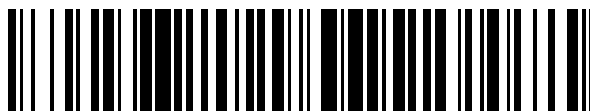


19



OFICINA ESPAÑOLA DE  
PATENTES Y MARCAS

ESPAÑA



11 Número de publicación: **2 622 930**

51 Int. Cl.:

**C11B 9/00** (2006.01)

**C07C 35/06** (2006.01)

**C07C 35/21** (2006.01)

12

TRADUCCIÓN DE PATENTE EUROPEA

T3

96 Fecha de presentación y número de la solicitud europea: **02.12.2014** **E 14195879 (3)**

97 Fecha y número de publicación de la concesión europea: **15.03.2017** **EP 2902468**

54 Título: **Método para usar compuestos de ciclopentanol como materiales de fragancia**

30 Prioridad:

**11.12.2013 US 201314103100**

45 Fecha de publicación y mención en BOPI de la  
traducción de la patente:  
**07.07.2017**

73 Titular/es:

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

72 Inventor/es:

**LEVORSE, JR., ANTHONY T. y  
GIFFIN, NICOLE L.**

74 Agente/Representante:

**ARIAS SANZ, Juan**

ES 2 622 930 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**

Método para usar compuestos de ciclopentanol como materiales de fragancia

**5 Campo de la invención**

La presente invención se refiere a nuevas entidades químicas y a un método de uso de las mismas como materiales para fragancia.

**10 Antecedentes de la invención**

Hay una necesidad en desarrollo en la industria de fragancias para proporcionar nuevos agentes químicos para dar a los perfumistas y a otras personas la capacidad de crear nuevas fragancias para perfumes, colonias y productos para el cuidado personal. Las personas con experiencia en la materia aprecian cómo las pequeñas diferencias en las estructuras químicas pueden dar como resultado diferencias inesperadas y significativas en olor, notas y características de las moléculas. Estas variaciones permiten a los perfumistas y a otras personas aplicar nuevos compuestos y crear nuevas fragancias. Por ejemplo, los compuestos de benceno que difieren ligeramente en 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. Por consiguiente, se muestra que muchos compuestos trans comparten el olor pronunciado de tipo orina-sudoración, mientras que los compuestos cis correspondientes son inodoros o, como máximo, poseen un olor floral o leñoso débil e indefinible. Sin embargo, se ha mostrado que otros terc-butil ciclohexanos trans y cis poseen actividades sensoriales opuestas [Ohloff, *et al*, Helvetica Chimica Acta 66, Fasc. 5: 1343-1354 (1983)]. Por lo tanto, para las personas con experiencia en la materia es difícil predecir una estructura dada que pudiera ser eficaz en las actividades sensoriales. La identificación de productos químicos de fragancia deseables continúa planteando desafíos difíciles.

El documento de Patente de Estados Unidos N.º 3852219 desvela compuestos generales de 2-sec-butil-1-etinilciclopentanol para su uso en perfumes y colonias. Sin embargo, el documento de Patente de Estados Unidos N.º 3852219 no desvela ni enseña los compuestos de la presente invención para su uso como formulaciones de fragancia.

**35 Sumario de la Invención**

La presente invención proporciona nuevos compuestos, el uso ventajoso inesperado de los mismos para potenciar, aumentar o modificar la fragancia de perfumes, colonias, aguas de colonia, productos para el cuidado de tejidos, productos personales y similares.

Una realización de la presente invención se refiere a un método para mejorar, potenciar o modificar una formulación de fragancia a través de la adición de una cantidad olfativa aceptable de un compuesto seleccionado entre el grupo que consiste en:

1-etil-2-pentil-ciclopentanol;  
1-etil-2-(3-metil-butil)-ciclopentanol;  
1-metil-2-pentil-ciclopentanol; y  
1-metil-2-(3-metil-butil)-ciclopentanol.

Otra realización de la presente invención se refiere a una formulación de fragancia que contiene una cantidad olfativa aceptable de un compuesto seleccionado entre el grupo que consiste en:

1-etil-2-pentil-ciclopentanol;  
1-etil-2-(3-metil-butil)-ciclopentanol;  
1-metil-2-pentil-ciclopentanol; y  
1-metil-2-(3-metil-butil)-ciclopentanol.

Otra realización de la presente invención se refiere a un producto de fragancia que contiene una cantidad olfativa aceptable de las formulaciones de fragancia proporcionadas anteriormente.

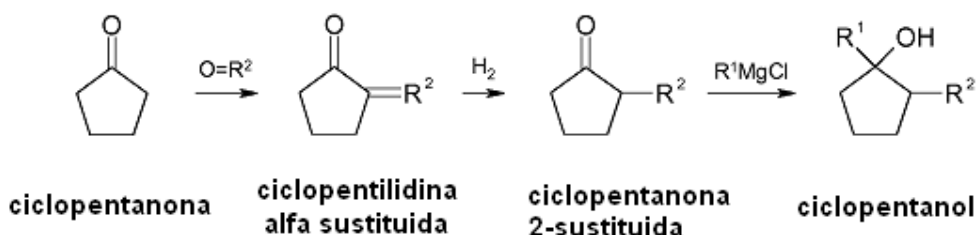
Estas y otras realizaciones de la presente invención serán evidentes mediante la lectura de la siguiente memoria descriptiva.

**Descripción detallada de la invención**

Los nuevos ciclopentanoles de la presente invención se ilustran, por ejemplo, mediante los siguientes ejemplos.

| N.º           | Nombre Químico                          |
|---------------|-----------------------------------------|
| Estructura 6  | 1-Etil-2-pentil-ciclopentanol           |
| Estructura 7  | 1-Etil-2-(3-metil-butil)-ciclopentanol  |
| Estructura 63 | 1-Metil-2-pentil-ciclopentanol          |
| Estructura 64 | 1-Metil-2-(3-metil-butil)-ciclopentanol |

Los compuestos de la presente invención se pueden preparar a partir de ciclopentanona. Las etapas de reacción se pueden representar mediante un esquema que se muestra a continuación:



en el que R<sup>1</sup> representa un hidrocarburo C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub> y R<sup>2</sup> representa un grupo hidrocarburo C<sub>2</sub>-C<sub>9</sub>, y en el que R<sup>1</sup> y R<sup>2</sup> se seleccionan para preparar compuestos de ciclopentanol seleccionados entre 1-etil-2-pentil-ciclopentanol, 1-etil-2-(3-metil-butil)-ciclopentanol, 1-metil-2-pentil-ciclopentanol, y 1-metil-2-(3-metil-butil)-ciclopentanol.

La preparación mencionada anteriormente se detalla en los Ejemplos. Los materiales se adquirieron en Aldrich Chemical Company a menos que se indique de otro modo.

De manera sorprendente se encontró que los compuestos de la presente invención poseen un efecto de fragancia potente y complejo tal como, por ejemplo, notas frescas, cítricas y verdes con fondos adicionales amaderados y canforáceos y térreos.

El uso de los compuestos de la presente invención se puede aplicar ampliamente en productos de perfumería actuales, incluyendo las preparaciones 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, ambientadores y preparaciones cosméticas. La presente invención también se puede usar para perfumar agentes de limpieza, tales como, pero no limitados a, detergentes, materiales para lavavajillas, composiciones de fregado, 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. Las personas con experiencia en la materia conocen la naturaleza y la diversidad de los otros ingredientes que también se pueden usar. En la presente invención se pueden usar muchos tipos de fragancias, siendo la única limitación la compatibilidad con los otros componentes usados. Las fragancias adecuadas incluyen, pero no se limitan a, frutos tales como almendra, manzana, cereza, uva, pera, piña, naranja, fresa, frambuesa; almizcle, aromas de flores tales como similares a lavanda, similares a rosa, similares a iris, similares a clavel. Otros aromas agradables incluyen aromas de hierbas aromáticas y bosques obtenidos a partir de pino, píceo y otros olores forestales. Las fragancias también se pueden obtener a partir de diversos aceites, tales como aceites esenciales, o de materiales vegetales tales como menta piperita, hierbabuena y similares.

Un listado de fragancias adecuadas se proporciona en el documento de Patente de Estados Unidos N.º 4.534.891, cuyos contenidos se incorporan por referencia como se establece en su totalidad. 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 acacia, casia, chipre, ciclamen, helecho, gardenia, espino blanco, heliotropo, madreselva, jácinto, jazmín, lila, lirio, magnolia, mimosa, narciso, heno recién cortado, azahar, orquídea, reseda, quinsante de olor, trébol, nardo índico, vainilla, violeta, alhelí, y similares.

Los compuestos de la presente invención se pueden usar en combinación con un compuesto de fragancia complementario. La expresión "compuesto de fragancia complementario", como se usa en el presente documento, se define como un compuesto de fragancia seleccionado entre el grupo que consiste en 2-[(4-metilfenil)metil]heptanal (Acalea), éster de alilo del ácido iso-amil oxiacético (Amil Glicolato de Alilo), propano-1,3-dioato de (3,3-dimetilciclohexil)etiletilo (Applelide), (E/Z)-1-etoxi-1-deceno (Arctical), 2-etil-4-(2,2,3-trimetil-3-ciclo-penten-1-il)-2-buten-1-ol (Bacdanol), 2-metil-3-[(1,7,7-trimetilbicyclo[2,2,1]hept-2-il)oxil]exo-1-propanol (Bornafix), 1,2,3,5,6,7-

- hexahidro-1,1,2,3,3-pentametil-4H-inden-4-ona (Cashmeran), trimetilciclopentenilmetiloxabicyclooctano (Cassiffix), 1,1-dimetoxi-3,7-dimetil-2,6-octadieno (Cital DMA), 3,7-dimetil-6-octen-1-ol (Citronelol), acetato de 3A,4,5,6,7,7A-hexahidro-4,7-metano-1H-inden-5/6-ilo (Ciclacet), propionato de 3A,4,5,6,7,7A-hexahidro-4,7-metano-1H-inden-5/6-ilo (Ciclaprop), 3A,4,5, butirato de 3A,4,5,6,7,7A-hexahidro-4,7-metano-1G-inden-5/6-ilo (Ciclobutanato), 1-(2,6,6-trimetil-3-ciclohexen-1-il)-2-buten-1-ona (Delta Damascona), 3-(4-etilfenil)-2,2-dimetil propanonitrilo (Fleuranilo), 3-(O/P-etilfenil) 2,2-dimetil propionaldehído (Floralozone), tetrahidro-4-metil-2-(2-metilpropil)-2H-piran-4-ol (Florifol), 1,3,4,6,7,8-hexahidro-4,6,6,7,8,8-hexametilciclopenta-gamma-2-benzopirano (Galaxolide), 1-(5,5-dimetil-1-ciclohexen-1-il)pent-4-en-1-ona (Galbascone), acetato de E/Z-3,7-dimetil-2,6-octadien-1-ilo (Acetato de Geranilo),  $\alpha$ -metil-1,3-benzodioxol-5-propanal (Helional), 1-(2,6,6-trimetil-2-ciclohexen-1-il)-1,6-heptadien-3-ona (Hexalon), (Z)-3-hexenil-2-hidroxibenzoato (Salicilato de Hexenilo, CIS-3), 4-(2,6,6-trimetil-2-ciclohexen-1-il)-3-buten-2-ona (Ionona  $\alpha$ ), 1-(1,2,3,4,5,6,7,8-octahidro-2,3,8,8-tetrametil-2-naftalenil)-etan-1-ona (Iso E Super), 3-oxo-2-pentilciclopentanoacetato de metilo (Kharismal), 2,2,4-trimetil-4-fenil-butanonitrilo (Khusinilo), 3,4,5,6,6-pentametilhept-3-en-2-ona (Koavone), 3/4-(4-hidroxi-4-metil-pentil) ciclohexeno-1-carboxaldehído (Lyril), 3-metil-4-(2,6,6-trimetil-2-ciclohexen-1-il)-3-buten-2-ona (Metil Ionona  $\gamma$ ), 1-(2,6,6-trimetil-2-ciclohexen-1-il) pent-1-en-3-ona (Metil Ionona  $\alpha$  Extra, Metil Ionona N), 3-metil-4-fenilbutan-2-ol (Muguesia), ciclopentadec-4-en-1-ona (Musk Z4), 3,3,4,5,5-pentametil-11,13-dioxatriciclo[7,4,0.0<2,6>]tridec-2(6)-eno (Nebulone), acetato de 3,7-dimetil-2,6-octadien-1-ilo (Acetato de Nerilo), 3,7-dimetil-1,3,6-octatrieno (Ocimeno), orto-toliletanol (Peomosa), 3-metil-5-fenilpentanol (Fenoxanol), 1-metil-4-(4-metil-3-pentenil) ciclohex-3-eno-1-carboxaldehído (Preciclemona B), 4-metil-8-metilen-2-adamantanol (Prismantol), 2-etil-4-(2,2,3-trimetil-3-ciclopenten-1-il)-2-buten-1-ol (Sanjinol), 2-metil-4-(2,2,3-trimetil-3-ciclopenten-1-il)-2-buten-1-ol (Santaliff), Terpeneol, 2,4-dimetil-3-ciclohexeno-1-carboxaldehído (Triplal), decahidro-2,6,6,7,8,8-hexametil-2H-indeno[4,5-B]furano (Trisamber), acetato de 2-terc-butilciclohexilo (Verdox), acetato de 4-terc-butilciclohexilo (Vertenex), acetil cedreno (Vertofix), 3,6/4,6-dimetilciclohex-3-en-1-carboxaldehído (Vertoliff) y (3Z)-1-[(2-metil-2-propenil)oxi]-3-hexeno (Vivaldie).
- La complejidad de las notas de olor se refiere a la presencia de olores múltiples y/o mixtos pero definidos en lugar de una sola nota o unas pocas notas fácilmente identificables. Los niveles de complejidad elevados e también se asignan a compuestos que poseen notas ambiguas y hasta cierto punto difíciles de definir debido a la contribución directa o a las muchas combinaciones olfativas de olores producidas. Se considera que los materiales de fragancia de alto nivel de complejidad tienen una calidad inusual y elevada.
- Las expresiones "formulación de fragancia", "composición de fragancia" y "composición de perfume" significan lo mismo y se refieren a una composición de consumo que es una mezcla de compuestos que incluyan, por ejemplo, alcoholes, aldehídos, cetonas, ésteres, éteres, lactonas, nitrilos, aceites naturales, aceites sintéticos y mercaptanos, que se mezclan de manera que los olores combinados de los componentes individuales produzcan una fragancia agradable o deseada. La formulación de fragancia de la presente invención es una composición de consumo que comprende un compuesto de la presente invención. La formulación de fragancia de la presente invención comprende un compuesto de la presente invención y además un compuesto de fragancia complementario como se ha definido anteriormente.
- La expresión "producto de fragancia" se refiere a un producto de consumo que contiene un ingrediente de fragancia que añade fragancia o enmascara un mal olor. Los productos de fragancia pueden incluir, por ejemplo, perfumes, colonias, jabones en barra, jabones líquidos, geles de ducha, baños de espuma, cosméticos, productos para el cuidado de la piel tales como cremas, lociones y productos de afeitado, productos para el cuidado del cabello para usar como champú, aclarado, acondicionamiento, blanqueamiento, coloración, teñido y moldeado, desodorantes y antitranspirantes, productos para el cuidado femenino tales como tampones y compresas femeninas, productos para el cuidado de los bebés tales como pañales, barberos y toallitas, productos para el cuidado familiar tales como papeles higiénicos, pañuelos faciales, pañuelos de papel o toallas de papel, productos para tejidos tales como suavizantes y ambientadores para tejidos, productos para el cuidado del aire tales como ambientadores sistemas de suministro de fragancias, preparaciones cosméticas, agentes de limpieza y desinfectantes tales como detergentes, materiales de lavado a máquina, composiciones para fregar, productos de limpieza de vidrio y metal, tales como limpiacristales, limpiadores de encimera, limpiadores de suelo y alfombras, limpiadores de inodoro y aditivos de blanqueamiento, agentes de lavado tales como agentes de lavado de uso general, de uso intensivo y de lavado de manos o de tejidos finos incluyendo detergentes de lavandería y aditivos de aclarado, productos para la higiene dental y oral tales como dentífricos, blanqueamiento dental y enjuagues bucales, productos para la salud y nutricionales y productos alimenticios tales como productos para aperitivo y bebida. El producto de fragancia de la presente invención es un producto de consumo que contiene un compuesto de la presente invención. El producto de fragancia de la presente invención puede contener un compuesto de la presente invención y además un compuesto de fragancia complementario como se ha definido anteriormente.
- Se entiende que el término "mejorar" en la expresión "mejorar, potenciar o modificar una formulación de fragancia" se refiere a elevar la formulación de fragancia hasta un carácter más deseable. Se entiende que el término "potenciar" se refiere a hacer que la formulación de fragancia sea de mayor eficacia o proporcionar a la formulación de fragancia una mejora en el carácter. Se entiende que el término "modificar" se refiere a proporcionar a la formulación de fragancia un cambio en el carácter.

Se entiende que la expresión "cantidad olfativa aceptable" se refiere a 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, el compuesto de la presente invención se puede usar para mejorar o potenciar las características de aroma de la formulación de fragancia, o modificando la reacción olfativa a la que contribuyen otros ingredientes de la formulación. La cantidad olfativa aceptable puede variar dependiendo de muchos factores incluyendo otros ingredientes, sus cantidades relativas y el efecto olfativo que se desea.

La cantidad de los compuestos de la presente invención usados en una formulación de fragancia varía desde aproximadamente un 0,005 a aproximadamente un 70 por ciento en peso, preferentemente de un 0,005 a aproximadamente un 50 por ciento en peso, más preferentemente de aproximadamente un 0,5 a aproximadamente un 25 por ciento en peso e incluso más preferentemente de aproximadamente un 1 a aproximadamente un 10 por ciento en peso. Los expertos en la materia serán capaces de usar 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 en conjunto con la formulación de fragancia para encapsular y/o suministrar la fragancia. Algunos materiales bien conocidos son, por ejemplo, pero no se limitan a, polímeros, oligómeros, otros no polímeros tales como tensioactivos, agentes emulgentes, lípidos incluyendo grasas, ceras y fosfolípidos, aceites orgánicos, aceites minerales, vaselina, aceites naturales, fijadores de perfume, fibras, almidones, azúcares y materiales de superficie sólida tales como zeolita y sílice.

Cuando se usan en una formulación de fragancia, estos ingredientes proporcionan notas adicionales para preparar una formulación de fragancia más deseable y apreciable, y para añadir la percepción de valor. Las cualidades de olor encontradas en estos materiales ayudan a embellecer y potenciar el acorde terminado así como para mejorar el comportamiento de los demás materiales en la formulación de fragancia.

Además, de manera sorprendente también se encuentra que los compuestos de la presente invención proporcionan un comportamiento superior del ingrediente y poseen ventajas inesperadas en el mal olor que contrarrestan aplicaciones tales como transpiración corporal, olor ambiental tal como moho y hongos, baño, etc. Los compuestos de la presente invención eliminan sustancialmente la percepción de malos olores y/o previenen la formación de tales malos olores, por lo tanto, se pueden usar con un gran número de productos funcionales.

Los ejemplos de los productos funcionales se proporcionan en el presente documento para ilustrar los diversos aspectos de la presente invención. Sin embargo, no tienen la intención de limitar el alcance de la presente invención. Los productos funcionales pueden incluir, por ejemplo, una composición convencional de ambientador (o desodorante), tal como pulverizadores ambientadores de habitaciones, un aerosol u otro pulverizador, difusores de fragancia, un sistema de mecha u otro sistema líquido, o un sólido, por ejemplo velas o una base de cera tal como en las aromáticas y en plástico, polvos carcomen sobrecitos o en aerosoles o geles secos, tal como en forma de varillas de gel sólido, desodorantes de ropa aplicados mediante aplicaciones de lavado a máquina tales como detergentes, polvos, líquidos, blanqueadores o suavizantes de tejido, sustancias para refrescar tejidos, pulverizadores para ropa del hogar, bloques para armario, pulverizadores de aerosol para armario, o zonas de almacenamiento de ropa o en limpieza en seco para superar las notas de disolvente residual en la ropa, accesorios de baño tales como toallas de papel, tejidos de baño, toallitas sanitarias, toallas húmedas, paños de lavado desechables, pañales desechables, desodorantes de cubeta para pañales, limpiadores tales como desinfectantes y limpiadores de inodoros, productos cosméticos tales como antitranspirantes y desodorantes, desodorantes corporales generales en forma de polvos, aerosoles, líquidos o sólidos, o productos para el cuidado del cabello tales como aerosoles para el cabello, acondicionadores, enjuagues, colores y tintes para el cabello, ondas permanentes, depilatorios, alisadores para el cabello, aplicaciones para preparar el cabello tales como gominas, cremas y lociones, productos para el cuidado del cabello medicinales que contienen ingredientes tales como sulfuro de selenio, alquitrán de hulla o salicilatos, o champús, o productos para el cuidado de los pies tales como polvos, líquidos o colonias para los pies, productos para después del afeitado y lociones corporales, o jabones y detergentes sintéticos tales como barras, líquidos, espumas o polvos, control de olor tales como durante procesos de fabricación, tales como en la industria de acabado textil y en la industria de impresión (tintas y papel), control de efluentes tales como en procesos involucrados en formación de pulpa, corrales y procesamientos de carne, tratamiento de aguas residuales, bolsas de basura, o eliminación de basura, o en el control de olor de productos tal como en productos acabados textiles, productos terminados de caucho o ambientadores de vehículos, productos agrícolas y para el cuidado de mascotas tales como efluentes domésticos de perro y gallina y productos para el cuidado de animales domésticos y mascotas tales como desodorantes, champú o agentes de limpieza, o material de cama para animales y sistemas de aire cerrado a gran escala tales como auditorios, y sistemas subterráneos y de transporte.

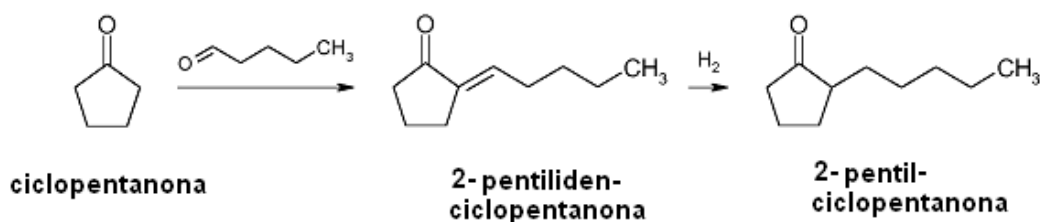
Por lo tanto, se observará que la composición de la invención normalmente es una en la que el agente que neutraliza el mal olor está presente junto con un vehículo por medio del que o desde el que el agente que neutraliza el mal olor se puede introducir en un espacio de aire en el que el mal olor está presente, o un sustrato sobre el que se ha depositado el mal olor. Por ejemplo, el vehículo puede ser un propulsor de aerosol tal como clorofluoro-metano, o un sólido tal como una cera, material plástico, caucho, polvo inerte o gel. En un ambientador de tipo mecha, el vehículo es un líquido sustancialmente inodoro de baja volatilidad. En varias aplicaciones, una composición de la invención contiene un agente tensioactivo o un desinfectante, mientras que en otras, el agente que neutraliza el mal olor está

presente sobre un sustrato fibroso. En muchas composiciones de la invención también está presente un componente de fragancia que imparte una fragancia a la composición. Se pueden usar todas las fragancias que se han indicado anteriormente.

- 5 Se entiende que una cantidad eficaz que neutraliza el mal olor se refiere a la cantidad del agente que neutraliza el mal olor de la invención usado en un producto funcional que es organolépticamente eficaz para disminuir un mal olor dado a la vez que se reduce la intensidad combinada del nivel de olor, en el que el mal olor dado está presente en el espacio aéreo o se ha depositado sobre un sustrato. La cantidad exacta de agente que neutraliza el mal olor usada puede variar dependiendo del tipo de agente que neutraliza el mal olor, el tipo de vehículo usado y el nivel deseado de neutralización del mal olor. En general, la cantidad de agente que neutraliza el mal olor presente es la dosificación habitual requerida para obtener el resultado deseado. El experto con experiencia en la materia conoce una dosificación de este tipo. En una realización preferente, cuando se usan en conjunto con productos sólidos o líquidos funcionales con mal olor, por ejemplo, jabón y detergente, los compuestos de la invención pueden estar presentes en una cantidad que varía de aproximadamente un 0,005 a aproximadamente un 50 por ciento en peso, preferentemente de aproximadamente un 0,01 a aproximadamente un 20 por ciento en peso, y más preferentemente de aproximadamente un 0,05 a aproximadamente un 5 por ciento en peso, y cuando se usan en conjunto con productos funcionales gaseosos con mal olor, los compuestos de la presente invención pueden estar presentes en una cantidad que varía de aproximadamente 0,1 a 10 mg por metro cúbico de aire.
- 20 Lo que sigue a continuación se proporciona como realizaciones específicas de la presente invención. Otras modificaciones de la presente invención resultarán fácilmente evidentes para las personas con experiencia en la materia. Se entiende que las modificaciones de este tipo están dentro del alcance de la presente invención. Como se usa en el presente documento, todos los porcentajes son porcentajes en peso a menos que se indique otra de otro modo, se entiende que ppm se refiere a partes por millón, se entiende que l es litro, se entiende que ml es mililitro, se entiende que g es gramo, se entiende que mol es mol, se entiende que psi son libras por pulgada cuadrada, y se entiende que mmHg son milímetros (mm) de mercurio (Hg). Como se usa en los ejemplos, se entiende que IFF se refiere a International Flavors & Fragrances Inc., Nueva York, NY, USA.

### **EJEMPLO 1**

30



- Preparación de 2-Pentil-ciclopentanona:** Un matraz de reacción de 3 l se cargó con ciclopentanona (500 g, 6 mol), agua (H<sub>2</sub>O) (500 ml) e hidróxido sódico (NaOH) (10 g, 0,25 mol). Se alimentó valeraldehído (430 g, 5 mol) en el matraz de reacción durante 3 horas a la vez que la temperatura se mantuvo a 25-30 °C. Después de completar la alimentación, la reacción se envejeció durante 2 horas y se neutralizó con ácido clorhídrico (HCl) (30 g, 0,3 mol) a la vez que la temperatura se mantuvo a 25-30 °C. La masa de reacción se envejeció adicionalmente durante 2 horas. La fase orgánica se separó y se lavó con bicarbonato sódico acuoso saturado (NaHCO<sub>3</sub>) (200 ml). El producto en bruto obtenido se fraccionó para proporcionar 2-pentiliden-ciclopentanona (523 g) con un punto de ebullición de 122 °C a 3 mmHg. Un autoclave de cremallera de 1 l se cargó con 2-pentilidín ciclopentanona (523 g) y paladio sobre carbono (Pd/C) (2 g). El autoclave se purgó tres veces con nitrógeno seguido de tres veces con hidrógeno. A continuación, el agitador del autoclave se puso en funcionamiento a 1500 rpm y la presión se estableció en 100 psi. Se dejó que la reacción produjera exotermia a aproximadamente 120 °C y se mantuvo a esta temperatura durante 2 horas. El autoclave se enfrió a una temperatura ambiente. A continuación, el hidrógeno se ventiloó y el autoclave se purgó posteriormente tres veces con nitrógeno. El Pd/C se retiró por filtración a través de Celite®. El producto en bruto, 2-pentil-ciclopentanona (520 g), se obtuvo, y se usó en las siguientes etapas sin purificación adicional.

2-Pentiliden-ciclopentanona:

- RMN <sup>1</sup>H (500 MHz, CDCl<sub>3</sub>): 6,40 ppm (t, 1H), 3,75-3,15 ppm (m, 2H), 2,70-2,55 ppm (m, 2H), 2,25-2,15 ppm (m, 1H), 1,96-2,14 ppm (m, 1H), 1,71-1,82 ppm (m, 2H), 1,48-1,57 ppm (m, 1H), 1,20-1,37 ppm (m, 3H), 0,88 ppm (t, 3H, J = 6,95 Hz)

2-Pentil-ciclopentanona:

- RMN <sup>1</sup>H (500 MHz, CDCl<sub>3</sub>): 2,25-2,32 ppm (m, 1H), 2,18-2,25 ppm (m, 1H), 1,96-2,14 ppm (m, 3H), 1,71-1,82 ppm (m, 2H), 1,48-1,57 ppm (m, 1H), 1,20-1,37 ppm (m, 7H), 0,88 ppm (t, 3H, J = 6,95 Hz)

**EJEMPLO II**

**Preparación de 1-Metil-2-pentil-ciclopentanol (Estructura 63):** Un matraz de reacción de 3 l se cargó con una solución de cloruro de metilmagnesio (MeMgCl) en tetrahidrofurano (THF) (800 ml, 2,4 mol) y THF (500 ml). El matraz de reacción se enfrió a 5-10 °C. La 2-pentil-ciclopentanona (370 g, 2,4 mol) (preparada como anteriormente en el EJEMPLO I) se alimentó en la mezcla de reacción durante una hora. La reacción se envejeció durante 4 horas y a continuación se neutralizó con ácido acético (CH<sub>3</sub>COOH) (160 g) a la vez que la temperatura se mantuvo a 5-10 °C. La mezcla de reacción se vertió en H<sub>2</sub>O (3 l) y tolueno (1 l). La fase orgánica se separó y se destiló fraccionadamente para proporcionar 1-metil-2-pentil-ciclopentanol (245 g) con un punto de ebullición de 150-152 °C a 3 mmHg.

RMN <sup>1</sup>H (500 MHz, CDCl<sub>3</sub>): 1,85-1,91 ppm (m, 1H), 1,62-1,76 ppm (m, 3H), 1,17-1,59 ppm (m, 10H), 1,27 ppm (s, 3H), 1,10-1,20 ppm (m, 2H), 0,89 ppm (t, 3H, J = 6,85 Hz).

En los siguientes Ejemplos III-VI, los ciclopentanoles con las estructuras 6, 7, 63 y 64 forman parte de la invención. Las estructuras restantes se proporcionan solamente para información y fines comparativos.

**EJEMPLO III**

Los siguientes ciclopentanoles se prepararon de una manera similar.

**1-Etil-2-isobutil-ciclopentanol (Estructura 4)** (punto de ebullición de 145-150 °C a 5 mmHg)

RMN <sup>1</sup>H (500 MHz, CDCl<sub>3</sub>): 1,82-1,90 ppm (m, 1H), 1,62-1,81 ppm (m, 4H), 1,48-1,61 ppm (m, 3H), 1,34-1,47 ppm (m, 2H), 1,12-1,25 ppm (m, 2H), 1,04 ppm (s, 1H), 0,94 ppm (t, 3H, J = 7,65 Hz), 0,93 ppm (d, 3H, J = 6,60 Hz), 0,86 ppm (d, 3H, J = 6,55 Hz)

**1-Etil-2-pentil-ciclopentanol (Estructura 6)** (punto de ebullición de 165-166 °C a 3 mmHg)

RMN <sup>1</sup>H (500 MHz, CDCl<sub>3</sub>): 1,84-1,90 ppm (m, 1H), 1,60-1,78 ppm (m, 4H), 1,35-1,58 ppm (m, 6H), 1,15-1,35 ppm (m, 6H), 1,13 ppm (s, 1H), 0,94 ppm (t, 3H, J = 7,5 Hz), 0,89 ppm (t, 3H, J = 6,7 Hz)

**1-Etil-2-(3-metil-butil)-ciclopentanol (Estructura 7)** (punto de ebullición de 155-159 °C a 5 mmHg)

RMN <sup>1</sup>H (500 MHz, CDCl<sub>3</sub>): 1,84-1,90 ppm (m, 1H), 1,66-1,81 ppm (m, 2H), 1,64 ppm (t, 2H, J = 7,45 Hz), 1,45-1,59 ppm (m, 2H), 1,35-1,45 ppm (m, 4H), 1,18-1,28 ppm (m, 1H), 1,12-1,18 ppm (m, 2H), 1,05 ppm (s, 1H), 0,94 ppm (t, 3H, J = 7,50 Hz), 0,89 ppm (d, 3H, J = 6,25 Hz), 0,88 ppm (d, 3H, J = 6,15 Hz)

**2-Etil-biciclopentil-2-ol (Estructura 12)** (punto de ebullición de 135-140 °C a 5 mmHg)

RMN <sup>1</sup>H (500 MHz, CDCl<sub>3</sub>): 1,87-1,91 ppm (m, 1H), 1,42-1,84 ppm (m, 15H), 1,11-1,20 ppm (m, 2H), 1,10 ppm (s, 1H), 0,94 ppm (t, 3H, J = 7,45 Hz)

**1-Etil-2-heptil-ciclopentanol (Estructura 28)** (punto de ebullición de 176-178 °C a 3 mmHg)

RMN <sup>1</sup>H (500 MHz, CDCl<sub>3</sub>): 1,84-1,98 ppm (m, 1H), 1,61-1,78 ppm (m, 4H), 1,35-1,60 ppm (m, 6H), 1,12-1,34 ppm (m, 10H), 0,92-1,06 ppm (m, 4H), 0,88 ppm (t, 3H, J = 6,53 Hz)

**2-(3,4-Dimetil-pentil)-1-etil-ciclopentanol (Estructura 29)** (punto de ebullición de 163-166 °C a 3 mmHg)

RMN <sup>1</sup>H (500 MHz, CDCl<sub>3</sub>): 1,84-1,94 ppm (m, 1H), 1,66-1,78 ppm (m, 2H), 1,62-1,66 ppm (m, 2H), 1,47-1,62 ppm (m, 3H), 1,35-1,46 ppm (m, 3H), 1,23-1,31 ppm (m, 2H), 1,11-1,22 ppm (m, 1H), 1,02-1,09 ppm (m, 2H), 0,94 ppm (t, 3H, J = 7,53 Hz), 0,86 ppm (d, 3H, J = 6,83 Hz, de d, J = 1,53 Hz), 0,78-0,82 ppm (m, 6H)

**2-Isobutil-1-vinil-ciclopentanol (Estructura 33)** (punto de ebullición de 130-132 °C a 5 mmHg)

RMN <sup>1</sup>H (500 MHz, CDCl<sub>3</sub>): 5,86 ppm (d, 1H, J = 17,25 Hz, de d, J = 10,72 Hz), 5,26 ppm (d, 1H, J = 17,27 Hz, de d, J = 1,42 Hz), 5,10 ppm (d, 1H, J = 10,72 Hz, de d, J = 1,40 Hz), 1,44-1,96 ppm (m, 8H), 1,19 ppm (s, 1H), 1,09-1,18 ppm (m, 2H), 0,90 ppm (d, 3H, J = 6,60 Hz), 0,84 ppm (d, 3H, J = 6,56 Hz)

**2-(3-Metil-butil)-1-vinil-ciclopentanol (Estructura 36)** (punto de ebullición de 125-128 °C a 5 mmHg)

RMN <sup>1</sup>H (500 MHz, CDCl<sub>3</sub>): 5,87 ppm (d, 1H, J = 17,26 Hz, de d, J = 10,75 Hz), 5,27 ppm (d, 1H, J = 17,28 Hz, de d, J = 1,23 Hz), 5,09 ppm (d, 1H, J = 10,73 Hz, de d, J = 1,18 Hz), 1,89-1,96 ppm (m, 1H), 1,74-1,88 ppm (m, 2H), 1,56-1,72 ppm (m, 3H), 1,44-1,54 ppm (m, 2H), 1,37-1,43 ppm (m, 1H), 1,29 ppm (s, 1H), 1,06-1,24 ppm (m, 3H),

0,87 ppm (d, 3H, J = 6,45 Hz), 0,86 ppm (d, 3H, J = 6,40 Hz)

**2-Vinil-biciclopentil-2-ol (Estructura 41)** (punto de ebullición de 130 °C a 3 mmHg)

RMN <sup>1</sup>H (500 MHz, CDCl<sub>3</sub>): 5,95 ppm (d, 1H, J = 17,23 Hz, de d, J = 10,71 Hz), 5,27 ppm (d, 1H, J = 17,27 Hz, de d, J = 1,42 Hz), 5,02 ppm (d, 1H, J = 10,72 Hz, de d, J = 1,40 Hz), 1,70-1,91 ppm (m, 6H), 1,41-1,69 ppm (m, 8H), 1,39 ppm (s, 1H), 0,98-1,21 ppm (m, 2H)

**2-Isobutil-1-metil-ciclopentanol (Estructura 60)** (punto de ebullición de 125-130 °C a 5 mmHg)

RMN <sup>1</sup>H (500 MHz, CDCl<sub>3</sub>): 1,83-1,90 ppm (m, 1H), 1,49-1,80 ppm (m, 6H), 1,35-1,43 ppm (m, 1H), 1,26 ppm (s, 3H), 1,18-1,24 ppm (m, 2H), 1,14 ppm (s, 1H), 0,93 ppm (d, 3H, J = 6,65 Hz), 0,86 ppm (d, 3H, J = 6,55 Hz)

**1-Metil-2-(2-metil-alil)-ciclopentanol (Estructura 62)** (punto de ebullición de 122-125 °C a 25 mmHg)

RMN <sup>1</sup>H (500 MHz, CDCl<sub>3</sub>): 4,72 ppm (s, 2H), 2,24 ppm (d, 1H, J = 13,86 Hz, de d, J = 4,10 Hz), 1,95 ppm (d, 1H, J = 13,76 Hz, de d, J = 10,15 Hz), 1,75-1,86 ppm (m, 1H), 1,67-1,74 ppm (m, 7H), 1,52-1,62 ppm (m, 1H), 1,40-1,46 ppm (m, 1H), 1,30 ppm (s, 3H), 1,13 ppm (s, 1H)

**1-Metil-2-(3-metil-butil)-ciclopentanol (Estructura 64)** (punto de ebullición de 145-149 °C a 5 mmHg)

RMN <sup>1</sup>H (500 MHz, CDCl<sub>3</sub>): 1,84-1,91 ppm (m, 1H), 1,62-1,79 ppm (m, 3H), 1,44-1,61 ppm (m, 3H), 1,32-1,43 ppm (m, 2H), 1,27 ppm (s, 3H), 1,11-1,25 ppm (m, 4H), 0,90 ppm (d, 3H, J = 6,45 Hz), 0,88 ppm (d, 3H, J = 6,35 Hz)

**2-Metil-biciclopentil-2-ol (Estructura 69)** (punto de ebullición de 125-128 °C a 5 mmHg)

RMN <sup>1</sup>H (500 MHz, CDCl<sub>3</sub>): 1,90-1,96 ppm (m, 1H), 1,73-1,84 ppm (m, 3H), 1,67-1,72 ppm (m, 3H), 1,42-1,67 ppm (m, 6H), 1,37-1,41 ppm (m, 1H), 1,34 ppm (s, 3H), 1,30 ppm (s, 1H), 1,10-1,21 ppm (m, 2H)

**1-Metil-2-(2-metil-pentil)-ciclopentanol (Estructura 73)** (punto de ebullición de 105-107 °C a 3 mmHg)

RMN <sup>1</sup>H (500 MHz, CDCl<sub>3</sub>): 1,00-2,35 ppm (m, 15H), 1,25 ppm (s, 3H), 0,89 ppm (t, 3H, J = 6,75 Hz), 0,84 ppm (d, 3H, J = 6,60 Hz)

**2-Heptil-1-metil-ciclopentanol (Estructura 85)** (punto de ebullición de 175-178 °C a 3 mmHg)

RMN <sup>1</sup>H (500 MHz, CDCl<sub>3</sub>): 1,84-2,32 ppm (m, 2H), 1,61-1,82 ppm (m, 3H), 1,13-1,58 ppm (m, 18H), 0,88 ppm (t, 3H, J = 6,60 Hz)

**2-(3,4-Dimetil-pentil)-1-metil-ciclopentanol (Estructura 86)** (punto de ebullición de 155-158 °C a 5 mmHg)

RMN <sup>1</sup>H (500 MHz, CDCl<sub>3</sub>): 1,84-2,26 ppm (m, 2H), 1,48-1,81 ppm (m, 6H), 1,38-1,47 ppm (m, 2H), 1,37 ppm (s, 1H), 1,27 ppm (d, 3H, J = 1,48 Hz), 1,15-1,35 ppm (m, 1H), 1,14 ppm (s, 1H), 0,96-1,12 ppm (m, 1H), 0,86 ppm (d, 3H, J = 6,84 Hz), 0,81 ppm (d, 3H, J = 6,68 Hz), 0,79 ppm (d, 3H, J = 6,80 Hz)

**2-Bencil-1-metil-ciclopentanol (Estructura 87)** (punto de ebullición de 125-130 °C a 5 mmHg)

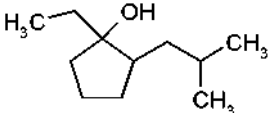
RMN <sup>1</sup>H (500 MHz, CDCl<sub>3</sub>): 7,15-7,30 ppm (m, 5H), 2,86-2,92 ppm (d, 1H, J = 13,36 Hz, de d, J = 4,07 Hz), 2,45-2,52 ppm (d, 1H, J = 13,32 Hz, de d, J = 10,41 Hz), 1,93-2,45 ppm (m, 1H), 1,61-1,85 ppm (m, 4H), 1,48-1,53 ppm (m, 2H), 1,32 ppm (s, 3H), 1,13 ppm (s, 1H)

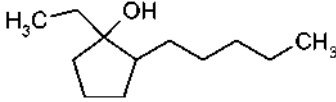
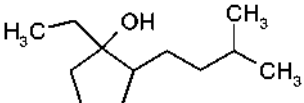
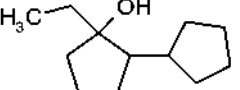
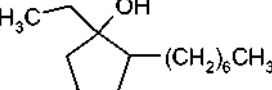
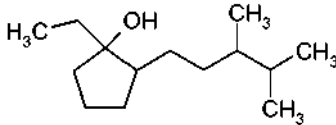
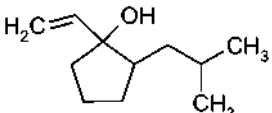
**1-Metil-2-(3,5,5-trimetil-hexil)-ciclopentanol (Estructura 88)** (punto de ebullición de 160-162 °C a 5 mmHg)

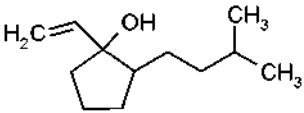
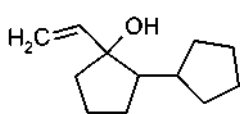
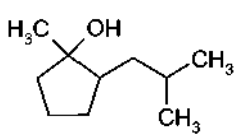
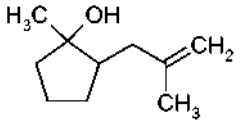
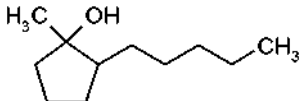
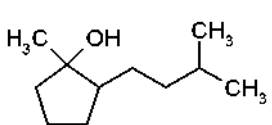
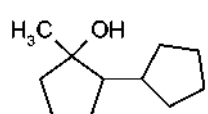
RMN <sup>1</sup>H (500 MHz, CDCl<sub>3</sub>): 1,81-2,17 ppm (m, 2H), 1,63-1,78 ppm (m, 3H), 1,34-1,55 ppm (m, 5H), 1,27 ppm (2s, 3H), 1,10-1,26 ppm (m, 3H), 0,99-1,10 ppm (m, 2H), 0,88-0,95 ppm (m, 12H).

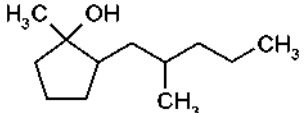
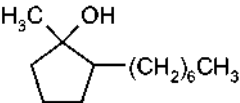
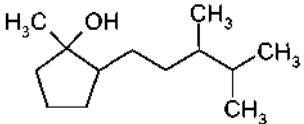
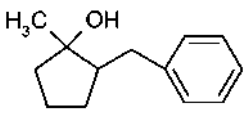
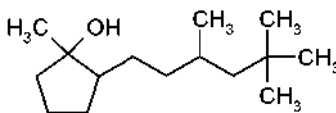
#### EJEMPLO IV

Las propiedades de fragancia de los ciclopentanoles mencionados anteriormente se evaluaron usando (i) fuerza de olor de 0 a 10, en la que 0 = ninguno, 1 = muy débil, 5 = moderado, 10 = extremadamente fuerte; y (ii) niveles de complejidad, en el que 0 = ninguno, 1 = muy débil, 5 = moderado, 10 = extremadamente elevado. Las puntuaciones medias se informan a continuación:

| Nombre Químico                                    | Estructura                                                                          | Perfil de Olor                                                | Fuerza | Complejidad |
|---------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------|--------|-------------|
| 1-Etil-2-isobutil-ciclopentanol<br>(Estructura 4) |  | Nota verde con fondo amaderado y fondos canforáceos y térreos | 6      | 7           |

| Nombre Químico                                                 | Estructura                                                                          | Perfil de Olor                                                                                                                                                                    | Fuerza | Complejidad |
|----------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------|-------------|
| 1-Etil-2-pentil-ciclopentanol<br>(Estructura 6)                |    | Notas lactónicas, dulces y cremosas con carácter frutal similar al coco y floral suave y fondo verde                                                                              | 8      | 7           |
| 1-Etil-2-(3-metil-butil)-ciclopentanol<br>(Estructura 7)       |    | Fuerza elevada con extrema complejidad; notas frescas, cítricas y verdes con fondos canforáceos y térreos; fondo amaderado adicional soportado por caracteres florales y frutales | 8      | 9           |
| 2-Etil-biciclopentil-2-ol<br>(Estructura 12)                   |   | Carácter amaderado con calidad de disolvente y química; notas canforáceas, térreas y de pino pero grasas                                                                          | 7      | 4           |
| 1-Etil-2-heptil-ciclopentanol<br>(Estructura 28)               |  | Notas frutales, de melocotón, lactónicas, florales y dulces; fuerza baja y complejidad baja                                                                                       | 1      | 1           |
| 2-(3,4-Dimetil-pentil)-1-etil-ciclopentanol<br>(Estructura 29) |  | Notas frutales, de melocotón, lactónicas, florales y dulces; fuerza baja y complejidad baja                                                                                       | 1      | 1           |
| 2-Isobutil-1-vinil-ciclopentanol<br>(Estructura 33)            |  | Notas frescas, canforáceas, amaderadas y térreas con cualidad grasa y química y caracteres de pescado, marinos y oleosos                                                          | 4      | 5           |

| Nombre Químico                                             | Estructura                                                                          | Perfil de Olor                                                                                                   | Fuerza | Complejidad |
|------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------|-------------|
| 2-(3-Metil-butil)-1-vinil-ciclopentanol<br>(Estructura 36) |    | Notas frescas y florales con cualidad grasa y sucia                                                              | 4      | 4           |
| 2-Vinil-biciclopentil-2-ol<br>(Estructura 41)              |    | Notas frescas, cítricas, amaderadas térreas y canforáceas con cualidad química, similar al queroseno y balsámica | 4      | 5           |
| 2-Isobutil-1-metil-ciclopentanol<br>(Estructura 60)        |    | Notas frescas, cítricas, florales, térreas y canforáceas con cualidad verde                                      | 7      | 7           |
| 1-Metil-2-(2-metil-alil)-ciclopentanol<br>(Estructura 62)  |  | Notas frescas y similares a pino con cualidad balsámica                                                          | 4      | 5           |
| 1-Metil-2-pentil-ciclopentanol<br>(Estructura 63)          |  | Notas lactónicas, frutales, florales, y similares al melocotón; con cualidad baja                                | 8      | 8           |
| 1-Metil-2-(3-metil-butil)-ciclopentanol<br>(Estructura 64) |  | Notas florales, herbáceas y de pino pero sin caracteres canforáceos o térreos                                    | 8      | 8           |
| 2-Metil-biciclopentil-2-ol<br>(Estructura 69)              |  | Notas frescas, cítricas, herbáceas y de anís con cualidad balsámico y química                                    | 6      | 5           |

| Nombre Químico                                                    | Estructura                                                                          | Perfil de Olor                                                                                                | Fuerza | Complejidad |
|-------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------|-------------|
| 1-Metil-2-(2-metil-pentil)-ciclopentanol<br>(Estructura 73)       |    | Notas frescas, frutales, florales y verdes                                                                    | 6      | 8           |
| 2-Heptil-1-metil-ciclopentanol<br>(Estructura 85)                 |    | Nota aldehydica con carácter frutal                                                                           | 7      | 6           |
| 2-(3,4-Dimetil-pentil)-1-metil-ciclopentanol<br>(Estructura 86)   |    | Notas lactónicas pero ligeramente quemadas, florales y aldehydicas con calidad grasa, de disolvente y química | 5      | 4           |
| 2-Bencil-1-metil-ciclopentanol<br>(Estructura 87)                 |  | Nota verde con carácter de disolvente, fuerza baja y complejidad baja                                         | 1      | 1           |
| 1-Metil-2-(3,5,5-trimetil-hexil)-ciclopentanol<br>(Estructura 88) |  | Nota floral con cualidad de goma gomosa y aldehydica                                                          | 3      | 3           |

Entre todas las estructuras evaluadas, las Estructuras 6, 7, 63 y 64 presentaban olores particularmente deseables, fuertes y complejos. Sus propiedades ventajosas son inesperadas.

#### **EJEMPLO V**

5

Además, se preparó un número de análogos de ciclopentanol mediante hidrogenación de los correspondientes alfa ciclopentilidinos sustituidos o ciclopentanonas 2-sustituidas a partir del esquema que se ha descrito anteriormente (Véase, página 7).

10

#### **2-Isobutil-ciclopentanol (Estructura 89)**

RMN  $^1\text{H}$  (500 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ): 3,75-4,14 ppm (m, 1H), 0,82-1,84 ppm (m, 17H)

#### **2-Pentil-ciclopentanol (Estructura 90)**

RMN  $^1\text{H}$  (500 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ): 3,75-4,14 ppm (m, 1H), 1,35-1,80 ppm (m, 16H), 0,89 ppm (t, 3H,  $J = 6,79$  Hz)

15

#### **Biciclopentil-2-ol (Estructura 91)**

RMN  $^1\text{H}$  (500 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ): 3,75-4,14 ppm (m, 1H), 2,05-2,20 (m, 2H), 1,45-1,75 ppm (m, 15H)

**2-Heptil-ciclopentanol (Estructura 92)**

RMN <sup>1</sup>H (500 MHz, CDCl<sub>3</sub>): 3,75-4,14 ppm (m, 1H), 1,10-1,80 ppm (m, 20H), 0,87 ppm (t, 3H, J-6,79 Hz)

**2-Bencil-ciclopentanol (Estructura 93)**

RMN <sup>1</sup>H (500 MHz, CDCl<sub>3</sub>): 7,00-7,25 ppm (m, 5H), 3,75-4,14 ppm (m, 1H), 2,10-2,60 ppm (m, 3H), 1,50-1,80 ppm (m, 7H)

**2-Octil-ciclopentanol (Estructura 94)**

RMN <sup>1</sup>H (500 MHz, CDCl<sub>3</sub>): 3,75-4,14 ppm (m, 1H), 1,10-1,80 ppm (m, 22H), 0,87 ppm (t, 3H, J-6,79 Hz)

**2-(1-Vinil-hex-5-enil)-ciclopentanol (Estructura 95)**

RMN <sup>1</sup>H (500 MHz, CDCl<sub>3</sub>): 5,60-5,79 ppm (m, 2H), 4,80-5,05 ppm (m, 4H), 3,75-4,14 ppm (m, 1H), 1,35-2,20 ppm (m, 15H)

**2-(5,6-Dimetil-ciclohex-3-enil)-ciclopentanol (Estructura 96)**

RMN <sup>1</sup>H (500 MHz, CDCl<sub>3</sub>): 5,35-5,60 ppm (m, 2H), 3,75-4,14 ppm (m, 1H), 1,45-2,25 ppm (m, 13H), 0,80-0,95 ppm (m, 6H)

**2-(2-Fenil-propil)-ciclopentanol (Estructura 97)**

RMN <sup>1</sup>H (500 MHz, CDCl<sub>3</sub>): 7,05-7,25 ppm (m, 5H), 3,75-4,14 ppm (m, 1H), 2,80-3,10 ppm (m, 1H), 1,50-2,00 ppm (m, 10H), 1,29 ppm (d, 3H, J = 6,75 Hz)

**2-((E)-3,7-Dimetil-octa-2,6-dienil)-ciclopentanol (Estructura 98)**

RMN <sup>1</sup>H (500 MHz, CDCl<sub>3</sub>): 5,15-5,25 ppm (m, 2H), 3,75-4,14 ppm (m, 1H), 1,20-2,25 ppm (m, 23H)

**2-(1,5-Dimetil-1-vinil-hex-4-enil)-ciclopentanol (Estructura 99)**

RMN <sup>1</sup>H (500 MHz, CDCl<sub>3</sub>): 5,70-5,80 ppm (m, 1H), 4,90-5,15 ppm (m, 3H), 3,75-4,14 ppm (m, 1H), 1,25-1,90 ppm (m, 18H), 1,04 ppm (s, 3H)

**2-[2-(2,2,3-Trimetil-ciclopentil)-etil]-ciclopentanol (Estructura 100)**

RMN <sup>1</sup>H (500 MHz, CDCl<sub>3</sub>): 3,75-4,14 ppm (m, 1H), 1,61-1,84 ppm (m, 6H), 1,31-1,59 ppm (m, 7H), 1,02-1,24 ppm (m, 5H), 0,72-0,92 ppm (m, 6H), 0,50 ppm (s, 3H)

**2-(2,2,6-Trimetil-ciclohexilmetil)-ciclopentanol (Estructura 101)**

RMN <sup>1</sup>H (500 MHz, CDCl<sub>3</sub>): 3,77-4,14 ppm (m, 1H), 0,98-2,01 ppm (m, 18H), 0,74-0,98 ppm (m, 9H)

**2-(4-Isopropil-bencil)-ciclopentanol (Estructura 102)**

RMN <sup>1</sup>H (500 MHz, CDCl<sub>3</sub>): 7,09-7,20 ppm (m, 4H), 3,77-4,14 ppm (m, 1H), 2,48-2,88 ppm (m, 3H), 1,65-2,15 ppm (m, 8H), 1,24 ppm (d, 6H, J = 7,03 Hz)

**2-(4-terc-Butil-bencil)-ciclopentanol (Estructura 103)**

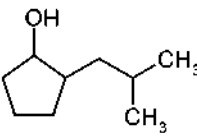
RMN <sup>1</sup>H (500 MHz, CDCl<sub>3</sub>): 7,27-7,37 ppm (m, 2H), 7,12-7,17 ppm (m, 2H), 3,77-4,14 ppm (m, 1H), 2,48-2,86 ppm (m, 2H), 1,20-2,08 ppm (m, 8H), 1,31 ppm (s, 9H)

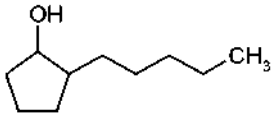
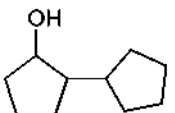
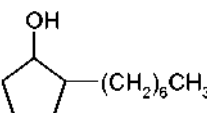
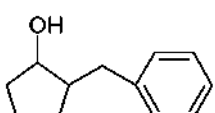
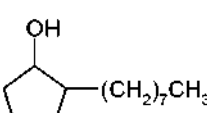
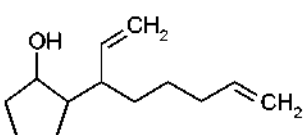
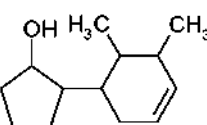
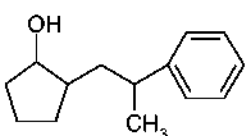
**1-Ciclopropil-2-pentil-ciclopentanol (Estructura 104)**

RMN <sup>1</sup>H (500 MHz, CDCl<sub>3</sub>): 1,08-2,03 ppm (m, 15H), 1,02 ppm (s. a., 1H), 0,77-0,97 ppm (m, 4H), 0,28-0,50 ppm (m, 3H), 0,17-0,27 ppm (m, 1H)

**EJEMPLO VI**

También se evaluaron las propiedades de fragancia de los análogos de ciclopentanol mencionados anteriormente (es decir, las Estructuras 89-104). Los perfiles de olor se informan a continuación:

| Nombre Químico                              | Estructura                                                                          | Perfil de Olor                              |
|---------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------|
| 2-Isobutil-ciclopentanol<br>(Estructura 89) |  | Ninguna nota única de olor, sin complejidad |

| Nombre Químico                                                   | Estructura                                                                          | Perfil de Olor                                               |
|------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------|
| 2-Pentil-ciclopentanol<br>(Estructura 90)                        |    | Nota verde con carácter áspero, sin fuerza ni complejidad    |
| Biciclopentil-2-ol<br>(Estructura 91)                            |    | Notas similares a naftaleno, químicas y sudorosas            |
| 2-Heptil-ciclopentanol<br>(Estructura 92)                        |    | Nota grasa, sin complejidad                                  |
| 2-Bencil-ciclopentanol<br>(Estructura 93)                        |   | Notas de carbinol sucio, ácidas y sudorosas                  |
| 2-Octil-ciclopentanol<br>(Estructura 94)                         |  | Nota verde con carácter de hierba, sin fuerza ni complejidad |
| 2-(1-Vinil-hex-5-enil)-ciclopentanol<br>(Estructura 95)          |  | Notas sucias, de azufre y similares a hongos                 |
| 2-(5,6-Dimetil-ciclohex-3-enil)-ciclopentanol<br>(Estructura 96) |  | Nota química, sin fuerza ni complejidad                      |
| 2-(2-Fenil-propil)-ciclopentanol<br>(Estructura 97)              |  | Notas románticas y ácidas                                    |

| Nombre Químico                                                            | Estructura | Perfil de Olor                            |
|---------------------------------------------------------------------------|------------|-------------------------------------------|
| 2-((E)-3,7-Dimetil-octa-2,6-dienil)-ciclopentanol<br>(Estructura 98)      |            | Nota muy grasa                            |
| 2-(1,5-Dimetil-1-vinil-hex-4-enil)-ciclopentanol<br>(Estructura 99)       |            | Nota muy química                          |
| 2-[2-(2,2,3-Trimetil-ciclopentil)-etil]-ciclopentanol<br>(Estructura 100) |            | Nota ligeramente floral pero muy débil    |
| 2-(2,2,6-Trimetil-ciclohexilmetil)-ciclopentanol<br>(Estructura 101)      |            | Nota química y muy débil                  |
| 2-(4-Isopropil-bencil)-ciclopentanol<br>(Estructura 102)                  |            | Nota ligeramente floral pero muy débil    |
| 2-(4-terc-Butil-bencil)-ciclopentanol<br>(Estructura 103)                 |            | Nota ligeramente amaderada pero muy débil |
| 1-Ciclopropil-2-pentil-ciclopentanol<br>(Estructura 104)                  |            | Nota verde, sin fuerza ni complejidad     |

La evaluación de ciclopentanoles y análogos de ciclopentanol en los ejemplos mencionados anteriormente mostró de manera sorprendente que los ciclopentanoles 1-sustituídos del EJEMPLO IV, en los que la sustitución es un grupo hidrocarburo C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub>, poseen olores deseables, fuertes y complejos, que no se observan en los análogos de ciclopentanol del EJEMPLO VI. En consecuencia, tales propiedades ventajosas de los ciclopentanoles 1-sustituídos son inesperadas y superiores.

## REIVINDICACIONES

1. Un método para mejorar, potenciar o modificar una formulación de fragancia a través de la adición de una cantidad olfativa aceptable de un compuesto seleccionado entre el grupo que consiste en:

1-etil-2-pentil-ciclopentanol;  
1-etil-2-(3-metil-butil)-ciclopentanol;  
1-metil-2-pentil-ciclopentanol; y  
1-metil-2-(3-metil-butil)-ciclopentanol.

2. El método de la reivindicación 1, en el que la cantidad olfativa aceptable es de aproximadamente un 0,005 a aproximadamente un 50 por ciento en peso de la formulación de fragancia.

3. El método de la reivindicación 1, en el que la cantidad olfativa aceptable es de aproximadamente un 0,5 a aproximadamente un 25 por ciento en peso de la formulación de fragancia.

4. El método de la reivindicación 1, en el que la cantidad olfativa aceptable es de aproximadamente un 1 a aproximadamente un 10 por ciento en peso de la formulación de fragancia.

5. Una formulación de fragancia que contiene una cantidad olfativa aceptable de un compuesto seleccionado entre el grupo que consiste en:

1-etil-2-pentil-ciclopentanol;  
1-etil-2-(3-metil-butil)-ciclopentanol;  
1-metil-2-pentil-ciclopentanol; y  
1-metil-2-(3-metil-butil)-ciclopentanol.

6. La formulación de fragancia de la reivindicación 5, en la que la cantidad olfativa aceptable es de aproximadamente un 0,005 a aproximadamente un 50 por ciento en peso de la formulación de fragancia.

7. La formulación de fragancia de la reivindicación 5, en la que la cantidad olfativa aceptable es de aproximadamente un 0,5 a aproximadamente un 25 por ciento en peso de la formulación de fragancia.

8. La formulación de fragancia de la reivindicación 5, en la que la cantidad olfativa aceptable es de aproximadamente un 1 a aproximadamente un 10 por ciento en peso de la formulación de fragancia.

9. La formulación de fragancia de una cualquiera de las reivindicaciones 5 a 8 que comprende adicionalmente un material seleccionado entre el grupo que consiste en un polímero y un no polímero.

10. La formulación de fragancia de la reivindicación 9, en la que el no polímero se selecciona entre el grupo que consiste en un oligómero, un tensioactivo, un emulgente, una grasa, una cera, un fosfolípido, un aceite orgánico, un aceite mineral, una vaselina, un aceite natural, un fijador de perfume, una fibra, un almidón, un azúcar y un material de superficie sólida.

11. La formulación de fragancia de la reivindicación 10, en la que el material de superficie sólida se selecciona entre el grupo que consiste en zeolita y sílice.

12. Un producto de fragancia que contiene una cantidad olfativa aceptable de la formulación de fragancia de una cualquiera de las reivindicaciones 5 a 11.

13. El producto de fragancia de la reivindicación 12, en la que el producto de fragancia se selecciona entre el 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 agente limpiador y un ambientador, un jabón en barra, un jabón líquido, un gel de ducha, un baño de espuma, un cosmético, un producto para el cuidado de la piel, un producto para el cuidado del cabello, un desodorante, un antitranspirante, un producto para el cuidado femenino, un producto para el cuidado del bebé, un producto para el cuidado de la familia, un producto para tejido, un producto para el cuidado del aire, un sistema de suministro de fragancia, una preparación cosmética, un desinfectante, un agente de lavado, un producto para higiene dental y oral, un producto para el cuidado de la salud y nutricional y un producto alimenticio.