

19



OFICINA ESPAÑOLA DE  
PATENTES Y MARCAS

ESPAÑA



11 Número de publicación: **2 621 903**

51 Int. Cl.:

**A61Q 13/00** (2006.01)

**A61K 8/49** (2006.01)

12

TRADUCCIÓN DE PATENTE EUROPEA

T3

86 Fecha de presentación y número de la solicitud internacional: **18.01.2013 PCT/US2013/022073**

87 Fecha y número de publicación internacional: **25.07.2013 WO13109837**

96 Fecha de presentación y número de la solicitud europea: **18.01.2013 E 13738616 (5)**

97 Fecha y número de publicación de la concesión europea: **15.03.2017 EP 2804579**

54 Título: **Nuevos compuestos organolépticos**

30 Prioridad:

18.01.2012 US 201261587720 P  
18.01.2012 US 201261587722 P  
18.01.2012 US 201261587716 P  
18.01.2012 US 201261587726 P  
18.01.2012 US 201261587740 P  
18.01.2012 US 201261587742 P  
18.01.2012 US 201261587728 P  
18.01.2012 US 201261587754 P  
18.01.2012 US 201261587759 P  
18.01.2012 US 201261587753 P  
18.01.2012 US 201261587747 P  
18.01.2012 US 201261587755 P  
18.01.2012 US 201261587757 P  
18.01.2012 US 201261587749 P

45 Fecha de publicación y mención en BOPI de la traducción de la patente:  
**05.07.2017**

73 Titular/es:

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

72 Inventor/es:

**AMORELLI, BENJAMIN;  
ARRUDA, EDWARD, MARK;  
BELKO, ROBERT, P.;  
CAI, TINGWEI;  
CLOSSON, ADAM, P.;  
GENG, FENG;  
LASOME, JAMES, ANTHONY;  
LEVORSE, ANTHONY, T;  
MERTZ, GARY, J.;  
MONTELEONE, MICHAEL, G.;  
NARULA, ANUBHAV, P.S.;  
O'KEEFE, NICOLE;  
SASAKI, TAKASHI;  
WEISS, RICHARD, A. y  
YUN, HEEDONG**

74 Agente/Representante:

**ARIAS SANZ, Juan**

ES 2 621 903 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

Nuevos compuestos organolépticos

5 **Campo de la invención**

La presente invención se refiere a nuevas entidades químicas y a la incorporación y uso de las nuevas entidades químicas como materiales de fragancia.

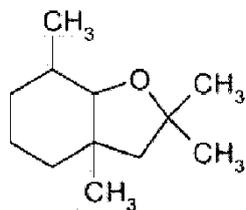
10 **Antecedentes de la invención**

Existe una necesidad continua en la industria de las fragancias de proporcionar nuevos productos químicos para dar a los perfumistas y otras personas la capacidad de crear nuevas fragancias para perfumes, colonias y productos para el cuidado personal. Ohloff *et al.* (1985) se refiere a la relación entre la estructura química y la liberación de aroma a ámbar gris. Los expertos en la materia aprecian cómo pequeñas diferencias en las estructuras químicas pueden dar lugar a diferencias inesperadas y significativas en el olor, las notas y las características de las moléculas. Estas variaciones permiten a los perfumistas y a otras personas aplicar nuevos compuestos en la creación de nuevas fragancias.

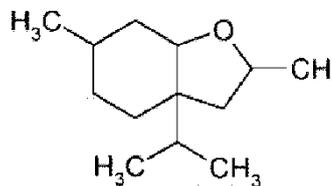
20 **Sumario de la invención**

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

Más específicamente, la presente invención se refiere a nuevos octahidro-benzofuranos que exhiben un efecto de fragancia fuerte e inesperado, particularmente notas herbáceas, dulces, alcanforadas, amaderadas, frescas, verdes, especiadas, florales, a eucalipto y ligeras notas de pino, y un método para mejorar, reforzar o modificar una formulación de fragancia mediante la adición de una cantidad olfativa aceptable de octahidro-benzofuranos representados por las Fórmulas II y III expuestas a continuación:



Fórmula II



Fórmula III

35 **Descripción detallada de la invención**

Los expertos en la materia reconocerán que: la Fórmula II representa 2,2,3a,7-tetrametil-octahidro-benzofurano; y la Fórmula III representa 3a-isopropil-2,6-dimetil-octahidro-benzofurano.

Los expertos en la materia reconocerán que los compuestos de la presente invención pueden tener varios centros quirales, proporcionando así numerosos isómeros de los compuestos reivindicados. Se entiende en la presente memoria que los compuestos descritos en la presente incluyen mezclas isoméricas de tales compuestos, así como aquellos isómeros que pueden separarse usando técnicas conocidas por los expertos en la materia. Las técnicas adecuadas incluyen cromatografía tal como cromatografía líquida de alto rendimiento, denominada HPLC, y particularmente cromatografía en gel de sílice y microextracción en fase sólida, denominada SPME.

Se ha descubierto sorprendentemente que el 2,2,3a,7-tetrametil-octahidro-benzofurano posee un efecto de fragancia inesperado tal como, por ejemplo, notas herbáceas, dulces, alcanforadas, amaderadas, frescas y verdes.

Se ha descubierto sorprendentemente que el 3a-isopropil-2,6-dimetil-octahidro-benzofurano posee un efecto de fragancia fuerte e inesperado tal como, por ejemplo, notas de madera de cedro, verdes, especiadas, florales, a eucalipto y ligeras notas de pino.

El uso de los compuestos de la presente invención es ampliamente aplicable en productos de perfumería actuales, incluyendo la preparación de perfumes y colonias, el perfumado de productos para el cuidado personal tales como jabones, geles de ducha y productos para el cuidado del cabello, productos para el cuidado de tejidos así como ambientadores y preparaciones cosméticas. Estos compuestos también se pueden usar para perfumar agentes de

limpieza, tales como, pero sin limitarse a, detergentes, materiales para lavavajillas, composiciones para fregar, limpiacristales y similares. En estas preparaciones, los compuestos de la presente invención se pueden usar solos o en combinación con otros disolventes, adyuvantes, composiciones perfumantes y similares. La naturaleza y la variedad de los otros ingredientes que también pueden emplearse son conocidas por los expertos en la materia.

5 En la presente invención pueden emplearse muchos tipos de fragancias, siendo la única limitación la compatibilidad con los otros componentes empleados. Las fragancias adecuadas incluyen, pero no se limitan a, frutas tales como almendra, manzana, cereza, uva, pera, piña, naranja, fresa, frambuesa; almizcle, aromas de flores de tipo lavanda, de tipo rosa, de tipo iris, de tipo clavel. Otros aromas agradables incluyen olores a base de hierbas y bosques  
10 derivados de pino, abeto y otros olores de bosque. Las fragancias también pueden derivarse de diversos aceites, tales como aceites esenciales, o de materiales vegetales tales como menta, hierbabuena y similares. Una lista de fragancias adecuadas se proporciona en la patente US-4.534.891, cuyo contenido se incorpora por referencia como si estuviera expuesto en su totalidad. Otra fuente de fragancias adecuadas se encuentra en Perfumes, Cosméticos y Jabones, segunda edición, editado por W. A. Poucher, 1959. Entre las fragancias proporcionadas en este tratado  
15 están la acacia, aroma, chipre, ciclamen, helecho, gardenia, espino, heliotropo, madreSelva, jacinto, jazmín, lila, lirio, magnolia, mimosa, narciso, heno recién cortado, naranjo de México, orquídea, reseda, guisante de olor, trébol, nardo, vainilla, violeta, alhelí y similares.

20 El término "mejorar" en la frase "mejorar, potenciar o modificar una formulación de fragancia" significa elevar la formulación de fragancia a un carácter más deseable. El término "potenciar" significa hacer la formulación de fragancia más eficaz o proporcionar a la formulación de fragancia un carácter mejorado. El término "modificar" significa proporcionar a la formulación de fragancia un cambio de carácter.

25 Las expresiones "formulación de fragancia", "composición de fragancia" y "composición de perfume" significan lo mismo y se refieren a una mezcla de compuestos que incluyen, por ejemplo, alcoholes, aldehídos, cetonas, ésteres, éteres, lactonas, nitrilos, aceites naturales, aceites sintéticos y mercaptanos, los cuales se mezclan de manera que los olores combinados de los componentes individuales producen una fragancia agradable o deseada. La formulación de fragancia de la presente invención es una formulación de fragancia que comprende un compuesto de la presente invención.

30 La expresión "producto de fragancia" significa un producto de consumo que añade una fragancia o enmascara un mal olor. Los productos de fragancia pueden incluir, por ejemplo, perfumes, colonias, productos para el cuidado personal tales como jabones, geles de ducha y productos para el cuidado del cabello, productos para tejidos, ambientadores, preparaciones cosméticas y agentes de limpieza perfumados tales como detergentes, materiales para lavavajillas, composiciones para fregar y limpiacristales. El producto de fragancia de la presente invención es un producto de consumo que contiene un compuesto de la presente invención.

40 Se entiende por cantidad aceptable olfativa la cantidad de un compuesto en una formulación de fragancia en la que el compuesto contribuirá con 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 fragancia. De este modo, los compuestos de la presente invención se pueden usar para mejorar o potenciar las características del aroma de la formulación de fragancia, o mediante la modificación de la reacción olfativa aportada por otros ingredientes en la formulación. La cantidad olfativa aceptable puede variar dependiendo de muchos factores que incluyen otros ingredientes, sus cantidades relativas y el efecto olfativo deseado.

45 La cantidad de los compuestos de la presente invención empleados en una formulación de fragancia varía de aproximadamente el 0,005 a aproximadamente el 50 por ciento en peso, preferiblemente del 0,5 a aproximadamente el 25 por ciento en peso, y más preferiblemente de aproximadamente el 1 a aproximadamente el 10 por ciento en peso. Los expertos en la materia podrán emplear la cantidad deseada para proporcionar el efecto e intensidad de fragancia deseados. Además de los compuestos de la presente invención, también pueden utilizarse otros materiales junto con la formulación de fragancia. También se pueden emplear materiales conocidos tales como tensioactivos, emulsionantes, polímeros para encapsular la fragancia sin apartarse del alcance de la presente invención.

50 Cuando se usan en una formulación de fragancia, los compuestos de la presente invención proporcionan fuertes características inesperadas herbales, dulces, alcanforadas, amaderadas, frescas, verdes, especiadas, florales, de eucalipto y ligeras notas de pino y hacen que la formulación de fragancia sea más deseable y notable. Las cualidades olorosas encontradas en los compuestos de la presente invención ayudan a embellecer y potenciar la armonía final y a mejorar el rendimiento de otros materiales en la formulación de fragancia.

60 Como se usa en la presente memoria, todos los porcentajes son porcentajes en peso, a menos que se indique lo contrario, se entiende que ppm significa partes por millón, se entiende que l es litro, se entiende que ml es mililitro, se entiende que mol es mol, se entiende que kg es kilogramo, se entiende que g es gramo y se entiende que mol es mol. Por IFF, como se usa en los ejemplos, se entiende International Flavors & Fragrances Inc., Nueva York, NY, EE.UU.



## ES 2 621 903 T3

5 Se cargó Red-A1® (397 g) en un matraz de reacción de 2 l y se calentó a 55 °C. Al matraz se añadieron isómeros de alil mentona alilo (248 g, obtenidos anteriormente) y se produjo una reacción exotérmica hasta 70 °C. La mezcla de reacción se dejó reposar durante 8 horas y se inactivó con isopropanol (100 ml) seguido de solución acuosa de hidróxido de sodio (50 %, 307 g). La capa orgánica resultante se lavó con salmuera (500 ml). El alcohol en bruto se destiló para proporcionar una mezcla de isómeros de alil mentol.

10 Se cargaron los isómeros de alil mentol (200 g, obtenidos anteriormente), tolueno (500 ml) y ácido metanosulfónico (MSA, 5 g) en un matraz de reacción de 1 l. La mezcla de reacción se calentó a 80 °C, se dejó reposar durante 8 horas, después se enfrió a 22 °C y se lavó con solución acuosa de carbonato sódico (10 %, 300 ml). La mezcla en bruto resultante se purificó por destilación para dar 3a-isopropil-2,6-dimetil-octahidro- benzofurano.

El 3a-isopropil-2,6-dimetil-octahidro-benzofurano se caracterizó por su posesión de notas de madera de cedro, verdes, especiadas, florales, de eucalipto y ligeras notas de pino.

**REIVINDICACIONES**

- 5 1. Un compuesto seleccionado del grupo que consiste en 2,2,3a,7-tetrametil-octahidro-benzofurano y 3a-isopropil-2,6-dimetil-octahidro-benzofurano.
2. Una formulación de fragancia que contiene una cantidad olfativa aceptable de un compuesto seleccionado del grupo que consiste en 2,2,3a,7-tetrametil-octahidro-benzofurano y 3a-isopropil-2,6-dimetil-octahidro-benzofurano.
- 10 3. La formulación de fragancia de la reivindicación 2, en la que la cantidad olfativa aceptable es de aproximadamente el 0,005 a aproximadamente el 50 por ciento en peso de la formulación de fragancia.
4. La formulación de fragancia de la reivindicación 2, en la que la cantidad aceptable olfativa es de aproximadamente el 0,5 a aproximadamente el 25 por ciento en peso de la formulación de fragancia.
- 15 5. La formulación de fragancia de la reivindicación 2, en la que la cantidad aceptable olfativa es de aproximadamente el 1 a aproximadamente el 10 por ciento en peso de la formulación de fragancia.
- 20 6. Un método para mejorar, potenciar o modificar una formulación de fragancia mediante la adición de una cantidad olfativa aceptable de un compuesto seleccionado del grupo que consiste en 2,2,3a,7-tetrametil-octahidro-benzofurano y 3a-isopropil-2,6-dimetil-octahidro-benzofurano.
7. El método de la reivindicación 6, en el que la cantidad olfativa aceptable es de aproximadamente el 0,005 a aproximadamente el 50 por ciento en peso de la formulación de fragancia.
- 25 8. El método de la reivindicación 6, en el que la cantidad olfativa aceptable es de aproximadamente el 0,5 a aproximadamente el 25 por ciento en peso de la formulación de fragancia.
9. El método de la reivindicación 6, en el que la cantidad aceptable olfativa es de aproximadamente el 1 a aproximadamente el 10 por ciento en peso de la formulación de fragancia.
- 30 10. Un producto de fragancia que comprende el compuesto de la reivindicación 1.
11. El producto de fragancia de la reivindicación 10, en el que el producto de fragancia se selecciona del grupo que consiste en un perfume, una colonia, agua de tocador, un producto cosmético, un producto para el cuidado personal, un producto para el cuidado de tejidos, un producto de limpieza y un ambientador.
- 35 12. El producto de fragancia de la reivindicación 11, en el que el producto de limpieza se selecciona del grupo que consiste en un detergente, una composición para lavavajillas, un compuesto para fregar y un limpiacristales.