de la concesión europea: **16.10.2013 EP 2338868**

54 Título: **[(4E, 4Z)-5-metoxi-3-metil-4-pentenil]-benceno y su uso en composiciones de perfume**

30 Prioridad:

15.12.2009 US 637827

45 Fecha de publicación y mención en BOPI de la traducción de la patente:

21.01.2014

73 Titular/es:

**INTERNATIONAL FLAVORS & FRAGRANCES
INC. (100.0%)
521 West 57th Street
New York, NY 10019, US**

72 Inventor/es:

**NARULA, ANUBHAV y
ARRUDA, EDWARD MARK**

74 Agente/Representante:

ARIAS SANZ, Juan

ES 2 439 041 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

[(4E, 4Z)-5-metoxi-3-metil-4-pentenil]-benceno y su uso en composiciones de perfume

Campo de la invención

La presente invención se refiere a una nueva entidad química y a su incorporación y uso como material de fragancia.

5 Antecedentes de la invención

En la industria de las fragancias existe una necesidad constante de proporcionar nuevos productos químicos para dar a los perfumistas y otras personas la posibilidad de crear nuevas fragancias para perfumes, colonias y productos de cuidado personal. Los expertos en la técnica apreciarán cómo las pequeñas diferencias en las estructuras químicas pueden dar lugar a diferencias significativas en el olor, las notas y las características de las moléculas. Estas variaciones permiten a los perfumistas y otras personas aplicar compuestos nuevos en la creación de fragancias nuevas. Por ejemplo, los compuestos de benceno que difieren ligeramente en los sustituyentes poseen perfiles de olor completamente diferentes [Ishikawa, *et al.*, International Journal of Quantum Chemistry 79: 101-108 (2000)]. En el caso de los terc-butil ciclohexanos, se dice que el olor depende de la conformación de los compuestos y, por lo tanto, los análogos que adoptan la misma conformación poseen un olor similar. En consecuencia, se demuestra que muchos compuestos trans comparten un olor de tipo sudor-orina pronunciado, mientras que los correspondientes compuestos cis son inodoros o, como mucho, poseen un olor débil e indefinido a flores o madera. Sin embargo, se demuestra que otros terc-butil ciclohexanos trans y cis poseen actividades sensoriales opuestas [Ohloff, *et al.*, Helvetica Chimica Acta 66, Fasc. 5: 1343-1354(1983)].

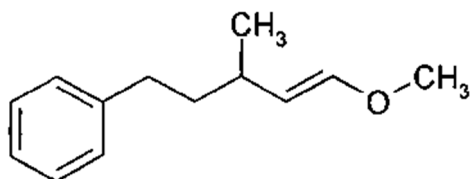
El documento US 5.726.355 divulga un procedimiento para perfumar telas lavadas con detergentes que contienen lipasas. El documento WO2005/037243 A1 divulga ésteres de enol de cadena corta como precursores de sustancias odoríferas.

Por tanto, para los expertos en la técnica es difícil predecir que una estructura dada sería eficaz en actividades sensoriales. La identificación de productos químicos de fragancia deseables sigue planteando retos difíciles.

Sumario de la invención

La presente invención proporciona un compuesto novedoso y su uso ventajoso e inesperado en la potenciación, la mejora o la modificación de la fragancia de perfumes, colonias, aguas de tocador, productos para el cuidado de los tejidos, productos personales y similares.

Más específicamente, la presente invención se refiere a un compuesto novedoso, [(4E, 4Z)-5-metoxi-3-metil-4-pentenil]-benceno, que presenta un inesperado efecto de fragancia único y fuerte y a un procedimiento de mejora, potenciación o modificación de una formulación de fragancia a través de la adición de una cantidad olfativamente aceptable de [(4E, 4Z)-5-metoxi-3-metil-4-pentenil]-benceno representado por la fórmula I expuesta a continuación:

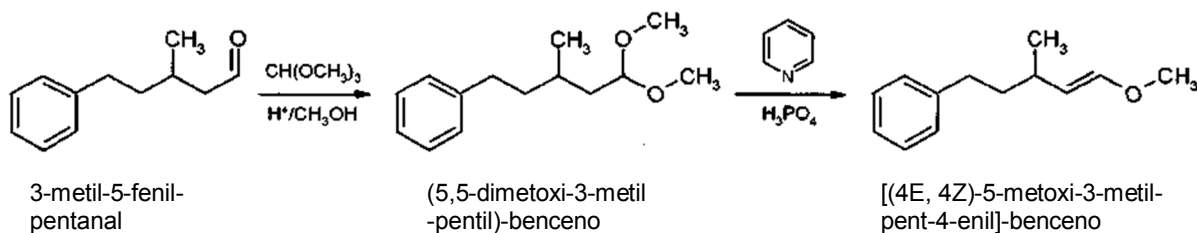


Fórmula I

Estos y otros modos de realización de la presente invención resultarán evidentes al leer la siguiente memoria descriptiva.

Descripción detallada de la invención

El compuesto de la presente invención se puede preparar a partir de 3-metil-5-fenil-pentanal (disponible comercialmente de Quest International). Las etapas de reacción se pueden representar mediante un esquema mostrado como sigue:



Los expertos en la técnica reconocerán que los compuestos de la presente invención pueden tener una serie de centros quirales, de modo que proporcionan numerosos isómeros de los compuestos reivindicados. En el presente documento se pretende que los compuestos descritos en el presente documento incluyan mezclas isómeras de estos compuestos, así como los isómeros que se pueden separar usando técnicas conocidas por los expertos en la técnica. Las técnicas adecuadas incluyen la cromatografía, tal como la cromatografía de líquidos de alta resolución, llamada HPLC, y en particular la cromatografía en gel y la microextracción en fase sólida, llamada SPME.

Sorprendentemente, se descubre que el compuesto de la presente invención posee un efecto de fragancia fuerte e inesperado tal como, por ejemplo, notas únicas de limoncillo, tipo pomelo y tipo ruibarbo.

El uso del compuesto de la presente invención es ampliamente aplicable en productos de perfumería actuales, que incluyen la preparación de perfumes y colonias, el perfumado de productos de cuidado personal tales como jabones, geles de ducha y productos de cuidado del cabello, así como ambientadores y preparaciones cosméticas. Estos compuestos también se pueden usar para perfumar agentes de limpieza, tales como, pero sin limitación, detergentes, materiales de lavavajillas, composiciones para fregar, limpiadores de ventanas y similares. En estas preparaciones, los compuestos de la presente invención se pueden usar solos o en combinación con otras composiciones perfumantes, disolventes, adyuvantes y similares. La naturaleza y variedad de los otros ingredientes que también se pueden emplear son bien conocidas por los expertos en la técnica.

En la presente invención se pueden emplear muchos tipos de fragancias, siendo la única limitación la compatibilidad con los otros componentes que se empleen. Las fragancias adecuadas incluyen, pero sin limitación, frutos tales como almendra, manzana, cereza, uva, pera, piña, naranja, fresa, frambuesa; almizcle, esencias florales tales como de tipo lavanda, de tipo rosa, de tipo lirio, de tipo clavel. Otras esencias agradables incluyen esencias de hierbas aromáticas y bosques obtenidas de pino, picea y otros olores forestales. También se pueden obtener fragancias de diversos aceites, tales como aceites esenciales, o de materiales vegetales tales como menta piperita, hierbabuena y similares. En la patente de EE. UU. N.º 4.534.891 se proporciona una lista de fragancias adecuadas. Otra fuente de fragancias adecuadas se encuentra en *Perfumes, Cosmetics and Soaps*, segunda edición, editado por W. A. Poucher, 1959. Entre las fragancias proporcionadas en este tratado se encuentran la goma arábiga, casia, sándalo, ciclamen, helecho, gardenia, espinillo, heliotropo, madre selva, jacinto, jazmín, lila, lirio, magnolia, mimosa, narciso, heno recién cortado, azahar, orquídea, gualdón, guisante de olor, trébol, nardo índico, vainilla, violeta, alhelí y similares.

Se entiende que los términos "formulación de fragancia", "composición de fragancia" y "composición de perfume" significan lo mismo y se refieren a una formulación que está destinada a proporcionar un carácter de fragancia a un perfume, una colonia, un agua de tocador, un producto de cuidado personal, un producto para el cuidado de los tejidos, y similares. La formulación de fragancia de la presente invención es una composición que comprende un compuesto de la presente invención.

Se entiende que cantidad olfativamente aceptable significa la cantidad de un compuesto en una formulación de fragancia, en la que el compuesto aportará sus características olfativas individuales. Sin embargo, el efecto olfativo de la formulación de fragancia será la suma del efecto de cada uno de los ingredientes de la fragancia. Por tanto, los compuestos de la presente invención se pueden usar para mejorar o potenciar las características de aroma de la formulación de fragancia, modificando la reacción olfativa a la que contribuyen otros ingredientes de la formulación. La cantidad olfativamente aceptable puede variar en función de muchos factores, incluidos otros ingredientes, sus cantidades relativas y el efecto olfativo que se desea.

La cantidad de los compuestos de la presente invención empleados en una formulación de fragancia varía de desde aproximadamente el 0,005 hasta aproximadamente el 70 por ciento en peso, preferentemente desde el 0,005 hasta aproximadamente el 10 por ciento en peso, más preferentemente desde aproximadamente el 0,5 hasta aproximadamente el 8 por ciento en peso y aún más preferentemente, desde aproximadamente el 1 hasta aproximadamente el 7 por ciento en peso. Los expertos en la técnica podrán emplear la cantidad deseada para proporcionar el efecto y la intensidad de fragancia deseados. Además de los compuestos de la presente invención, también se pueden usar otros materiales junto con la formulación de fragancia. También se pueden emplear materiales bien conocidos tales como tensioactivos, emulsionantes, polímeros para encapsular la fragancia, sin alejarse del alcance de la presente invención.

Cuando se usan en una formulación de fragancia, los compuestos de la presente invención proporcionan

limoncillo, de tipo pomelo o de tipo ruibarbo.

Ejemplo III

La fórmula de fragancia ejemplificada como sigue demuestra que el [(4E, 4Z)-5-metoxi-3-metil-4-pentenil]-benceno imparte caracteres verdes, florales, de rosa, limoncillo, de tipo pomelo y de tipo ruibarbo a una fórmula de fragancia.

Ingredientes	Partes*	
	+	-
Alcohol feniletílico blanco extra	620	620
Citronelol Coeur	200	200
Geraniol Coeur	70	70
Linalool syn	25	25
Fenilacetato de etilo	20	20
Aceite de pachuli ligero BLO	20	20
Ionona alfa	10	10
Ald C-11 ULENIC GIV 10 % DPG	8	8
Eugenol Trubeck	5	5
Óxido de rosa 10 % DPG	5	5
Fenilacetaldehído 10 % DEP	2	2
[(4E, 4Z)-5-metoxi-3-metil]-4-pentenil]-	5	---
DPG	---	5
Total	990	990

5 * "+" representa una fórmula que contiene [(4E, 4Z)-5-metoxi-3-metil-4-pentenil]-benceno; y

"-" representa una fórmula que no contiene [(4E, 4Z)-5-metoxi-3-metil-4-pentenil]-benceno.

REIVINDICACIONES

1. Un compuesto, [(4E, 4Z)-5-metoxi-3-metil-4-pentenil]-benceno.
2. Un procedimiento para mejorar, potenciar o modificar una formulación de fragancia a través de la adición de una cantidad olfativamente aceptable de [(4E, 4Z)-5-metoxi-3-metil-4-pentenil]-benceno.
- 5 3. Una formulación de fragancia que contiene una cantidad olfativamente aceptable de [(4E, 4Z)-5-metoxi-3-metil-4-pentenil]-benceno.
4. Un producto de fragancia que contiene una cantidad olfativamente aceptable del compuesto de la reivindicación 1.
5. El procedimiento de la reivindicación 2, en el que la formulación de fragancia se incorpora en un producto seleccionado del grupo que consiste en un perfume, una colonia, un agua de tocador, un producto cosmético, un producto de cuidado personal, un producto para el cuidado de los tejidos, un producto de limpieza y un ambientador, o
- 10 el producto de fragancia de la reivindicación 4, en el que el producto se selecciona del grupo que consiste en un perfume, una colonia, un agua de tocador, un producto cosmético, un producto de cuidado personal, un producto para el cuidado de los tejidos, un producto de limpieza y un ambientador.
6. El procedimiento de la reivindicación 5, o el producto de fragancia de la reivindicación 5, en los que el producto de limpieza se selecciona del grupo que consiste en un detergente, una composición de lavavajillas, un compuesto para fregar y un limpiador de ventanas.
- 15 7. El procedimiento o producto de fragancia de la reivindicación 5 o la reivindicación 6, o la formulación de fragancia de la reivindicación 3, en los que la cantidad olfativamente aceptable es de aproximadamente el 0,005 a aproximadamente el 10 por ciento en peso de la formulación de fragancia.
- 20 8. El procedimiento o producto de fragancia de la reivindicación 5 o la reivindicación 6, o la formulación de fragancia de la reivindicación 3, en los que la cantidad olfativamente aceptable es de aproximadamente el 0,5 a aproximadamente el 8 por ciento en peso de la formulación de fragancia.
9. El procedimiento o producto de fragancia de la reivindicación 5 o la reivindicación 6, o la formulación de fragancia de la reivindicación 3, en los que la cantidad olfativamente aceptable es de aproximadamente el 1 a aproximadamente
- 25 el 7 por ciento en peso de la formulación de fragancia.