

19



OFICINA ESPAÑOLA DE  
PATENTES Y MARCAS

ESPAÑA



11 Número de publicación: **2 643 792**

51 Int. Cl.:

**A61K 8/33** (2006.01)

**A61Q 13/00** (2006.01)

**C07C 47/228** (2006.01)

**C11B 9/00** (2006.01)

12

## TRADUCCIÓN DE PATENTE EUROPEA

T3

86 Fecha de presentación y número de la solicitud internacional: **08.05.2014 PCT/EP2014/059427**

87 Fecha y número de publicación internacional: **13.11.2014 WO14180945**

96 Fecha de presentación y número de la solicitud europea: **08.05.2014 E 14741529 (3)**

97 Fecha y número de publicación de la concesión europea: **12.07.2017 EP 2994093**

54 Título: **3-(4-isobutil-2-metilfenil)propanal como ingrediente de perfume**

30 Prioridad:

**08.05.2013 GB 201308248**

45 Fecha de publicación y mención en BOPI de la traducción de la patente:  
**24.11.2017**

73 Titular/es:

**GIVAUDAN SA (100.0%)  
Chemin de la Parfumerie 5  
1214 Vernier, CH**

72 Inventor/es:

**GOEKE, ANDREAS;  
KRAFT, PHILIP;  
LAUE, HEIKE;  
ZOU, YUE y  
VOIROL, FRANCIS**

74 Agente/Representante:

**DURAN-CORRETJER, S.L.P**

### Observaciones :

**Véase nota informativa (Remarks, Remarques o Bemerkungen) en el folleto original publicado por la Oficina Europea de Patentes**

ES 2 643 792 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

3-(4-isobutil-2-metilfenil)propanal como ingrediente de perfume

La presente invención se refiere a un ingrediente de perfume y a preparaciones de perfume que lo contienen. En particular, la presente invención se refiere a dicho ingrediente de perfume o preparaciones de perfume que muestran características de olor a muguete (lirio del valle). Aún más particularmente, la presente invención se refiere a dichas preparaciones de perfume que no contienen, o sustancialmente no contienen, Lilial®. La presente invención se refiere, además, a procedimientos de fabricación de dicho ingrediente de perfume y preparaciones de perfume, así como a la utilización de dicho ingrediente de perfume y preparaciones de perfume en fragancias finas y productos de consumo, tales como productos para el cuidado personal y productos para el cuidado del hogar. La presente invención también se refiere a dichas fragancias finas y productos de consumo que contienen dicho ingrediente de perfume y preparaciones de perfume.

Los compuestos que tienen características de olor a muguete son muy buscados como ingredientes de perfume. Estos compuestos son ingredientes importantes en bases florales y pueden actuar como armonizadores a través de muchos tipos de creaciones de fragancia. Los compuestos de este tipo se utilizan ampliamente en productos para el cuidado personal y productos para el cuidado de consumo, así como en perfumería fina, para generar olores agradables o para enmascarar olores desagradables.

Un excelente ingrediente de perfume ampliamente valorado por su nota de olor a muguete es Lilial® o 3-(4-terc-butilfenil)-2-metilpropanal (CAS 80-54-6). Este compuesto se ha utilizado ampliamente en perfumería fina, así como en productos para el cuidado personal y productos para el cuidado del hogar. Sin embargo, su utilización es controvertida en vista de los recientes hallazgos de que muestra efectos tóxicos en los órganos reproductores de ratas y perros macho. No se encontraron efectos en estudios con ratones, cobayas y primates, sin embargo, bajo el sistema de clasificación del sistema global armonizado (GHS, de sus siglas en inglés) este compuesto se clasifica como un material CMR2. Para los materiales de categoría CMR 2, es necesario establecer que las cantidades propuestas para su utilización son inofensivas para los consumidores. En vista de la situación reglamentaria de Lilial®, está siendo reemplazado por otros ingredientes de perfume.

El documento WO2010105 873 aborda el problema de la sustitución de Lilial®, resolviendo la solución propuesta en la utilización de mezclas de ingredientes conocidos que se encuentran habitualmente en la paleta de los perfumistas a efectos de recrear características sustancialmente similares a las de Lilial®.

Del mismo modo, el documento WO2009027957 propone una solución que reside en la formulación de combinaciones de ingredientes de perfume conocidos de la paleta de los perfumistas.

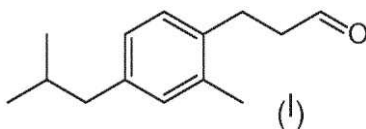
El documento WO2013045301 también propone una solución a la sustitución de Lilial® que reside en la selección de mezclas de ingredientes que incluyen el compuesto Lilyflore® y un determinado compuesto de indanil propanal en combinación con otros ingredientes perfumantes secundarios.

Se dan a conocer análogos estructurales de Lilial® por Winter y Skouroumounis en *Helv. Chim. Acta* 1996, 79, 1095-1109 y en el documento US 5.527.769, algunos de los cuales poseen un olor similar al Lilial® y también tienen una mejor estabilidad frente a la oxidación al ácido propanoico correspondiente.

Además, el documento GB 988.502 da a conocer el aldehído p-isobutildihidrocínámico como sustituto para el aldehído de ciclamen, también para perfumes del tipo de lirio del valle, y el documento GB 1057360 describe varios derivados de aldehído dihidrocínámico con sustituyentes alquilo en posición *orto* o *para* útiles en perfumería.

El presente solicitante ha descubierto un compuesto novedoso que se puede utilizar como un ingrediente de perfume en composiciones de perfumes y fragancias finas y productos de consumo. Más particularmente, la presente invención da a conocer dicho compuesto novedoso que posee características de olor a muguete deseables. Aún más particularmente, el presente solicitante ha descubierto dicho compuesto novedoso que posee características de olor que pueden ser percibidas y reconocidas por los perfumistas como reminiscentes del olor de Lilial® y, de este modo, puede servir como un sustituyente sencillo para Lilial®. Además, el compuesto novedoso puede tener un efecto del perfume similar o incluso mejorado en comparación con Lilial®. Por último, el presente solicitante ha descubierto que el compuesto novedoso no suscita las preocupaciones reglamentarias asociadas con Lilial®.

Por consiguiente, la presente invención da a conocer, en un primer aspecto, un compuesto según la fórmula (I)



El compuesto de fórmula (I) posee características de olor sustancialmente similares y características de efecto como Lilial®. Por lo tanto, y a diferencia de las propuestas de la técnica anterior relacionadas con la sustitución de Lilial® basándose en mezclas de ingredientes conocidos, la presente invención da a conocer un sustituto de Lilial® basado en un único compuesto. Esto tiene la ventaja obvia de que representa una solución rentable para el problema de la sustitución, pero también hace que el proceso creativo de los perfumistas sea más sencillo.

Las cuestiones reglamentarias que rodean a Lilial® nacen del hecho de que se degrada enzimáticamente en ratas y perros a ácido terc-butil benzoico (t-BBA), que se sabe que inhibe la síntesis de la glucosa y la síntesis de ácidos grasos *in vitro* (McCune y otros, Arch Biochem Biophys (1982) 214 (1): 124-133).

Se sabe que el ácido terc-butil benzoico causa efectos testiculares en ratas macho (Hunter y otros, Food Cosmet. Toxicol. 1965, 3: 289-298; Cagen y otros J. Am Coll. Toxicol. 1989, 8 (5): 1027-38).

En cambio, el compuesto de la presente invención no es susceptible de degradación enzimática a su derivado de ácido benzoico. Este fue, de hecho, un resultado muy sorprendente teniendo en cuenta la estrecha similitud estructural con Lilial®. El descubrimiento sorprendente del presente solicitante de que un alcanal sustituido con arilo que contiene un sustituyente metilo en el anillo en una posición *orto* con respecto al grupo que contiene la función aldehído no es susceptible de degradación enzimática a su derivado de ácido benzoico, proporciona una visión hasta ahora no conocida en la técnica y permite que los perfumistas formulen con un compuesto que, a pesar de ser estructuralmente similar a Lilial® (y, por lo tanto, que posee propiedades olfativas muy similares a estos compuestos), sin embargo, no plantea cuestiones reglamentarias similares.

A efectos de estudiar el metabolismo *in vitro* en hepatocitos de rata, se incuban Lilial® y el compuesto de la presente invención en presencia de hepatocitos de rata en suspensión. La disminución de Lilial® y el compuesto de la presente invención, y la formación del derivado de ácido benzoico correspondiente se pueden analizar mediante CG-EM.

Por consiguiente, en otro aspecto de la presente invención, se da a conocer un compuesto de fórmula (I) que no forma, o sustancialmente no forma, ningún derivado de ácido benzoico correspondiente cuando se incubaba con hepatocitos aislados de ratas. Por "sustancialmente ningún derivado de ácido benzoico" se quiere decir que la concentración de dicho derivado está por debajo del límite de detección, es decir, de <1% al 0%. Por lo tanto, el compuesto de fórmula (I) proporciona a los perfumistas un sustituto eminentemente adecuado para el valioso, aunque problemático, Lilial®.

Por consiguiente, la presente invención da a conocer, en otro de sus aspectos, la utilización de un compuesto de fórmula (I) como un ingrediente de perfume.

La presente invención da a conocer, en otro de sus aspectos, la utilización de un compuesto de fórmula (I) en una composición de perfume como un sustituto para alcanales sustituidos con arilo, más particularmente odorantes de propanal sustituido con arilo que no están sustituidos en el anillo de arilo en una posición *orto* con respecto al sustituyente que contiene la función aldehído, en particular, Lilial®.

En otro aspecto de la presente invención, se da a conocer un procedimiento para proporcionar una característica de olor a muguete a una composición de perfume, comprendiendo dicho procedimiento la etapa de incorporar un compuesto de fórmula (I) en dicha composición de perfume.

En aún otro aspecto de la presente invención, se da a conocer una composición de perfume que comprende un compuesto según la fórmula (I).

En aún otro aspecto de la presente invención, se da a conocer una composición de perfume que posee características de olor a muguete que comprende un compuesto según la fórmula (I).

En aún otro aspecto de la presente invención, se da a conocer una composición de perfume que comprende un compuesto, según la fórmula (I), que está libre de odorantes de alcanal sustituidos con arilo, más particularmente odorantes de propanal sustituidos con arilo que están no sustituidos en el anillo de arilo en una posición *orto* con respecto al sustituyente que contiene la función aldehído, en particular, Lilial®.

Una composición de perfume, según la presente invención, puede estar compuesta en su totalidad del compuesto de fórmula (I). Sin embargo, una composición de perfume también puede contener, además del compuesto de fórmula (I), uno o más ingredientes de perfume adicionales.

El compuesto de fórmula (I) puede estar presente en una composición de perfume en cualquier cantidad dependiendo del efecto olfativo particular que un perfumista desea alcanzar. En una realización particular de la presente invención, una composición de perfume de la presente invención puede contener un compuesto de fórmula (I) en una cantidad del 0,1% al 100% en peso de dicha composición.

Si se utilizan uno o más ingredientes de perfume adicionales, se pueden seleccionar entre cualquiera de los ingredientes de perfume conocidos.

- 5 En particular, entre dichos ingredientes de perfume que pueden utilizarse en una composición de perfume, según la presente invención, se incluyen 6-metoxi-2,6-dimetilheptan-1-al (metoximelonal), 5,9-dimetil-4,8-decadienal (geraldehído), beta-metil-3-(1-metiletil)benzenopropanal (florhidral), octahidro-8,8-dimetilnaftaleno-2-carbaldehído (ciclomiral), alfa-metil-1,3-benzodioxol-5-propionaldehído (helional), 5-metil-2-(1-metilbutil)-5-propil-1,3-dioxano (Troenan), 3-(o-etilfenil)-2,2-dimetilpropionaldehído (floralozone), farnesol, 3,7,11-trimetildodeca-1,6,10-trien-3-ol, opcionalmente como una mezcla de isómeros (nerolidol), 2-metil-4-fenilbutan-2-ol (dimetilfeniletilcarbinol), cis-4-(isopropil)ciclohexanometanol (mayol), 1-(1-hidroxietil)-4-(1-metiletil)ciclohexano (opcionalmente como una mezcla de los diastereoisómeros) (mugetanol), (4-metil-3-pentenil)ciclohexenocarbaldehído (citrusal), salicilato de ciclohexilo, salicilato de hexilo, salicilato de bencilo, salicilato de amilo, 3-(p-(2-metilpropil)fenil)-2-metilpropionaldehído (silvial), 3-p-cumenil-2-metilpropionaldehído (ciclamenaldehído), mezclas de: cis-tetrahidro-2-isobutil-4-metilpiran-4-ol; trans-tetrahidro-2-isobutil-4-metilpiran-4-ol; (florol), citrato de trietil y dipropilenglicol.

- Entre dichos ingredientes de perfume se pueden incluir adicionalmente salicilato de amilo (2050-08-0); Aurantol® (89-43-0); salicilato de bencilo (118-58-1); salicilato de cis-3-hexenilo (65405-77-8); citronelil oxiacetaldehído (7492-67-3); cyclemax (7775-00-0); salicilato de ciclohexilo (25485-88-5); Cyclomyral® (68738-94-3); citronelol (106-22-9); geraniol (106-24-1); ciclopentol Hc 937 165 (84560-00-9); cimal (103-95-7); dupical (30168-23-1); etil linalool (10339-55-6); floral super (71077-31-1); Florhidral® (125109 -85-5); Florol® (63500-71-0); girane (24237-00-1); salicilato de hexilo (6259-76-3); Helional (R) (1205-17-0); hidroxicitronelal (107-75-5); linalol (78-70-6); Liral® (31906-04-4); Majantol® (103694-68-4); Mayol® (13828-37-0); melafleur (68991-97-9); melonal (106-72-9); mugetanol (63767-86-2); muguesia (56836-93-2); alcohol de muguete (13351-61-6); verdantol (91-51-0); Peonile® (10461-98-0); Phenoxanol® (55066-48-3); Rossitol® (215231-33-7); Silvial® (6658-48-6); suzural (6658-48-6); Muguol® (18479-57-7); tetrahidro linalol (78-69-3); acalea (84697-09-6); dihidro iso jasmonato (37172-53-5); aldehído hexilcinámico (101-86-0); Hedione® (24851-98-7); acetoína (513-86-0); adoxal (141-13-9); Aldolone® (207228-93-1); AMBROCENIDE® (211299-54-6); Ambroxan (3738-00-9); Azurone® (362467-67-2); Bacdanol® (28219-61-6); Calone 1951® (28940-11-6); Cetalex® (3738-00-9); alcohol cinámico (104-54-1); citral (5392-40-5); ciclabute (67634-20-2); Cyclacet (R) (5413-60-5); Cyclaprop® (17511-60-3); ciclohexadecanolida (109-29-5); ciclohexadecanona (3100-36-5); ciclopentadecanona (507-72-7); delta damascona (57378-68-4); Ebanol® (67801-20-1); elintaal forte (40910-49-4); etil vanilina (121-32-4); brasilato de etileno (105-95-3); exaltanona 942008 (14595-54-1); exaltolide total 935985 (106-02-5); floralozone (67634-14-4); fructalato (72903-27-6); gamma decalactona (706-14-9); Habanolide (111879-80-2); Helvetolide® (141773-73-1); Hexametilindanopirano (1222-05-5); Hydroxyambran® (118562-73-5); Iso E Super® (54464-57-2); isohexenil ciclohexenil carboxaldehído (37677-14-8); jasmal (18871-14-2); Javanol® (198404-98-7); aldehído láurico (112-54-9); mefranal (55066-49-4); muscenona (63314-79-4); Tonalid® (1506-02-1); Nectaryl® (95962-14-4); norlim banol (70788-30-6); parahidroxifenil butanona (5471-51-2); pino acetaldehído (33885-51-7); Romandolide® (236391-76-7); Sanjinol (28219-61-6); Silvanone® Supra (109-29-5/507-72-7); Terpeneol (8000-41-7); vanilina (121-33-5) y Velvione® (37609-25-9), en los que las cifras entre paréntesis son números CAS.

- Una composición de perfume no tiene por qué limitarse a los ingredientes de perfume listados anteriormente. Se pueden utilizar otros ingredientes de perfume utilizados habitualmente en perfumería, por ejemplo, cualquiera de los ingredientes descritos en "Compuestos químicos de perfumes y aromas" ("Perfume and Flavor Chemicals"). S. Arctander, Allured Publishing Corporation, 1994, IL, EE.UU., que se incorpora en el presente documento por referencia, incluyendo aceites esenciales, extractos de plantas, absolutos, resinoides, odorantes obtenidos a partir de productos naturales y similares.

- Los ingredientes de perfume contenidos en dichas composiciones de perfume se describen anteriormente, pero, por supuesto, la mezcla del perfume puede no limitarse a los ingredientes indicados. En particular, las composiciones de perfume pueden comprender adyuvantes que se utilizan habitualmente en composiciones de perfume. El término "adyuvantes" se refiere a ingredientes que pueden utilizarse en una composición de perfume por razones no relacionadas específicamente con el efecto olfativo de dicha composición. Por ejemplo, un adyuvante puede ser un ingrediente que actúa como un ayudante para el procesamiento de un ingrediente o ingredientes de perfume, o una composición que contiene dicho ingrediente o ingredientes, o puede mejorar la manipulación o el almacenamiento de un ingrediente de perfume o composición que lo contiene. También podría ser un ingrediente que proporciona beneficios adicionales, tales como proporcionar color o textura. También podría ser un ingrediente que proporciona resistencia a la luz o estabilidad química a uno o más ingredientes contenidos en un ingrediente de perfume o composición que lo contiene. Una descripción detallada de la naturaleza y el tipo de adyuvantes utilizados habitualmente en composiciones de perfume que lo contienen no puede ser exhaustivo, pero debe mencionarse que dichos ingredientes son bien conocidos para un experto en la técnica. Entre los ejemplos de adyuvantes se incluyen disolventes y codisolventes; surfactantes y emulsionantes; modificadores de la viscosidad y la reología; agentes espesantes y gelificantes; materiales conservantes; pigmentos, colorantes y otras materias que proporcionan color; extensores, agentes de relleno y agentes de refuerzo; estabilizadores contra los efectos perjudiciales del calor y la luz, agentes de carga, acidulantes, agentes tampón y antioxidantes.

Además, uno cualquiera o más de los ingredientes de perfume o adyuvantes utilizados en la presente invención podría formularse en un vehículo de suministro si se desea proporcionar un efecto deseado. Entre los vehículos de suministro se pueden incluir encapsulados. Alternativamente, un vehículo de suministro puede estar en forma de un soporte sólido, por ejemplo, un material de soporte polimérico sobre el que uno o más ingredientes de perfume o adyuvantes pueden estar química o físicamente unidos. Aún más, uno o más ingredientes de perfume o adyuvantes pueden estar disueltos o dispersados en un material de matriz que sirve para controlar la velocidad a la que dicho ingrediente o ingredientes emanan del mismo. En aún una realización alternativa, uno o más ingredientes o adyuvantes pueden estar soportados sobre un sustrato poroso, tal como una ciclodextrina o una zeolita u otro material inorgánico. En una realización adicional, uno o más ingredientes de perfume se pueden disponer en forma de un properfume, que reaccionará en un ambiente adecuado para liberar el ingrediente de perfume de una manera controlada.

En vista de lo anterior, se entenderá que una composición de perfume puede estar, como mínimo, parcialmente en forma sólida, en forma de gel, en forma de espuma y/o en forma líquida. Si está presente en forma sólida, entonces puede tomar la forma de gránulos, polvos o comprimidos.

El compuesto de fórmula (I), o composiciones de perfume se descritas en el presente documento, se pueden utilizar para añadir un olor característico, en particular, un olor de muguete, a todo tipo de composiciones para el cuidado personal y el cuidado del hogar.

Según otro aspecto de la presente invención, se da a conocer un procedimiento para proporcionar características de olor a muguete a una composición que comprende la etapa de añadir a dicha composición un compuesto, según la fórmula (I), o una composición de perfume que contiene dicho compuesto.

Un compuesto de fórmula (I), como un ingrediente de perfume, o cuando se utiliza en composiciones de perfume, puede generar características de olor a muguete particularmente sustantivas y de larga duración.

El compuesto de fórmula (I) es un ingrediente de perfume particularmente impactante. El impacto que ejerce un ingrediente de perfume está relacionado con su índice de olor. El índice de olor es la proporción de presión de vapor con respecto a la concentración umbral de detección.

El compuesto de fórmula (I) tiene un índice de olor extremadamente elevado, específicamente 559,071. Los ingredientes de perfume relacionados no son impactantes en comparación. Por ejemplo, Lilial® tiene un índice de olor de solamente 32,978 y aldehído de ciclamen tiene un índice de olor de solamente 21,986.

El índice de olor destacadamente elevado del compuesto de fórmula (I) es significativo en que existe una necesidad de sostenibilidad y el suministro de ingredientes de perfume impactantes permite a los perfumistas crear acordes de fragancia deseables con concentraciones más bajas de ingredientes de perfume.

Entre los productos de consumo, tales como composiciones para el cuidado personal y del hogar, se incluyen, pero sin limitarse a éstos, un producto de tratamiento de tejidos, un adyuvante para el planchado, un paño de limpieza, un detergente de lavandería, un producto de limpieza, en particular, para superficies duras y/o blandas, un limpiador doméstico, un producto para el cuidado, un producto para el cuidado de lavado, un producto para el cuidado de la ropa, un producto para proporcionar aromas a habitaciones y ambientador de aire, un acondicionador, un colorante, un acondicionador de tejidos, un sustrato acondicionado, un producto farmacéutico, un producto de protección de cultivos, un pulidor, un alimento, un producto cosmético, un fertilizante, un material de construcción, un adhesivo, un blanqueador, un descalcificador, un producto para el cuidado del automóvil, un producto para el cuidado del suelo, un producto para el cuidado de la cocina, un producto para el cuidado del cuero o un producto para el cuidado de los muebles, un estropajo, un desinfectante, un producto que proporciona aromas, un eliminador de moho y/o un precursor de los productos mencionados anteriormente.

El experto es plenamente consciente de la aplicabilidad de los ingredientes de perfume y composiciones a composiciones para el cuidado personal y para el cuidado del hogar y no se justifica una descripción muy detallada de dichas composiciones en el presente documento. Sin embargo, entre las composiciones específicas que se pueden mencionar se incluyen composiciones de limpieza; composiciones para el cuidado del automóvil; composiciones cosméticas; composiciones para el tratamiento de tejidos; y composiciones de ambientadores y del cuidado del aire.

Entre los productos de limpieza se incluyen:

limpiadores de aseos o limpiadores de lavabos, en otras palabras, productos para la limpieza de inodoros y urinarios en lavabos, suministrándose estos productos, de manera preferente, en forma de polvos, bloques, comprimidos o líquidos, de manera preferente, geles. Además, otros ingredientes habituales, tales como surfactantes, en general, incluyen ácidos orgánicos por ejemplo, ácido cítrico y/o ácido láctico o hidrogenosulfato de sodio, ácido amidosulfúrico o ácido fosfórico para eliminar incrustaciones de cal o depósitos de orina; productos para la limpieza de tuberías o limpiadores para drenaje. Habitualmente, son productos fuertemente alcalinos que sirven, en general, para eliminar obstrucciones en tuberías, que comprenden materiales orgánicos,

tales como pelo, grasa, residuos de alimentos, depósitos de jabón y similares. Las adiciones de polvo de Al o polvo de Zn pueden servir para la formación de gas  $H_2$  con un efecto de efervescencia. Los posibles ingredientes son habitualmente álcalis, sales alcalinas, agentes oxidantes y sales neutras. Entre las formas de suministro en forma de polvo, de manera preferente, también se incluyen nitrato de sodio y cloruro de sodio. Entre los productos para la limpieza de tuberías en forma líquida también se puede incluir, de manera preferente, hipoclorito. También existen

limpiadores para drenaje a base de enzimas. Los productos ácidos son igualmente posibles; limpiadores universales o multiusos o de uso general. Estos son limpiadores que se pueden utilizar de forma universal para todas las superficies duras en el hogar y en el comercio que puedan ser limpiadas en forma mojada o húmeda. En términos generales, son productos neutros o ligeramente alcalinos o ligeramente ácidos, en especial

productos líquidos. Los limpiadores multiusos o de uso general contienen, en general, surfactantes, mejoradores de la detergencia ("builders"), disolventes e hidrótrofos, colorantes, conservantes y similares;

limpiadores multiusos con propiedades especiales de desinfectante. Incluyen, además, ingredientes antimicrobianos activos (por ejemplo, aldehídos, alcoholes, compuestos de amonio cuaternario, surfactantes anfóteros, triclosan); limpiadores sanitarios. Éstos son productos para la limpieza en el baño y aseo. Los limpiadores sanitarios alcalinos se utilizan, de manera preferente, para la eliminación de suciedad grasa, mientras que los limpiadores sanitarios ácidos se utilizan, en particular, para la eliminación de incrustaciones de cal. Los limpiadores sanitarios también tienen ventajosamente una acción desinfectante considerable, en particular, los limpiadores sanitarios fuertemente alcalinos que contienen cloro;

limpiadores de horno o limpiadores de parrillas que pueden suministrarse en forma de geles o aerosoles de espuma.

En general, sirven para la eliminación de residuos de alimentos quemados o carbonizados. Los limpiadores de horno se proporcionan, de manera preferente, como una formulación fuertemente alcalina utilizando, por ejemplo, hidróxido de sodio, metasilicato de sodio, 2-aminoetanol. Además, contienen, en general, surfactantes aniónicos y/o surfactantes no iónicos, disolventes solubles en agua y, en algunos casos, espesantes, tales como policarboxilatos y carboximetilcelulosa;

pulidores de metales. Son limpiadores para tipos particulares de metal, tales como acero inoxidable o plata. Los limpiadores de acero inoxidable contienen, de manera preferente, además de los ácidos (de manera preferente, hasta el 3% en peso, por ejemplo, ácido cítrico, ácido láctico), surfactantes (en particular, hasta el 5% en peso, de manera preferente, surfactantes no iónicos y/o aniónicos) y agua, también disolventes (de manera preferente, hasta el 15% en peso) para eliminar la suciedad grasa y también compuestos adicionales, tales como espesantes y conservantes. Se incluyen estructuras de pulido muy fino, adicionalmente, en productos para superficies de acero inoxidable, de manera preferente, brillantes. Los pulidores de plata, a su vez, se pueden disponer en una formulación ácida. En particular, para eliminar los depósitos de negro de sulfuro de plata que contienen, de manera preferente, agentes complejantes (por ejemplo, tiourea, tiosulfato de sodio). Las formas de suministro habituales son paños de pulido, baños de inmersión, pastas y líquidos. Las decoloraciones oscuras (capas de óxido) se eliminan la utilización de limpiadores de cobre y limpiadores de metales no ferrosos (por ejemplo, para latón y bronce). En general, tienen una formulación débilmente alcalina (de manera preferente, con amoniaco) y, en general, contienen agentes de pulido y también, de manera preferente, jabones de amonio y/o agentes complejantes;

limpiadores de vidrio y limpiadores de ventanas. Estos productos sirven, de manera preferente, para eliminar la suciedad, en especial la suciedad grasienta, de superficies de vidrio. De manera preferente, contienen compuestos, tales como surfactantes aniónicos y/o surfactantes no iónicos (en particular, hasta el 5% en peso), amoniaco y/o etanolamina (en particular, hasta el 1% en peso), etanol y/o 2-propanol, glicol éteres (en particular, 10-30% en peso), agua, conservantes, colorantes, agentes antivaho y similares; y

productos de limpieza para usos especiales, siendo ejemplos los de las placas vitrocerámicas, y también limpiadores de alfombras y quitamanchas.

Entre los productos para el cuidado de automóviles se incluyen:

conservantes de pinturas, pulidores de pinturas, limpiadores de pinturas, conservantes de lavado, champús para el lavado de automóviles, productos para el lavado y encerado de automóviles, pulidores para metales de la tapicería, películas protectoras para metales de la tapicería, limpiadores de plásticos, eliminadores de alquitrán, limpiadores de vidrios del automóvil, limpiadores del motor y similares.

Entre los productos cosméticos se incluyen:

(a) productos cosméticos para el cuidado de la piel, en especial productos de baño, productos para el lavado y la limpieza de la piel, productos para el cuidado de la piel, maquillaje de ojos, productos para el cuidado de los labios, productos para el cuidado de las uñas, productos para el cuidado íntimo, productos para el cuidado del pie;

(b) productos cosméticos con efectos específicos, en especial filtros solares, productos de bronceado, productos de despigmentación, desodorantes, antitranspirantes, depilatorios, productos para el afeitado, perfumes;

(c) productos cosméticos para el cuidado dental, en especial productos para el cuidado dental y oral, productos para el cuidado dental, limpiadores para prótesis dentales, adhesivos para prótesis dentales; y

(d) productos cosméticos para el cuidado del cabello, en especial champús para el cabello, productos para el cuidado del cabello, productos de fijación del cabello, productos para el moldeado del cabello y productos de coloración del cabello.

Entre los productos de tratamiento de tejidos se incluyen:

detergentes o acondicionadores de tejidos, por ejemplo, en forma líquida o sólida.

Entre los ambientadores y productos que proporcionan aromas en habitaciones se incluyen:

productos que contienen, de manera preferente, compuestos volátiles y habitualmente de olor agradable que pueden ventajosamente incluso en cantidades muy pequeñas enmascarar los olores desagradables. Los ambientadores para áreas de convivencia contienen, en particular, aceites esenciales naturales y sintéticos, tales como aceites de agujas de pino, aceite de cítricos, aceite de eucalipto, aceite de lavanda y similares, en cantidades, por ejemplo, de hasta el 50% en peso. Como aerosoles, tienden a contener cantidades más pequeñas de dichos aceites esenciales, a modo de ejemplo, menos del 5% o menos del 2% en peso, pero, además, incluyen compuestos, tales como acetaldehído (en particular, <0,5% en peso), alcohol isopropílico (en particular, <5% en peso), aceite mineral (en particular, <5% en peso) y propelentes. Entre otras formas de presentación se incluyen palos y bloques. Se producen habitualmente utilizando un concentrado de gel que comprende aceites esenciales. También es posible añadir formaldehído (para la conservación) y clorofila (de manera preferente, <5% en peso), y también ingredientes adicionales. Los ambientadores de aire, sin embargo, no están restringidos a los espacios de convivencia, sino que también pueden estar destinados a automóviles, armarios, lavavajillas, frigoríficos o zapatos, e incluso su utilización en aspiradoras es una posibilidad. En el hogar (por ejemplo, en los armarios), por ejemplo, además de los mejoradores del olor, también se utilizan desinfectantes que contienen, de manera preferente, compuestos, tales como fosfato de calcio, talco, estearina y aceites esenciales, tomando estos productos la forma, por ejemplo, de bolsitas.

Las composiciones de productos de consumo a los que se hace referencia anteriormente en este documento, en particular, aquellas para utilizar en aplicaciones de lavado o de limpieza pueden contener una o más de las siguientes sustancias:

sustancias mejoradoras surfactantes, enzimas, agentes de blanqueo, tales como, de manera preferente, compuestos orgánicos y/o inorgánicos de peroxígeno, activadores de peroxígeno, disolventes orgánicos miscibles con agua, agentes secuestrantes, electrolitos, reguladores del pH, espesantes y adyuvantes adicionales, tales como sustancias activas de liberación de suciedad, abrillantadores ópticos, inhibidores de agrisado ("graying"), inhibidores de la transferencia de color, reguladores de la espuma y colorantes.

Entre los surfactantes se incluyen surfactantes aniónicos, surfactantes no iónicos y mezclas de los mismos, pero también son apropiados los surfactantes catiónicos. Los surfactantes no iónicos adecuados son, en particular, productos de etoxilación y/o propoxilación de los glucósidos de alquilo y/o de alcoholes lineales o ramificados que tienen cada uno de 12 a 18 átomos de carbono en la parte alquilo y de 3 a 20, de manera preferente de 4 a 10, grupos de alquil éter. También son utilizables los correspondientes productos de etoxilación y/o propoxilación de N-alquilaminas, dioles vecinales, ésteres de ácidos grasos y amidas de ácidos grasos que corresponden, en términos de la parte de alquilo, a los derivados de alcohol de cadena larga mencionados anteriormente, y de alquilfenoles que tienen de 5 a 12 átomos de carbono en el resto alquilo.

Entre los surfactantes aniónicos adecuados se incluyen jabones y aquellos que contienen grupos sulfato o sulfonato que tienen, de manera preferente, iones alcalinos como cationes. Entre los jabones se incluyen sales alcalinas de los ácidos grasos saturados o insaturados que tienen de 12 a 18 átomos de carbono. Dichos ácidos grasos también se pueden utilizar en forma neutralizada de manera incompleta. Se incluyen entre los agentes surfactantes utilizables del tipo sulfato, las sales de los semiésteres de ácidos sulfúrico de alcoholes grasos que tienen de 12 a 18 átomos de carbono, y los productos sulfatados de los surfactantes no iónicos mencionados anteriormente que tienen un grado de etoxilación bajo. Se incluyen entre los agentes surfactantes utilizables del tipo sulfonato, sulfonatos de alquilbenceno lineales que tienen de 9 a 14 átomos de carbono en la parte de alquilo, alcanosulfonatos que tienen de 12 a 18 átomos de carbono y olefinsulfonatos que tienen de 12 a 18 átomos de carbono que se producen después de la reacción de las correspondientes monoolefinas con trióxido de azufre, así como ésteres de ácidos alfa-sulfograsos que se producen después de la sulfonación de ésteres metílicos o etílicos de ácidos grasos.

Entre los surfactantes catiónicos se incluyen esterquats y/o compuestos de amonio cuaternario (QAC). Los QAC se pueden producir mediante la reacción de aminas terciarias con agentes alquilantes, tales como cloruro de metilo, cloruro de bencilo, sulfato de dimetilo, bromuro de dodecilo, pero también óxido de etileno. La alquilación de aminas terciarias que tienen un resto alquilo largo y dos grupos metilo se produce de forma particularmente sencilla, y la cuaternización de aminas terciarias que tienen dos restos largos y un grupo metilo también puede llevarse a cabo utilizando cloruro de metilo en condiciones suaves. Las aminas que poseen tres restos alquilo largos o restos alquilo sustituidos con hidroxilo tienen baja reactividad, y son cuaternizados, por ejemplo, utilizando sulfato de dimetilo. Los QAC adecuados son, por ejemplo, cloruro de benzalconio (cloruro de N-alquil-N,N-dimetilbencilamonio), benzalkon B (cloruro de m,p-diclorobencildimetil-C12-alquilamonio), cloruro de benzoxonio (cloruro de bencildodecylbis(2-hidroxietil)amonio), bromuro de cetrimonio (bromuro de N-hexadecil-N,N-trimetilamonio), cloruro de bencetonio (cloruro de N,N-dimetil-N-[2-[2-[p-(1,1,3,3-tetrametilbutil)fenoxi]etoxi]etil]bencilamonio), cloruros de dialquildimetilamonio, tales como cloruro de di-n-decildimetilamonio, bromuro de didecildimetilamonio, cloruro de dioctildimetilamonio, cloruro de 1-cetilpiridinio y yoduro de tiazolina, así como mezclas de los mismos. Los QAC preferentes son los cloruros de benzalconio que tienen restos alquilo de C8 a C22, en particular, de cloruro de alquilbencildimetilamonio C12 a C14.

Entre los esterquats se incluyen los metosulfatos metilhidroxialquildialcoiloxialquilamonio disponibles en el mercado comercializados por la empresa Stepan bajo la marca comercial Stepantex® o los productos de Cognis Deutschland

GmbH conocidos bajo el nombre comercial Dehyquat® o los productos Rewoquat® de Goldschmidt-Witco.

Los surfactantes se pueden utilizar en cantidades del 5% en peso al 50% en peso en un producto de consumo de la presente invención.

Entre los mejoradores se incluyen mejoradores orgánicos y/o inorgánicos, solubles en agua y/o insolubles en agua. En particular, incluyen sustancias mejoradoras orgánicas solubles en agua que son ácidos policarboxílicos, más particularmente, ácido cítrico y ácidos de azúcar, ácidos aminopolicarboxílicos monoméricos y poliméricos, en particular, ácido metilglicinadiacético, ácido nitrilotriacético y ácido etilendiaminotetraacético, así como ácido poliaspártico, ácidos polifosfónicos, en particular, aminotris(ácido metilfosfónico), etilendiaminotetrakis(ácido metilfosfónico) y ácido 1-hidroxietano-1,1-difosfónico, hidroxicompuestos poliméricos, tales como dextrina, así como ácidos (poli)carboxílicos poliméricos, ácidos acrílicos poliméricos, ácidos metacrílicos, ácidos maleicos y polímeros mixtos de los mismos, que también pueden contener pequeñas proporciones de sustancias polimerizables que no tienen ninguna función de ácido carboxílico. El peso molecular relativo de homopolímeros de ácidos carboxílicos insaturados se encuentra, en general, entre 5.000 y 200.000, la de los copolímeros entre 2.000 y 200.000, basándose en cada caso en ácido libre. Los compuestos adecuados de esta clase son copolímeros de ácido acrílico o ácido metacrílico con éteres vinílicos, tales como éteres de vinilmetilo, ésteres de vinilo, etileno, propileno y estireno, en los que la proporción de ácido es igual, como mínimo, al 50% en peso. También es posible utilizar, como sustancias mejoradoras orgánicas solubles en agua, terpolímeros que contienen dos ácidos insaturados y/o sales de los mismos como monómeros y, como tercer monómero, alcohol vinílico y/o un derivado de alcohol vinílico o un hidrato de carbono. El primer monómero ácido o sal del mismo puede derivar de un ácido carboxílico C3 a C8 etilénicamente monoinsaturado. El segundo monómero ácido o sal del mismo puede ser un derivado de un ácido dicarboxílico C4 a C8, por ejemplo ácido maleico. La tercera unidad monomérica está constituida por alcohol vinílico y/o un alcohol vinílico esterificado. Los polímeros pueden contener del 60% en peso al 95% en peso, en particular, del 70% en peso al 90% en peso, de ácido (met)acrílico o (met)acrilato, así como del 5% en peso al 40% en peso de alcohol vinílico y/o acetato de vinilo. Los polímeros particulares son aquellos en los que la proporción en peso de ácido (met)acrílico, respectivamente, (met)acrilato con respecto a ácido maleico o maleato se encuentra entre 1:1 y 4:1. Tanto las cantidades como las proporciones en peso se basan en los ácidos. El segundo monómero ácido o sal del mismo también puede ser un derivado de un ácido alilsulfónico que está sustituido en la posición 2 con un radical alquilo, por ejemplo, un radical alquilo C1 a C4, o con un radical aromático que puede derivar de benceno o derivados de benceno. Los terpolímeros pueden contener del 40% en peso al 60% en peso, en particular, del 45% en peso al 55% en peso, de ácido (met)acrílico o (met)acrilato, en particular, de manera preferente, de ácido acrílico o acrilato, del 10% en peso al 30% en peso, de manera preferente, del 15% en peso al 25% en peso, de ácido metalilsulfónico o metalilsulfonato y, como tercer monómero, del 15% en peso al 40% en peso, de manera preferente, del 20% en peso al 40% en peso, de un hidrato de carbono. Este hidrato de carbono puede ser, por ejemplo, un monosacárido, disacárido, oligosacárido o polisacárido, por ejemplo, sacarosa. Los terpolímeros, en general, tienen un peso molecular relativo entre 1.000 y 200.000. Entre copolímeros adicionales se incluyen los que comprenden, como monómeros, acroleína y ácido acrílico/sales de ácido acrílico o acetato de vinilo. En especial, para la fabricación de detergentes líquidos, las sustancias mejoradoras orgánicas se pueden utilizar en forma de soluciones acuosas, por ejemplo, soluciones acuosas del 30 al 50 por ciento en peso. Todos los ácidos mencionados anteriormente se pueden utilizar en forma de sus sales solubles en agua, en particular, sus sales alcalinas.

Las sustancias mejoradoras orgánicas se pueden utilizar en cantidades de hasta el 40% en peso.

Entre los materiales mejoradores inorgánicos solubles en agua se incluyen los silicatos y polifosfatos alcalinos, por ejemplo, trifosfato de sodio. Los aluminosilicatos alcalinos cristalinos o amorfos, por ejemplo, aluminosilicatos de sodio cristalinos, también se pueden utilizar como materiales mejoradores inorgánicos dispersables en agua, insolubles en agua, en cantidades de hasta el 50% en peso, por ejemplo. Los aluminosilicatos comprenden habitualmente partículas que tienen un tamaño de partícula de menos de 30 µm.

Los silicatos alcalinos cristalinos también se pueden utilizar solos o con silicatos amorfos. Los silicatos alcalinos que pueden utilizarse en productos de consumo de la presente invención como mejoradores de la detergencia pueden tener una proporción molar de óxido alcalino con respecto a SiO<sub>2</sub> por debajo de 0,95, en particular, de 1:1,1 a 1:12, y pueden estar presentes en forma amorfa o cristalina. Los silicatos alcalinos pueden ser silicatos de sodio, en particular, los silicatos de sodio amorfos, con una proporción molar de Na<sub>2</sub>O: SiO<sub>2</sub> de 1:2 a 1:2,8.

Las sustancias mejoradoras pueden estar contenidas en las composiciones de productos de consumo, según la presente invención, a niveles de hasta el 60% en peso.

Entre los compuestos de peroxígeno se incluyen perácidos orgánicos o sales de perácidos de ácidos orgánicos, tales como ácido ftalimidopercaprílico, ácido perbenzoico, o sales de ácido diperdodecandioico, peróxido de hidrógeno, y sales inorgánicas que liberan peróxido de hidrógeno bajo condiciones de aplicación, tales como perborato, percarbonato y/o persilicato. Si se utilizan compuestos de peroxígeno sólidos, se pueden utilizar en forma de polvos o granulados, que, en principio, también se puede encapsular de una manera conocida.

Los compuestos de peróxígeno se pueden utilizar en cantidades de hasta el 50% en peso. Puede ser útil la adición de pequeñas cantidades de estabilizadores de agentes de blanqueo conocidos, por ejemplo, fosfonatos, boratos, respectivamente metaboratos, y metasilicatos, así como sales de magnesio, tales como sulfato de magnesio.

- 5 Los compuestos que, bajo condiciones de perhidrólisis, producen ácidos peroxocarboxílicos alifáticos que tienen, de manera preferente, de 1 a 10 átomos de carbono, en particular, de 2 a 4 átomos de carbono, y/o ácido perbenzoico (opcionalmente sustituido), se pueden utilizar como activadores de blanqueo. Son adecuadas las sustancias que contienen grupos O-acilo y/o N-acilo que tienen el número de átomos de carbono mencionado anteriormente y/o grupos benzoílo opcionalmente sustituidos. Se pueden utilizar alquilendiaminas aciladas de múltiples formas, en particular, tetraacetiletilendiamina (TAED), derivados de triazina acilados, en particular, 1,5-diacetil-2,4-dioxohexahidro-1,3,5-triazina (DADHT), glicolurilos acilados, en particular, tetraacetilglicolurilo (TAGU), N-acilimidazidas, en particular, N-nonanoil succinimida (NOSI), fenolsulfonatos acilados, en particular, oxibencenosulfonato de n-nonanoílo o isononanoílo (n-NOBS o iso-NOBS), anhídridos de ácidos carboxílicos, en particular, anhídrido de ácido ftálico, alcoholes polivalentes acilados, en particular, triacetina, diacetato de etilenglicol, 2,5-diacetoxi-2,5-dihidrofurano y ésteres de enol, así como sorbitol y manitol acetilados, respectivamente, mezclas de los mismos (SORMAN), derivados de azúcar acilados, en particular, pentaacetilglucosa (PAG), pentaacetilfructosa, tetraacetilxilosa y octaacetilactosa, así como glutamina y gluconolactona acetiladas, opcionalmente N-alquiladas, y/o lactamas N-aciladas, por ejemplo N-benzoilcaprolactama. Asimismo, también se pueden utilizar acetatos de acilo y lactamas de acilo hidrofilicamente sustituidos. También se pueden utilizar combinaciones de activadores de blanqueo convencionales. Dichos activadores de blanqueo pueden estar contenidos en el intervalo de cantidades habituales, de manera preferente, en cantidades del 1% en peso al 10% en peso, en particular, del 2% en peso al 8% en peso, basándose en la totalidad del agente.
- 25 Además de los activadores de blanqueo convencionales mencionados anteriormente, o en lugar de los mismos, las sulfonimidinas y/o sales de metales de transición o complejos de metales de transición que intensifican el blanqueo también pueden estar contenidos como catalizadores de blanqueo. Entre los compuestos de metales de transición adecuados se incluyen, en particular, complejos de manganeso, hierro, cobalto, rutenio o molibdeno, y compuestos análogos de nitrógeno de los mismos, complejos de carbonilo de manganeso, hierro, cobalto, rutenio o molibdeno, complejos de manganeso, hierro, cobalto, rutenio, molibdeno, titanio, vanadio y cobre que tienen ligandos trípode que contienen nitrógeno, complejos de amina de cobalto, hierro, cobre y rutenio. Asimismo, también se pueden utilizar combinaciones de activadores de blanqueo y catalizadores de blanqueo de metales de transición. Los complejos de metales de transición que intensifican el blanqueo, en particular, que tienen los átomos centrales Mn, Fe, Co, Cu, Mo, V, Ti y/o Ru, se pueden utilizar en cantidades convencionales, tales como de hasta el 1% en peso basándose en el peso de la composición del producto de consumo.
- 30
- 35

Las enzimas adecuadas que se pueden utilizar en las composiciones de productos de consumo son las de la clase de las proteasas, cutinasas, amilasas, pululanases, hemicelulasas, celulasas, lipasas, oxidasas y peroxidasas, así como mezclas de las mismas. También son adecuadas sustancias enzimáticamente activas recuperadas de hongos o bacterias, tales como *Bacillus subtilis*, *Bacillus licheniformis*, *Streptomyces griseus*, *Humicola lanuginosa*, *Humicola insolens*, *Pseudomonas pseudoalcaligenes* o *Pseudomonas cepacia*. Las enzimas que se utilizan como aplicables pueden adsorberse sobre sustancias portadoras y/o embebidas en sustancias encapsulantes a efectos de protegerlas de la inactivación prematura. Pueden estar contenidas en productos de lavado, según la presente invención, en cantidades habitualmente por debajo del 5% en peso.

40

45

Entre los abrillantadores ópticos se incluyen derivados de ácido diaminoestilbenodisulfónico o sales de metales alcalinos de los mismos. Son adecuadas, por ejemplo, sales del ácido 4,4'-bis(2-anilino-4-morfolino-1,3,5-triazinil-6-amino)estilbeno-2,2'-disulfónico o compuestos de estructura similar que contienen, en lugar del grupo morfolino, un grupo dietanolamino, un grupo metilamino, un grupo anilino o un grupo 2-metoxietilamino. También pueden estar presentes abrillantadores del tipo de difenilestirilo sustituido, por ejemplo las sales alcalinas de 4,4'-bis(2-sulfoestiril)difenilo, de 4,4'-bis(4-cloro-3-sulfoestiril)difenilo o de 4-(4-cloroestiril)-4'-(2-sulfoestiril)difenilo. También se pueden utilizar mezclas de los abrillantadores ópticos mencionados anteriormente.

50

Entre los inhibidores de espuma se incluyen organopolisiloxanos y mezclas de los mismos con ácido silícico microfino, opcionalmente silanado, así como ceras de parafina y mezclas de los mismos con ácido silícico silanizado o alquilendiamidas de ácidos bis-grasos. También se pueden utilizar mezclas de inhibidores de espuma diferentes, por ejemplo, los formados de siliconas, parafinas o ceras. Los inhibidores de espuma, en particular, inhibidores de espuma que contienen silicona y/o parafina están unidos de manera preferente, a una sustancia portadora granular que es soluble o dispersable en agua. Se pueden utilizar, en particular, mezclas de parafinas y biestearil-etilendiamida, en particular.

55

60

Las sustancias activas de liberación de la suciedad son aquellos compuestos que influyen positivamente en la capacidad para eliminar por lavado los aceites y grasas de los tejidos. Este efecto resulta particularmente evidente cuando el tejido ensuciado es uno que ya ha sido previamente lavado varias veces con un agente de lavado, según la presente invención, que contiene este componente de liberación de aceite y grasa. Entre los componentes de liberación de aceite y grasa preferentes se incluyen, por ejemplo, éteres de celulosa no iónicos, tales como

65

metilcelulosa y metilhidroxipropilcelulosa que tienen una proporción del 15% al 30% en peso de grupos metoxi y una proporción del 1% al 15% en peso de grupos hidroxipropoxilo, basándose en cada caso en los éteres de celulosa no iónicos, así como polímeros, conocidos de la técnica existente, de ácido ftálico y/o ácido tereftálico, respectivamente, de sus derivados con dioles monoméricos y/o poliméricos, en particular, los polímeros de tereftalatos de etileno y/o tereftalatos de polietilenglicol o derivados modificados aniónicamente y/o no iónicamente de los mismos.

Entre los inhibidores de transferencia de color se incluyen polímeros de vinilpirrolidona, vinilimidazol, N-óxido de vinilpiridina o copolímeros de los mismos. También se pueden utilizar polivinilpirrolidonas que tienen pesos moleculares de 15.000 a 50.000 y polivinilpirrolidonas que tienen pesos moleculares por encima de 1.000.000, en particular, de 1.500.000 a 4.000.000, copolímeros de N-vinilimidazol/N-vinilpirrolidona, poliviniloxazolidonas, copolímeros a base de monómeros vinílicos y amidas de ácidos carboxílicos, poliésteres y poliamidas que contienen grupos pirrolidona, poliamidoaminas y polietileniminas injertadas, polímeros que tienen grupos amida formados de aminas secundarias, polímeros de N-óxido de poliamina, alcoholes de polivinilo y copolímeros a base de ácido acrilamidoalquenilsulfónicos. También es posible, sin embargo, utilizar sistemas enzimáticos que comprenden una peroxidasa y peróxido de hidrógeno o una sustancia que produce peróxido de hidrógeno en agua.

Los inhibidores de agrisado son aquellos materiales que mantienen la suciedad que se ha desprendido de las fibras textiles en suspensión en un medio de lavado. Los coloides solubles en agua, habitualmente de naturaleza orgánica, son adecuados para esto, por ejemplo almidón, cola, gelatina, sales de ácidos étercarboxílicos o étersulfónicos de almidón o de celulosa o sales de ésteres de ácido sulfúrico de celulosa o de almidón. Las poliamidas solubles en agua que contienen grupos ácidos también son adecuadas para este propósito. También se pueden utilizar derivados de almidón distintos de los citados anteriormente, por ejemplo almidones de aldehído. Los éteres de celulosa, tales como carboximetilcelulosa (sal sódica), metilcelulosa, hidroxialquilcelulosa y éteres mixtos, tales como metilhidroxietilcelulosa, metilhidroxipropilcelulosa, metilcarboximetilcelulosa y mezclas de los mismos, se pueden utilizar, por ejemplo en cantidades del 0,1% al 5% en peso, basándose en el peso del producto de consumo.

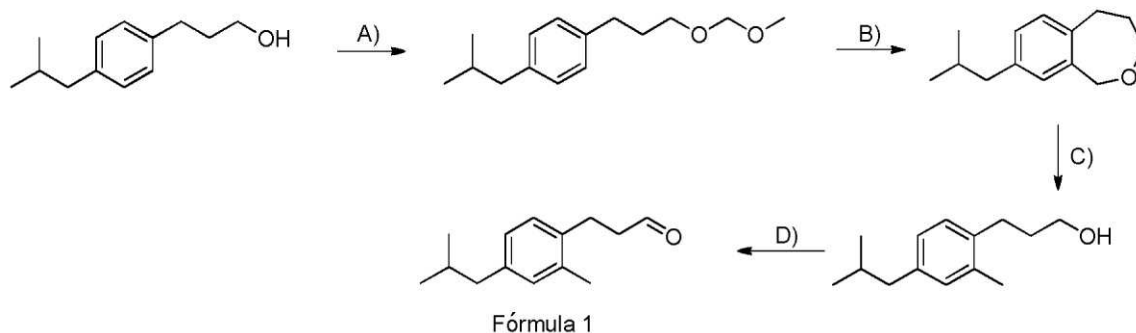
Entre los disolventes orgánicos se incluyen alcoholes que tienen de 1 a 4 átomos de carbono, en particular, metanol, etanol, isopropanol y terc-butanol, dioles que tienen de 2 a 4 átomos de carbono, en particular, etilenglicol y propilenglicol, así como mezclas de los mismos, y los éteres derivables de las clases de compuestos mencionados anteriormente. Los disolventes miscibles en agua de este tipo están presentes en productos de lavado, según la presente invención, en cantidades que habitualmente no superan el 30% en peso.

Entre los reguladores de pH se incluyen ácido cítrico, ácido acético, ácido tartárico, ácido málico, ácido láctico, ácido glicólico, ácido succínico, ácido glutárico y/o ácido adípico, pero también ácidos minerales, en particular, ácido sulfúrico, o bases, en particular, hidróxidos de amonio o hidróxidos alcalinos. Los reguladores de pH de este tipo están contenidos en los agentes, según la presente invención, en cantidades, de manera preferente, no superiores al 20% en peso, en particular, del 1,2% en peso al 17% en peso.

El compuesto de la presente invención se puede utilizar particularmente para productos del hogar con perfume que contienen enzimas, tales como las definidas anteriormente, y, en particular, productos para el tratamiento de tejidos, tales como detergentes que contienen enzimas. A continuación, se proporciona una serie de ejemplos que sirven para ilustrar adicionalmente la presente invención.

#### Ejemplo 1

Síntesis de 3-(4-isobutil-2-metilfenil)propanal



A) 1-isobutil-4-(3-(metoximetoxi)propil)benceno:

A una solución de 3-(4-isobutilfenil)propan-1-ol (641,0 g, 3,33 mol) en 1,5 l de dimetoximetano se añadió bromuro de litio (14,5 g) y ácido p-toluenosulfónico (10,0 g). La mezcla se agitó durante 20 horas a temperatura ambiente y, a continuación, se vertió con agitación en hidróxido de sodio acuoso (200 ml, 2 M). La fase orgánica se lavó de forma neutra con solución diluida de NaCl, se secó ( $\text{MgSO}_4$ ) y se evaporó al vacío para producir el 1-isobutil-4-(3-

(metoximetoxi)propil)benceno (721,0 g, 91,5%) como un aceite incoloro.  $^1\text{H}$ -RMN (400 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ):  $\delta$  = 7,17-7,08 (m, 4H), 4,68 (s, 2H), 3,59 (t,  $J$  = 6,4 Hz, 2H), 3,42 (s, 3H), 2,74 (t,  $J$  = 7,8 Hz, 2H), 2,49 (d,  $J$  = 7,1 Hz, 2H), 2,0-1,84 (m, 3H), 0,95 (d,  $J$  = 6,6 Hz, 6H) ppm.  $^{13}\text{C}$ -RMN (400 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ):  $\delta$  = 139,5 (s), 139,4 (s), 129,5 (d, 2C), 128,5 (d, 2C), 96,9 (t), 67,6 (t), 55,6 (q), 45,5 (t), 32,5 (t), 31,9 (t), 30,7 (d), 22,8 (c, 2C) ppm. CG/EM (EI): 236 ( $\text{M}^+$ ), 204 (29), 161 (65), 147 (59), 131 (100), 117 (49), 105 (37), 104 (26), 91 (46), 57 (29), 45 (64).

#### B) 8-isobutil-1,3,4,5-tetrahidrobenzo[c]oxepina

A una solución enfriada (0°C) de  $\text{AlCl}_3$  (10,33 g) en diclorometano (80 ml) se añadió gota a gota una solución de 1-isobutil-4-(3-(metoximetoxi)propil)benceno (13,9 g, 55,36 mmol) en diclorometano (40 ml). Después de completar la adición, la mezcla se agitó durante 1,5 horas a 5°C y se vertió en una solución acuosa de hidróxido de sodio (80 ml, 2 M). La mezcla se extrajo con MTBE y las capas orgánicas se lavaron con éter y solución acuosa saturada de cloruro sódico, se secaron ( $\text{MgSO}_4$ ) y se evaporaron al vacío para proporcionar un aceite de color amarillento claro (11,91 g) que se destiló primero en Kugelrohr (125°C, 0,12 mbar) y, a continuación, se purificó mediante cromatografía para producir 8-isobutil-1,3,4,5-tetrahidrobenzo[c]oxepina (6,95, 61%) como un aceite incoloro. Olor:  $^1\text{H}$ -RMN (400 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ):  $\delta$  = 7,11 (d,  $J$  = 7,33 Hz, 1H), 7,01-6,97 (m, 2H), 4,66 (s, 2H), 4,09-4,06 (m, 2H), 3,02-2,98 (m, 2H), 2,46 (d,  $J$  = 7,33 Hz, 2H), 1,93-1,82 (m, 1H), 0,94 (d,  $J$  = 6,8 Hz, 6H) ppm.  $^{13}\text{C}$ -RMN (400 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ):  $\delta$  = 140,3 (s), 140,05 (s), 139,9 (s), 129,8 (d), 129,3 (d), 128,8 (d), 76,1 (t), 75,6 (t), 45,3 (t), 35,5 (t), 30,9 (t), 30,6 (d), 22,8 (c, 2C) ppm. CG/EM (EI): 204 ( $\text{M}^+$ , 33), 161 (100), 147 (44), 143 (58), 131 (31), 129 (28), 119 (61), 115 (34), 105 (43), 91 (34).

#### C) 3-(4-isobutil-2-metilfenil) propan-1-ol

Se añadió una cantidad catalítica de complejo de éter y trifluoruro de boro (0,3 g) a una suspensión de Pd/C (10%, 0,5 g) y 8-isobutil-1,3,4,5-tetrahidrobenzo[c]oxepina (50,0 g, 244,5 mmol). La mezcla se hidrogenó en un autoclave durante 2 horas a 9 bar y 50°C durante 2 horas. La suspensión se filtró y se destiló una película delgada (160°C, 0,11 mbar) para producir 3-(4-isobutil-2-metilfenil)propan-1-ol (45,39 g, 89,9%) como un aceite incoloro viscoso. Olor:  $^1\text{H}$ -RMN (400 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ):  $\delta$  = 7,10 (d,  $J$  = 7,6 Hz, 1H), 6,99-6,94 (m, 2H), 3,75 (t,  $J$  = 6,6 Hz, 2H), 2,74-2,68 (m, 2H), 2,47 (d,  $J$  = 7,3 Hz, 2H), 2,34 (s, 3H), 2,19 (s, 1H, -OH), 1,95-1,84 (m, 1H), 0,96 (d,  $J$  = 6,6 Hz, 6H) ppm.  $^{13}\text{C}$ -RMN (400 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ):  $\delta$  = 139,7 (s), 137,6 (s), 135,9 (s), 131,5 (d), 128,9 (d), 127,1 (d), 63,0 (t), 45,4 (t), 33,5 (t), 30,6 (d), 29,5 (t), 22,9 (c), 19,7 (c) ppm. CG/EM (EI): 206 ( $\text{M}^+$ , 25), 163 (100), 161 (27), 145 (84), 119 (53), 117 (33), 115 (32), 105 (41), 91 (40), 41 (23).

#### D) 3-(4-isobutil-2-metilfenil)propanal

Se añadió clorocromato de piridinio (PCC, 37,6 g, 174,49 mmol) en porciones a una solución de 3-(4-isobutil-2-metilfenil)propan-1-ol (30,0 g, 145,41 mmol) en diclorometano (300 ml); la temperatura subió a 35°C. La mezcla se agitó durante 1 hora y se añadió otra cantidad de PCC (10 g, 46,4 mmol) y se continuó la agitación durante otros 15 minutos. La mezcla de reacción se filtró sobre Florisil y gel de sílice. El filtrado se evaporó al vacío (23,2 g) y se destiló en kugelrohr (143°C, 0,08 mbar) para producir 3-(4-isobutil-2-metilfenil)propanal (19,01 g, 64%) como un aceite incoloro. Olor: floral, aldehydico, verde, gomoso, liliado, acuoso.  $^1\text{H}$ -RMN (400 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ):  $\delta$  = 9,88 (t,  $J$  = 1,5 Hz, 1H), 7,07 (d,  $J$  = 7,6 Hz, 1H), 7,0-6,95 (m, 2H), 2,98-2,93 (m, 2H), 2,79-2,74 (m, 2H), 2,46 (d,  $J$  = 7,1 Hz, 2H), 2,33 (s, 3H), 1,95-1,82 (m, 1H), 0,95 (d,  $J$  = 6,6 Hz, 6H) ppm.  $^{13}\text{C}$ -RMN (400 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ):  $\delta$  = 202,2 (d), 140,2 (s), 136 (s), 135,9 (s), 131,6 (d), 128,6 (d), 127,3 (d), 45,4 (t), 44,6 (t), 30,6 (d), 25,5 (t), 22,9 (c), 19,7 (c) ppm. CG/EM (EI): 204 ( $\text{M}^+$ , 23), 161 (100), 147 (26), 143 (49), 119 (84), 118 (34), 117 (33), 115 (33), 105 (59), 91 (36).

#### Ejemplo 2

En esta formulación de perfume floral el 3-(4-isobutil-2-metilfenil)propanal aumenta el carácter floral y hace que esta composición chipre sea más fresca con una tonalidad floral agradable, enfatizando la suavidad de las maderas, mientras se mantiene un carácter picante afrutado.

|                                              |             |        |
|----------------------------------------------|-------------|--------|
| ALCOHOL ETILFENÍLICO                         | 60-12-8     | 20,00  |
| ALD C 11 UNDECILÉNICO AL 10% EN BB           |             | 9,00   |
| AMBERMAX 10%/TEC                             |             | 3,00   |
| BENZOATO DE BENCILO                          | 120-51-4    | 93,00  |
| ESENCIA DE BERGAMOTA ITALIE ORPUR            | 8007-75-8   | 75,00  |
| CASHMERAN                                    | 33704-61-9  | 9,00   |
| CHENE EXTRAIT CO2/ETANOL                     |             | 8,00   |
| ESENCIA DE LIMÓN ITALIE SFUMATRICE ORPUR     | 8008-56-8   | 45,00  |
| DIHIDROISOJASMONATO DE METILO                | 37172-53-5  | 100,00 |
| ESENCIA DE GÁLVANO CONCENTRADO al 10% en DPG |             | 25,00  |
| GERANIOL 980                                 | 106-24-1    | 15,00  |
| GIVESCONE                                    | 57934-97-1  | 100,00 |
| ESENCIA DE POMELO COSMOS                     | 8016-20-4   | 30,00  |
| ABSOLUTO DE JASMÍN COMMUNELLE                | 8022-96-6   | 10,00  |
| JAVANOL                                      | 198404-98-7 | 2,00   |
| KOHINOOL 862107-86-6                         |             | 20,00  |
| 2,6-NONADIENOL 10%/TEC al 1% en BB           |             | 25,00  |
| OENANTATO DE ALILO al 10% en BB              |             | 8,00   |
| ESENCIA DE PACHULÍ FRACCIÓN INDONESIA ORPUR  | 8014-09-3   | 20,00  |
| MELOCOTÓN PURO                               | 104-67-6    | 3,00   |
| "PEPPERWOOD"                                 | 67643-70-3  | 55,00  |
| SYLKOLIDE                                    | 676532-44-8 | 70,00  |
| VERTOFIX COEUR                               | 32388-55-9  | 120,00 |
| 3-(4-ISOBUTIL-2-METILFENIL)PROPANAL          |             | 45,00  |
|                                              |             | 900,00 |

### Ejemplo 3

Estudio de metabolismo *in vitro*. Una comparación de un compuesto de fórmula (I) y Lilial®.

Se descongelaron hepatocitos crioconservados de ratas macho (Sprague Dawley; Lifetechnologies), se lavaron en medio de recuperación de hepatocitos crioconservados ("Cryopreserved Hepatocytes Recovery Medium") (CHRM; Lifetechnologies) y se suspendieron en medio Williams E (MEM; Lifetechnologies). Lilial® o el compuesto de fórmula (I) (concentración final: 100 µM) se añadieron a las células ( $1 \times 10^6$  células viables/ml) y las suspensiones se incubaron hasta 4 horas a 37°C en un agitador por duplicado. El metabolismo de la testosterona se controló como control positivo. La disminución de los compuestos de ensayo y la formación del derivado de ácido benzoico correspondiente se determinó mediante análisis CG-EM de los ésteres metílicos formados después de la derivatización con trimetilsilil-diazometano (Sigma-Aldrich) en metanol. Los compuestos de ensayo reaccionan con diazometano proporcionando una metil cetona que se utilizó para la cuantificación de Lilial® y el compuesto de fórmula (I). El metabolismo se detuvo con HCl 1 M enfriado en hielo, las muestras se extrajeron con terc-butil metil éter (MTBE) y se analizaron mediante CG-EM. Las incubaciones que contenían testosterona como control también se detuvieron con HCl 1 M enfriado en hielo, se centrifugaron para separar las células, se filtraron y la disminución de testosterona se analizó mediante CL-EM. Para cuantificar la disminución de las sustancias de ensayo y la formación de metabolitos de ácido benzoico, se prepararon curvas de calibración de los materiales de referencia (Lilial® y el compuesto de fórmula (I), ácido terc-butil benzoico (Fluka)) en medio de incubación de hepatocitos y se analizaron como las muestras de hepatocitos.

Se observó una disminución rápida de la testosterona como control positivo, lo que indica que los hepatocitos eran metabólicamente activos. El compuesto de fórmula (I) y Lilial® se metabolizaron rápidamente en hepatocitos de rata y no se midió ningún compuesto residual después de 4 horas. Aunque se detectó ácido terc-butil benzoico como metabolito de Lilial® (3,4-3,9 µM), no se formó derivado de ácido benzoico a partir del compuesto de fórmula I (tabla 1). El límite de detección fue de <1 µM.

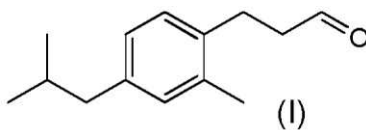
Tabla 1. Concentraciones de Lilial® y un compuesto de fórmula (I) y los metabolitos de ácido benzoico correspondientes en hepatocitos de rata en las 4 horas de incubación. La concentración de ensayo inicial a las 0 horas de incubación fue de 100 µM.

| Compuesto ensayado       | Compuesto ensayado residual | Derivado de ácido benzoico |
|--------------------------|-----------------------------|----------------------------|
| Compuesto de fórmula (I) | 0 µM                        | no hallado                 |
| Lilial®                  | 0 µM                        | 3,4-3,9 µM                 |

Por lo tanto, la sustitución de metilo en el anillo de benceno del compuesto de fórmula (I) evita la formación del derivado de ácido benzoico correspondiente *in vitro*. Dado que los derivados de ácido benzoico, tal como ácido terc-butil benzoico, de Lilial® provocan toxicidad reproductora en ratas macho, estos efectos tóxicos en ratas se evitan mediante el sustituyente en orto del compuesto de fórmula (I).

REIVINDICACIONES

1. Compuesto según la fórmula (I)



2. Utilización de un compuesto, según la fórmula (I), como ingrediente de perfume.

3. Utilización de un compuesto, según la reivindicación 2, en la que el ingrediente de perfume tiene características de olor a muguete.

4. Composición de perfume que comprende un compuesto según la fórmula (I).

5. Composición de perfume, según la reivindicación 4, que está libre de odorantes de alcanal sustituidos con arilo, más particularmente, propanales sustituidos con arilo, que están no sustituidos en el anillo de arilo en una posición orto con respecto al sustituyente que contiene la función aldehído, en particular, Lillal<sup>®</sup>.

6. Composición de perfume, según la reivindicación 4 o la reivindicación 5, que comprende uno o más ingredientes de fragancia adicionales.

7. Composición de perfume, según cualquiera de las reivindicaciones 4 a 6, que muestra características de olor a muguete.

8. Composición para el cuidado personal o para el cuidado del hogar que comprende un compuesto de fórmula (I), según la reivindicación 1, o una composición de perfume, según cualquiera de las reivindicaciones 3 a 7.

9. Procedimiento para producir una característica de olor a muguete en una composición de perfume, que comprende la etapa de añadir a dicha composición un compuesto, según la reivindicación 1.