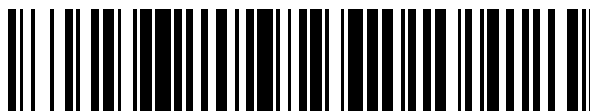


19



OFICINA ESPAÑOLA DE  
PATENTES Y MARCAS

ESPAÑA



11 Número de publicación: **2 686 519**

51 Int. Cl.:

**C07D 333/16** (2006.01)

**C07D 333/18** (2006.01)

**C07C 321/08** (2006.01)

**C11B 9/00** (2006.01)

**A23L 27/20** (2006.01)

12

TRADUCCIÓN DE PATENTE EUROPEA

T3

86 Fecha de presentación y número de la solicitud internacional: **06.04.2015 PCT/US2015/024470**

87 Fecha y número de publicación internacional: **15.10.2015 WO15157153**

96 Fecha de presentación y número de la solicitud europea: **06.04.2015 E 15718309 (6)**

97 Fecha y número de publicación de la concesión europea: **06.06.2018 EP 3131889**

54 Título: **Novedosos compuestos organolépticos y su uso en composiciones de aroma y fragancia**

30 Prioridad:

**10.04.2014 US 201461977702 P**

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

**18.10.2018**

73 Titular/es:

**INTERNATIONAL FLAVORS & FRAGRANCES  
INC. (100.0%)  
521 West 57th Street 10th Floor Legal  
New York, NY 10019, US**

72 Inventor/es:

**AGYEMANG, DAVID O.;  
BRAIN, ANJA VAN KIPPERSLUIS;  
CAI, TINGWEI;  
CANNON, ROBERT J.;  
CHEN, MICHAEL ZHEN;  
CURTO, NICOLE L.;  
JANCZUK, ADAM JAN;  
JONES, PAUL D.;  
KAZIMIERSKI, ARKADIUSZ;  
LI, JING y  
RODRIGUEZ, DAVID**

74 Agente/Representante:

**LEHMANN NOVO, María Isabel**

ES 2 686 519 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**

Novedosos compuestos organolépticos y su uso en composiciones de aroma y fragancia

Campo de la invención

La presente invención se refiere a nuevas entidades químicas y su uso como materiales de aroma y fragancia.

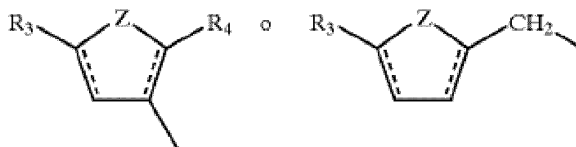
5 Antecedentes de la invención

10 Existe una necesidad continua de productos químicos de aroma que potencien o proporcionen nuevos aromas para preparaciones de comida. Existe una necesidad similar en la industria de las fragancias de proporcionar nuevos productos químicos para dar a los perfumistas y otras personas la capacidad de crear nuevas fragancias para perfumes, colonias y productos de cuidado personal. Aquellos expertos en la materia aprecian cómo las diferencias en las estructuras químicas de las moléculas pueden producir diferencias significativas en el olor, notas y características. La identificación de variaciones estructurales y el descubrimiento de nuevos productos químicos permiten la creación de nuevos aromas y fragancias.

15 "Thermally degraded thiamin: a potent source of interesting flavor compounds" (Guentert M et al., 1992) trata de la obtención de compuestos de aroma calentando disoluciones acuosas de clorhidrato de tiamina con diferentes concentraciones y valores de pH ajustados de manera diferente en un autoclave durante diversos tiempos, y aplicando el método de destilación/extracción simultáneo según Likens-Nickerson. El concentrado de aroma fue previamente separado y las diferentes fracciones se analizaron posteriormente. Se aislaron diversos compuestos desconocidos en cantidades de microgramo para dilucidar sus estructuras por IR, RMN y espectrometría de masas, y para comprobar sus propiedades olfativas.

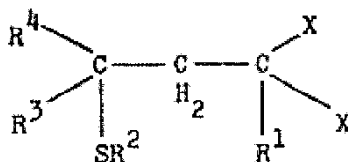
20 Los compuestos identificados se usaron para explicar las diversas vías de degradación de tiamina térmicamente tratada. Se tratan su aparición, formación, impresión sensorial y datos espectroscópicos.

El documento US 2002/037349 desvela precursores de aroma que tienen la fórmula R1-S-CO-O-R2, en la que R1 es un radical heterocíclico seleccionado del grupo que consiste en:



25 en las que Z es un átomo de oxígeno o de azufre, R3 y R4 representan hidrógeno o un grupo alquilo C1-C4 y el símbolo representa un enlace sencillo o doble enlace, y R2 deriva de un grupo de compuestos de alcohol primario que consiste en alcanoles C1-C18, glicerol y mono-, oligo- y polisacáridos, en los que el oxígeno del resto R2-O- está unido a un átomo de carbono primario de R2. '349 desvela además los alimentos proporcionados con un precursor de aroma especificado anteriormente.

30 CH 556145 desvela el uso de al menos un derivado de azufre de la fórmula a continuación como ingrediente perfumante para la preparación de perfumes y productos perfumados y/o aromatizantes para la preparación de aromas artificiales y aromatizante para comida/bebida:

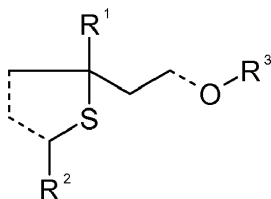


35 en la que un X representa un grupo hidroxilo o un grupo aciloxi, el otro X representa un átomo de hidrógeno; y en la que R1, R2, R3 y R4 pueden ser iguales o diferentes, y cada uno representa un átomo de hidrógeno o un grupo hidrocarbilo alifático univalente; o R1 y R3 o R4, junto con los átomos de carbono intermedios, constituyen un anillo cicloalifático

Sumario de la invención

40 La presente invención se refiere al uso de productos químicos novedosos para potenciar el aroma de alimentos, chicles, productos dentales y de higiene oral y especialidades farmacéuticas. Además, la presente invención proporciona productos químicos novedosos, y su uso para potenciar la fragancia de perfumes, aguas de baño, colonias, productos personales y similares.

Más específicamente, la presente invención se refiere a novedosos compuestos de tiofen-2-ilo y un método de mejora, potenciamiento o modificación de una composición de aroma o una fragancia mediante la adición de una cantidad aceptable olfativa de compuestos de tiofen-2-ilo representados por la fórmula I expuesta a continuación:



Fórmula I

5 en la que

R<sup>1</sup> es un grupo alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>;

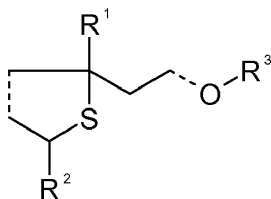
R<sup>2</sup> está seleccionado del grupo que consiste en hidrógeno, un grupo alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub> que opcionalmente contiene un grupo hidroxilo y un grupo alqueno C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub> que opcionalmente contiene un grupo hidroxilo;

10 R<sup>3</sup> está seleccionado del grupo que consiste en hidrógeno, un grupo alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub> y -C(O)R<sup>4</sup>, en la que R<sup>4</sup> está seleccionado del grupo que consiste en hidrógeno y un grupo alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>;

una de las líneas de puntos en el anillo representa un doble enlace carbono-carbono opcional; y la línea de puntos en la cadena lateral representa un doble enlace carbono-oxígeno opcional,

con la condición de que, cuando el doble enlace carbono-oxígeno opcional esté presente, R<sup>3</sup> está ausente.

15 Otra realización de la presente invención se refiere a novedosos compuestos de tiofen-2-ilo representados por la fórmula II expuesta a continuación:



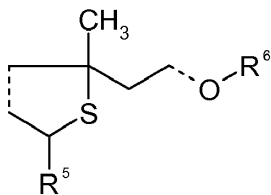
Fórmula II

en la que R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup> y R<sup>3</sup> se definen como antes;

la línea de puntos en el anillo representa un doble enlace carbono-carbono opcional; y la línea de puntos en la cadena lateral representa un doble enlace carbono-oxígeno opcional,

20 con la condición de que, cuando el doble enlace carbono-oxígeno opcional esté presente, R<sup>3</sup> está ausente.

Otra realización de la presente invención se refiere a novedosos compuestos de tiofen-2-ilo representados por la fórmula III expuesta a continuación:



Fórmula III

en la que

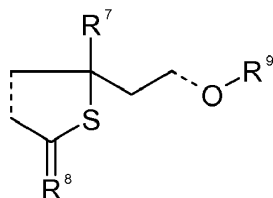
25 R<sup>5</sup> representa hidrógeno, isopropilo o 1-hidroxi-1-metil-etilo;

R<sup>6</sup> representa hidrógeno;

la línea de puntos en el anillo representa un doble enlace carbono-carbono opcional; y la línea de puntos en la cadena lateral representa un doble enlace carbono-oxígeno opcional,

con la condición de que, cuando el doble enlace carbono-oxígeno opcional esté presente,  $R^6$  está ausente; y cuando  $R^5$  representa un grupo isopropilo y el doble enlace carbono-carbono opcional está ausente, el doble enlace carbono-oxígeno opcional está presente y  $R^6$  está ausente.

- 5 Otra realización de la presente invención se refiere a novedosos compuestos de tiofen-2-ilo representados por la fórmula IV expuesta a continuación:



Fórmula IV

en la que

$R^7$  es un grupo alquilo  $C_1-C_4$ ;

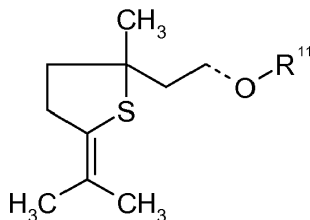
$R^8$  representa un grupo alquilo  $C_1-C_4$  que opcionalmente contiene un grupo hidroxilo;

- 10  $R^9$  está seleccionado del grupo que consiste en hidrógeno, un grupo alquilo  $C_1-C_4$  y  $-C(O)R^{10}$ , en la que  $R^{10}$  está seleccionado del grupo que consiste en hidrógeno y un grupo alquilo  $C_1-C_4$ ;

la línea de puntos en el anillo representa un doble enlace carbono-carbono opcional; y la línea de puntos en la cadena lateral representa un doble enlace carbono-oxígeno opcional,

con la condición de que, cuando el doble enlace carbono-oxígeno opcional esté presente,  $R^9$  está ausente.

- 15 Otra realización de la presente invención se refiere a novedosos compuestos de tiofen-2-ilo representados por la fórmula V expuesta a continuación:

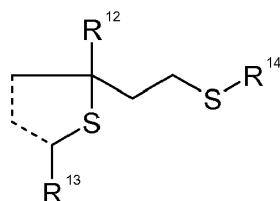


Fórmula V

en la que  $R^{11}$  está seleccionado del grupo que consiste en hidrógeno y un grupo alquilo  $C_1-C_4$ ; y la línea de puntos representa un doble enlace carbono-oxígeno opcional,

- 20 con la condición de que, cuando el doble enlace carbono-oxígeno opcional esté presente,  $R^{11}$  está ausente.

Otra realización de la presente invención se refiere a novedosos compuestos de tiofen-2-ilo representados por la fórmula VI expuesta a continuación:



Fórmula VI

en la que

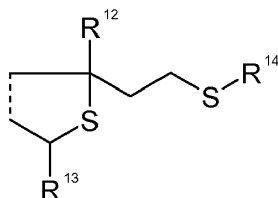
- 25  $R^{12}$  es un grupo alquilo  $C_1-C_4$ ;

$R^{13}$  está seleccionado del grupo que consiste en hidrógeno, un grupo alquilo  $C_1-C_4$  que opcionalmente contiene un grupo hidroxilo y un grupo alqueno  $C_1-C_4$  que opcionalmente contiene un grupo hidroxilo;

$R^{14}$  está seleccionado del grupo que consiste en hidrógeno, un grupo alquilo  $C_1-C_4$  y  $-C(O)R^{15}$ , en la que  $R^{15}$  está seleccionado del grupo que consiste en hidrógeno y un grupo alquilo  $C_1-C_4$ ; y

una de las líneas de puntos representa un doble enlace carbono-carbono opcional.

- 5 Otra realización de la presente invención se refiere a novedosos compuestos de tiofen-2-ilo representados por la fórmula VII expuesta a continuación:

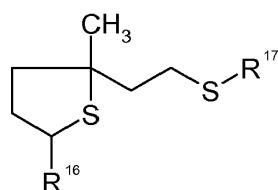


Fórmula VII

en la que  $R^{12}$ ,  $R^{13}$  y  $R^{14}$  se definen como antes; y

la línea de puntos representa un doble enlace carbono-carbono opcional.

- 10 Otra realización de la presente invención se refiere a novedosos compuestos de tiofen-2-ilo representados por la fórmula VIII expuesta a continuación:

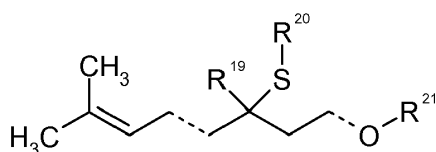


Fórmula VIII

en la que  $R^{16}$  representa hidrógeno, isopropilo o 1-hidroxi-1-metil-etilo; y

$R^{17}$  está seleccionado del grupo que consiste en un grupo alquilo  $C_1-C_4$  y  $-C(O)R^{18}$ , en la que  $R^{18}$  está seleccionado del grupo que consiste en hidrógeno y un grupo alquilo  $C_1-C_4$ .

- 15 Otra realización de la presente invención se refiere a novedosos compuestos de oct-6-enilo representados por la fórmula IX expuesta a continuación:



Fórmula IX

en la que

$R^{19}$  es un grupo alquilo  $C_1-C_4$ ;

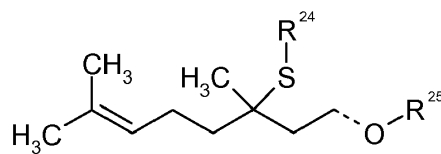
- 20  $R^{20}$  está seleccionado del grupo que consiste en hidrógeno y  $-C(O)R^{22}$ , en la que  $R^{22}$  está seleccionado del grupo que consiste en hidrógeno y un grupo alquilo  $C_1-C_4$ ;

$R^{21}$  está seleccionado del grupo que consiste en hidrógeno, un grupo alquilo  $C_1-C_4$  y  $-C(O)R^{23}$ , en la que  $R^{23}$  está seleccionado del grupo que consiste en hidrógeno y un grupo alquilo  $C_1-C_4$ ;

- 25 las líneas de puntos representan un doble enlace carbono-carbono opcional y un doble enlace carbono-oxígeno opcional,

con la condición de que, cuando el doble enlace carbono-oxígeno opcional esté presente,  $R^{21}$  está ausente.

Otra realización de la presente invención se refiere a novedosos compuestos de oct-6-enilo representados por la fórmula X expuesta a continuación:



Fórmula X

en la que la fórmula X representa un compuesto de oct-6-enilo seleccionado del grupo que consiste en:

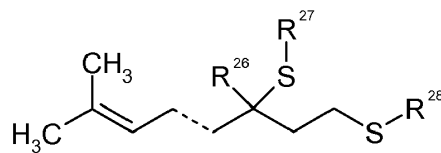
3-mercapto-3,7-dimetil-oct-6-en-1-ol;

3-mercapto-3,7-dimetil-oct-6-enal;

5 S-[1-(2-hidroxi-etil)-1,5-dimetil-hex-4-enil]-tioacetato; y

acetato de 3-acetilsulfanil-3,7-dimetil-oct-6-enilo.

Otra realización de la presente invención se refiere a novedosos compuestos de oct-6-enilo representados por la fórmula XI expuesta a continuación:



Fórmula XI

10 en la que

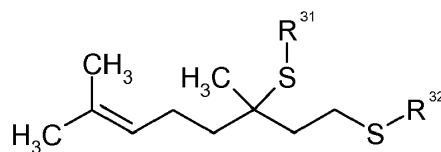
$R^{26}$  es un grupo alquilo  $C_1-C_4$ ;

$R^{27}$  está seleccionado del grupo que consiste en hidrógeno, un grupo alquilo  $C_1-C_4$  y  $-C(O)R^{29}$ , en la que  $R^{29}$  está seleccionado del grupo que consiste en hidrógeno y un grupo alquilo  $C_1-C_4$ ;

15  $R^{28}$  está seleccionado del grupo que consiste en hidrógeno, un grupo alquilo  $C_1-C_4$  y  $-C(O)R^{30}$ , en la que  $R^{30}$  está seleccionado del grupo que consiste en hidrógeno y un grupo alquilo  $C_1-C_4$ ; y

la línea de puntos representa un doble enlace carbono-carbono opcional.

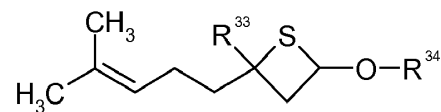
Otra realización de la presente invención se refiere a novedosos compuestos de oct-6-enilo representados por la fórmula XII expuesta a continuación:



Fórmula XII

20 en la que  $R^{31}$  y  $R^{32}$  están seleccionados cada uno independientemente del grupo que consiste en hidrógeno, un grupo alquilo  $C_1-C_4$  y  $-C(O)CH_3$ .

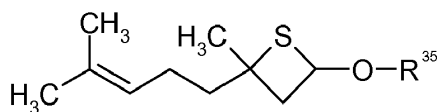
Otra realización de la presente invención se refiere a novedosos compuestos de tetano representados por la fórmula XIII expuesta a continuación:



Fórmula XIII

25 en la que  $R^{33}$  y  $R^{34}$  están seleccionados cada uno independientemente del grupo que consiste en hidrógeno y un grupo alquilo  $C_1-C_4$ .

Otra realización de la presente invención se refiere a novedosos compuestos de tietano representados por la fórmula XIV expuesta a continuación:



Fórmula XIV

en la que R<sup>35</sup> está seleccionado del grupo que consiste en hidrógeno y un grupo metilo.

- 5 Otra realización de la invención se refiere a una composición de aroma que comprende los compuestos novedosos proporcionados anteriormente y un material seleccionado del grupo que consiste en un alimento, un chicle, un producto dental, un producto de higiene oral y una especialidad farmacéutica.

Otra realización de la invención se refiere a un proceso de aumentar, potenciar o conferir sabor a un material incorporando una cantidad aceptable olfativa de los compuestos novedosos proporcionados anteriormente.

- 10 Otra realización de la presente invención se refiere a una composición de fragancia que comprende los compuestos novedosos proporcionados anteriormente.

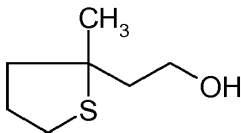
Otra realización de la invención se refiere a un método de mejora, potenciamiento o modificación de una composición de fragancia incorporando una cantidad aceptable olfativa de los compuestos novedosos proporcionados anteriormente.

- 15 Estas y otras realizaciones de la presente invención serán evidentes por la lectura de la siguiente memoria descriptiva.

Descripción detallada de la invención

Los compuestos novedosos de la presente invención se ilustran, por ejemplo, por los siguientes ejemplos.

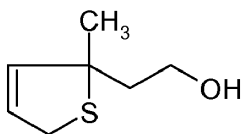
2-(2-Metil-tetrahidro-tiofen-2-il)-etanol:



20

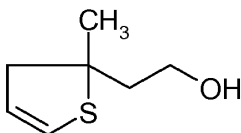
Estructura 1

2-(2-Metil-2,5-dihidro-tiofen-2-il)-etanol:



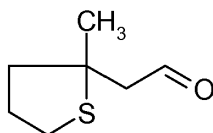
Estructura 2

2-(2-Metil-2,3-dihidro-tiofen-2-il)-etanol:



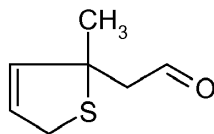
Estructura 3

- 25 (2-Metil-tetrahidro-tiofen-2-il)-acetaldehído:



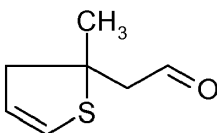
Estructura 4

(2-Metil-2,5-dihidro-tiofen-2-il)-acetaldehído:



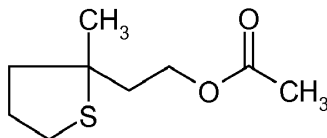
Estructura 5

(2-Metil-2,3-dihidro-tiofen-2-il)-acetaldehído:



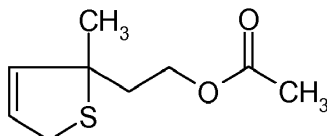
Estructura 6

5 Acetato de 2-(2-metil-tetrahydro-tiofen-2-il)-etilo:



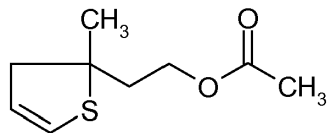
Estructura 7

Acetato de 2-(2-metil-2,5-dihidro-tiofen-2-il)-etilo:



Estructura 8

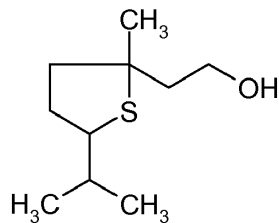
Acetato de 2-(2-metil-2,3-dihidro-tiofen-2-il)-etilo:



Estructura 9

10

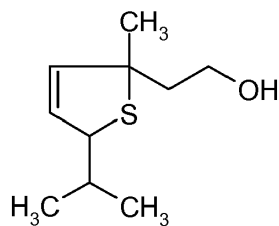
2-(5-Isopropil-2-metil-tetrahydro-tiofen-2-il)-etanol:



Estructura 10

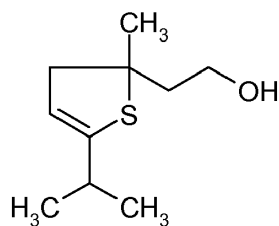


2-(5-Isopropil-2-metil-2,5-dihidro-tiofen-2-il)-etanol:



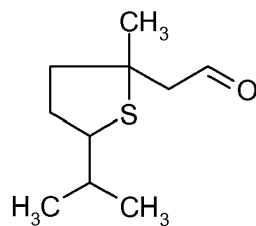
Estructura 11

2-(5-Isopropil-2-metil-2,3-dihidro-tiofen-2-il)-etanol:



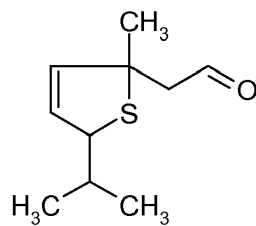
Estructura 12

5 (5-Isopropil-2-metil-tetrahidro-tiofen-2-il)-acetaldehído:



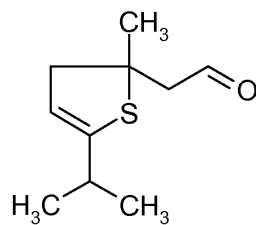
Estructura 13

(5-Isopropil-2-metil-2,5-dihidro-tiofen-2-il)-acetaldehído:



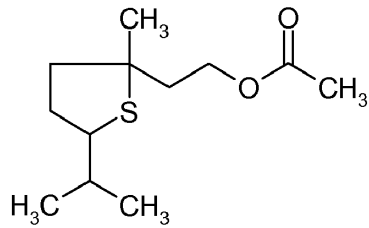
Estructura 14

(5-Isopropil-2-metil-2,3-dihidro-tiofen-2-il)-acetaldehído:



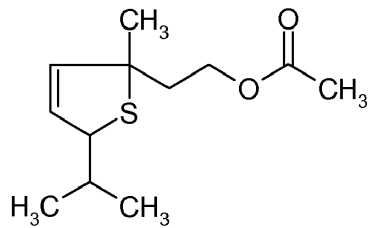
Estructura 15

Acetato de 2-(5-isopropil-2-metil-tetrahidro-tiofen-2-il)-etilo:



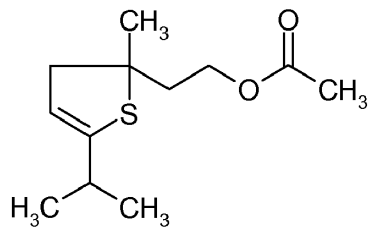
Estructura 16

Acetato de 2-(5-isopropil-2-metil-2,5-dihidro-tiofen-2-il)-etilo:



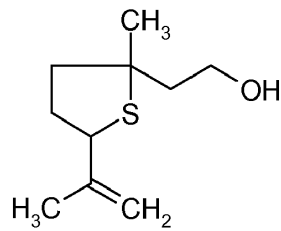
Estructura 17

5 Acetato de 2-(5-isopropil-2-metil-2,3-dihidro-tiofen-2-il)-etilo:



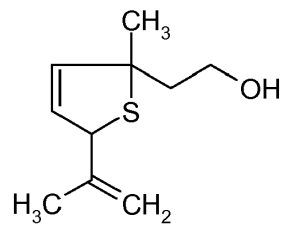
Estructura 18

2-(5-Isopropenil-2-metil-tetrahidro-tiofen-2-il)-etanol:



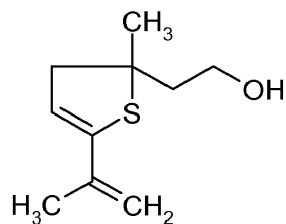
Estructura 19

2-(5-Isopropenil-2-metil-2,5-dihidro-tiofen-2-il)-etanol:



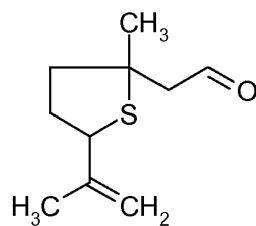
Estructura 20

2-(5-Isopropenil-2-metil-2,3-dihidro-tiofen-2-il)-etanol:



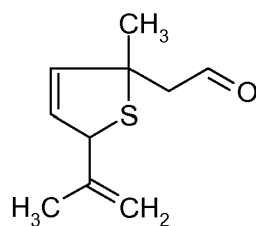
Estructura 21

(5-Isopropenil-2-metil-tetrahidro-tiofen-2-il)-acetaldehído:



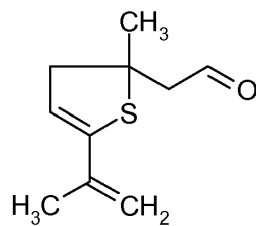
Estructura 22

5 (5-Isopropenil-2-metil-2,5-dihidro-tiofen-2-il)-acetaldehído:



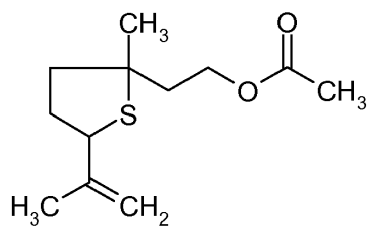
Estructura 23

(5-Isopropenil-2-metil-2,3-dihidro-tiofen-2-il)-acetaldehído:



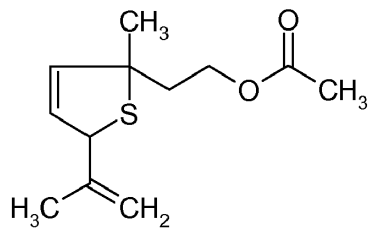
Estructura 24

Acetato de 2-(5-isopropenil-2-metil-tetrahidro-tiofen-2-il)-etilo:



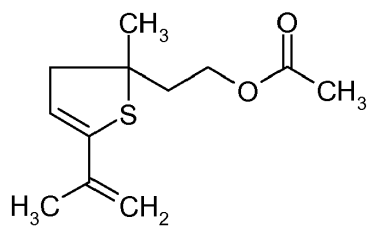
Estructura 25

Acetato de 2-(5-isopropenil-2-metil-2,5-dihidro-tiofen-2-il)-etilo:



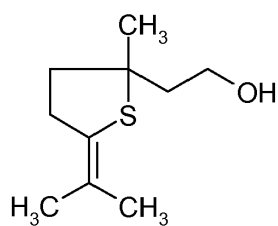
Estructura 26

Acetato de 2-(5-isopropenil-2-metil-2,3-dihidro-tiofen-2-il)-etilo:



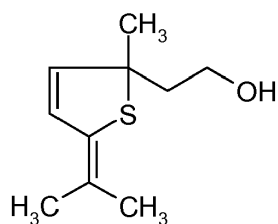
Estructura 27

5 2-(5-Isopropiliden-2-metil-tetrahidro-tiofen-2-il)-etanol:



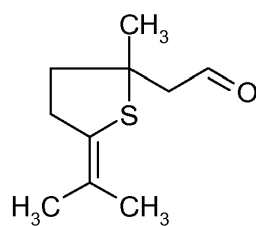
Estructura 28

2-(5-Isopropiliden-2-metil-2,5-dihidro-tiofen-2-il)-etanol:



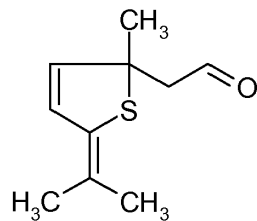
Estructura 29

(5-Isopropenil-2-metil-tetrahidro-tiofen-2-il)-acetaldehído:



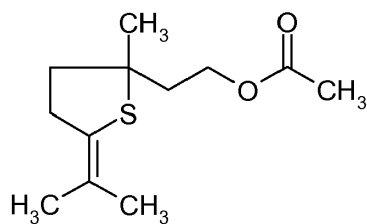
Estructura 30

(5-Isopropiliden-2-metil-2,5-dihidro-tiofen-2-il)-acetaldehído:



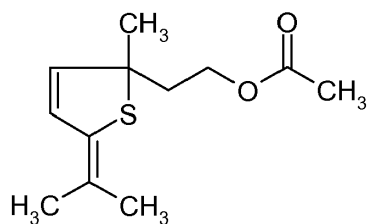
Estructura 31

Acetato de 2-(5-isopropenil-2-metil-tetrahidro-tiofen-2-il)-etilo:



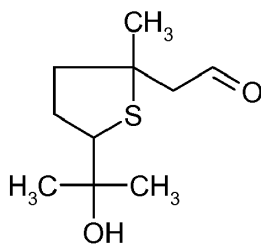
Estructura 32

5 Acetato de 2-(5-isopropiliden-2-metil-2,5-dihidro-tiofen-2-il)-etilo:



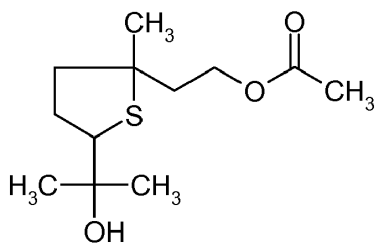
Estructura 33

[5-(1-Hidroxi-1-metil-etil)-2-metil-tetrahidro-tiofen-2-il]-acetaldehído:



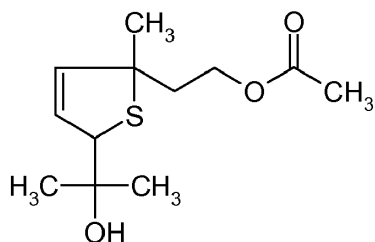
Estructura 34a

Acetato de 2-[5-(1-hidroxi-1-metil-etil)-2-metil-tetrahidro-tiofen-2-il]-etilo:



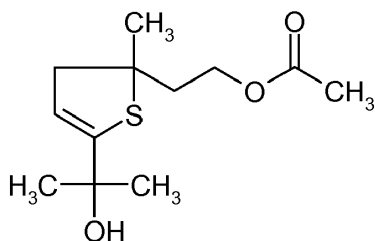
Estructura 34b

Acetato de 2-[5-(1-hidroxi-1-metil-etil)-2-metil-2,5-dihidro-tiofen-2-il]-etilo:



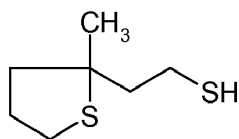
Estructura 35

Acetato de 2-[5-(1-hidroxi-1-metil-etil)-2-metil-2,3-dihidro-tiofen-2-il]-etilo:



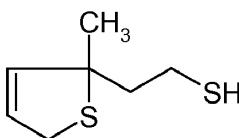
Estructura 36

5 2-(2-Metil-tetrahidro-tiofen-2-il)-etanotiol:



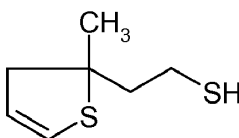
Estructura 37

2-(2-Metil-2,5-dihidro-tiofen-2-il)-etanotiol:



Estructura 38

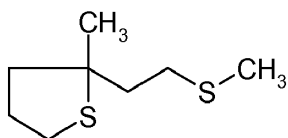
2-(2-Metil-2,3-dihidro-tiofen-2-il)-etanotiol:



Estructura 39

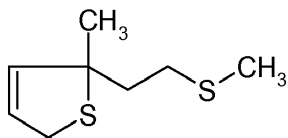
10

2-Metil-2-(2-metilsulfanil-etil)-tetrahidro-tiofeno:



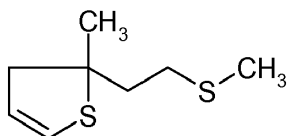
Estructura 40

2-Metil-2-(2-metilsulfanil-etil)-2,5-dihidro-tiofeno:



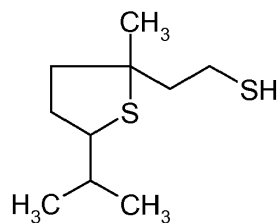
Estructura 41

2-Metil-2-(2-metilsulfanil-etil)-2,3-dihidro-tiofeno:



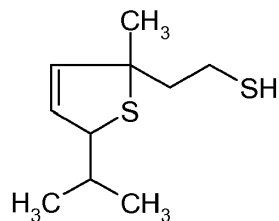
Estructura 42

5 2-(5-Isopropil-2-metil-tetrahidro-tiofen-2-il)-etanotiol:



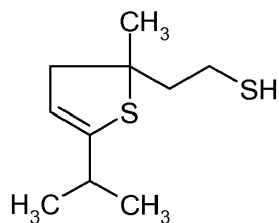
Estructura 43

2-(5-Isopropil-2-metil-2,5-dihidro-tiofen-2-il)-etanotiol:



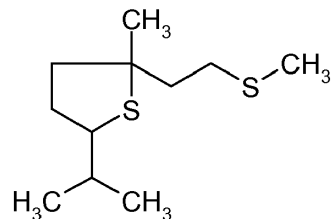
Estructura 44

2-(5-Isopropil-2-metil-2,3-dihidro-tiofen-2-il)-etanotiol:



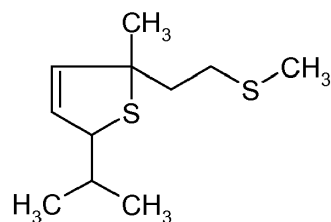
Estructura 45

5-Isopropil-2-metil-2-(2-metilsulfanil-etil)-tetrahidro-tiofeno:



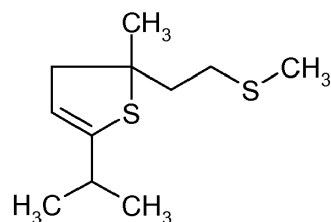
Estructura 46

5-Isopropil-2-metil-2-(2-metilsulfanil-etil)-2,5-dihidro-tiofeno:



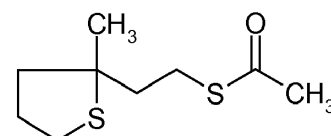
Estructura 47

5 5-Isopropil-2-metil-2-(2-metilsulfanil-etil)-2,3-dihidro-tiofeno:



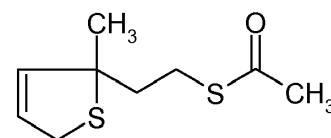
Estructura 48

S-[2-(2-Metil-tetrahidro-tiofen-2-il)-etil]-tioacetato:



Estructura 49

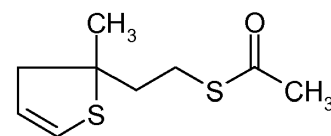
S-[2-(2-Metil-2,5-dihidro-tiofen-2-il)-etil]-tioacetato:



Estructura 50

10

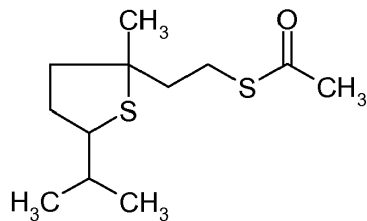
S-[2-(2-Metil-2,3-dihidro-tiofen-2-il)-etil]-tioacetato:



Estructura 51

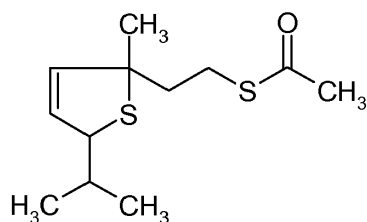


S-[2-(5-Isopropil-2-metil-tetrahidro-tiofen-2-il)-etil]-tioacetato:



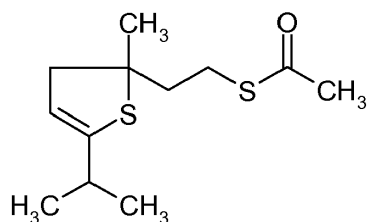
Estructura 52

S-[2-(5-Isopropil-2-metil-2,5-dihidro-tiofen-2-il)-etil]-tioacetato:



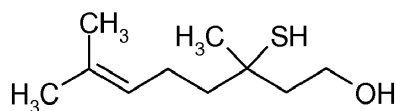
Estructura 53

5 S-[2-(5-Isopropil-2-metil-2,3-dihidro-tiofen-2-il)-etil]-tioacetato:



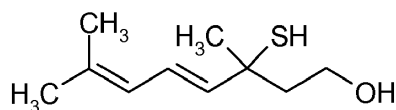
Estructura 54

3-Mercapto-3,7-dimetil-oct-6-en-1-ol:



Estructura 55

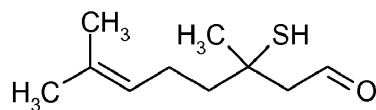
3-Mercapto-3,7-dimetil-octa-4,6-dien-1-ol:



Estructura 56

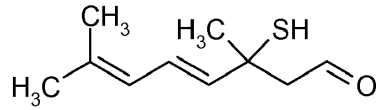
10

3-Mercapto-3,7-dimetil-oct-6-enal:



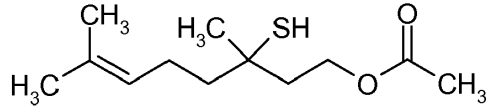
Estructura 57

3-Mercapto-3,7-dimetil-octa-4,6-dienal:



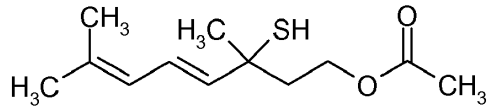
Estructura 58

Acetato de 3-mercapto-3,7-dimetil-oct-6-enilo:



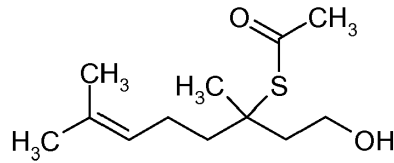
Estructura 59

5 Acetato de 3-mercapto-3,7-dimetil-octa-4,6-dienilo:



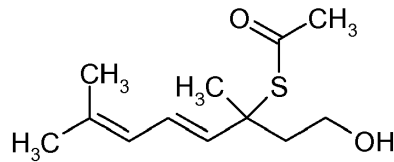
Estructura 60

S-[1-(2-Hidroxi-etil)-1,5-dimetil-hex-4-enil]-tioacetato:



Estructura 61

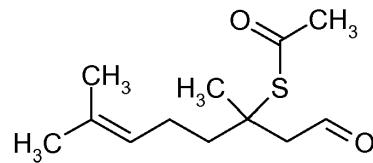
S-[1-(2-Hidroxi-etil)-1,5-dimetil-hexa-2,4-dienil]-tioacetato:



Estructura 62

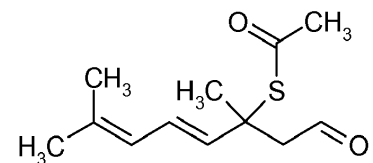
10

S-[1,5-Dimetil-1-(2-oxo-etil)-hex-4-enil]-tioacetato:



Estructura 63

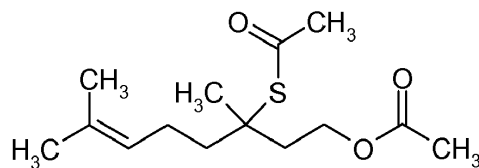
S-[1,5-Dimetil-1-(2-oxo-etil)-hexa-2,4-dienil]-tioacetato:



Estructura 64

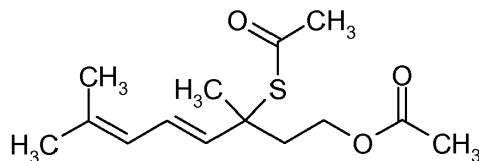
15

Acetato de 3-acetilsulfanil-3,7-dimetil-oct-6-enilo:



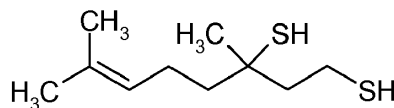
Estructura 65

Acetato de 3-acetilsulfanil-3,7-dimetil-octa-4,6-dienilo:



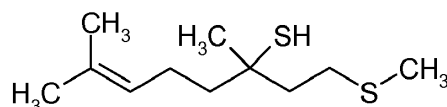
Estructura 66

5 3,7-Dimetil-oct-6-eno-1,3-ditiol:



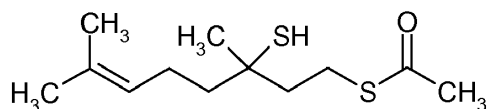
Estructura 67

3,7-Dimetil-1-metilsulfanil-oct-6-eno-3-tiol:



Estructura 68

S-(3-Mercapto-3,7-dimetil-oct-6-enil)-tioacetato:



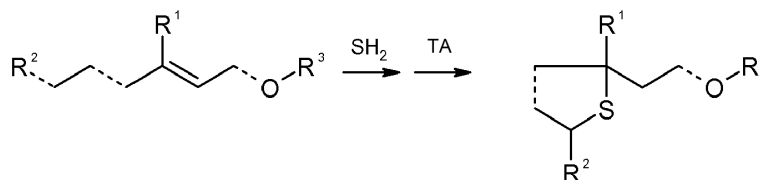
Estructura 69

10

Los compuestos de la presente invención pueden prepararse, por ejemplo, según los siguientes esquemas de reacción, cuyos detalles se especifican en los ejemplos. Los materiales se compraron de Sigma-Aldrich Chemical Company, a menos que se indique de otro modo.

15

Los compuestos de tiofen-2-ilo de la presente invención pueden prepararse, por ejemplo, según los siguientes procedimientos:



en las que R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup> y R<sup>3</sup> se definen como antes; y

TA representa temperatura ambiente.

20

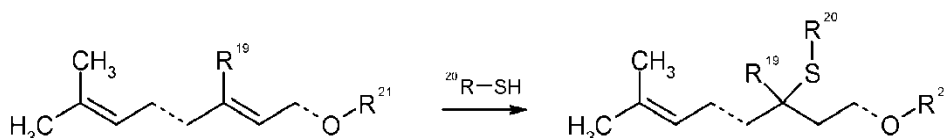
Los compuestos de tiofen-2-ilo de la presente invención pueden prepararse, por ejemplo, según los siguientes procedimientos:



en las que  $R^{12}$ ,  $R^{13}$  y  $R^{14}$  se definen como antes; y

TA representa temperatura ambiente.

5 Los compuestos de oct-6-enilo de la presente invención pueden prepararse, por ejemplo, según los siguientes procedimientos:



en la que  $R^{19}$ ,  $R^{20}$  y  $R^{21}$  se definen como antes.

La preparación anterior se detalla en los ejemplos. Los materiales se compraron de Aldrich Chemical Company, a menos que se indique de otro modo.

10 Aquellos expertos en la materia reconocerán que algunos de los compuestos de la presente invención contienen centros quirales, proporcionándose así varios isómeros de los compuestos reivindicados. Está previsto en el presente documento que los compuestos descritos en el presente documento incluyan mezclas isoméricas de tales compuestos, además de isómeros individuales que pueden separarse usando técnicas conocidas para aquellos expertos en la materia. Técnicas adecuadas incluyen cromatografía tal como cromatografía líquida de alta  
15 resolución, denominada HPLC, particularmente cromatografía en gel de sílice, y atrapamiento por cromatografía de gases conocido como atrapamiento por CG. Sin embargo, las versiones comerciales de tales productos se ofrecen principalmente como mezclas.

20 Se encuentra que los compuestos de la presente invención tienen inesperadas propiedades organolépticas fuertes y de larga duración tales como sabor o olor, que se muestra que son ventajosas para su uso en aumentar o conferir potenciamiento del sabor o efecto somatosensorial a alimentos, chicles, productos dentales y de higiene oral y especialidades farmacéuticas, proporcionando potenciamiento del aroma y un perfil de aroma global preferido. La presente invención se refiere además a un proceso de aumentar o conferir sabor o efecto somatosensorial a alimentos, chicles, productos dentales y de higiene oral y especialidades farmacéuticas añadiendo los compuestos de la presente invención.

25 Cuando los compuestos de la presente invención se usan en una composición aromatizante, pueden combinarse con materiales o adyuvantes aromatizantes convencionales, que son muy conocidos en la técnica y han sido ampliamente descritos en el pasado. Materiales aromatizantes convencionales incluyen ácidos grasos saturados, ácidos grasos insaturados, aminoácidos; alcoholes que incluyen alcoholes primarios y secundarios; ésteres; compuestos de carbonilo que incluyen cetonas; aldehídos; lactonas; materiales orgánicos cíclicos que incluyen derivados de benceno, compuestos acíclicos, heterociclos tales como furanos, piridinas, pirazinas y similares; compuestos que contienen azufre que incluyen tioles, sulfuros, disulfuros y similares; proteínas; lípidos; hidratos de carbono; los llamados potenciadores del aroma tales como glutamato monosódico; glutamato de magnesio, glutamato de calcio, guanilatos e inosinatos; materiales aromatizantes naturales tales como hidrolizados, cacao, vainilla y caramelo; aceites esenciales y extractos tales como aceite de anís, aceite de clavo y similares; y materiales  
30 aromatizantes artificiales tales como vainillina, etilvainillina y similares. Requisitos de los adyuvantes incluyen: (1) que sean no reactivos con los compuestos de la presente invención; (2) que sean organolépticamente compatibles con los compuestos de la presente invención, por lo que el aroma del producto consumible definitivo al que se añaden los compuestos no sea perjudicialmente afectado por el uso de los adyuvantes; y (3) que sean ingeribles aceptables y así no tóxicos o de otro modo no perjudiciales. Además, también pueden incluirse otros materiales de  
35 aroma, vehículos, estabilizadores, espesantes, agentes tensioactivos, acondicionadores e intensificadores de aroma.

40 Las inesperadas propiedades organolépticas fuertes y de larga duración de los compuestos de la presente invención muestran además su uso ventajoso en los actuales productos de perfumería, que incluyen la preparación de perfumes y colonias, el perfumado de productos de cuidado personal tales como jabones, geles de ducha y productos de cuidado del pelo, productos de cuidado de tejidos, ambientadores y preparaciones cosméticas. La  
45 presente invención también puede usarse para perfumar agentes de limpieza, tales como, pero no se limitan a, detergentes, materiales para el lavado de vajillas, composiciones para fregar, limpiadores de ventanas y similares.

En estas preparaciones, los compuestos de la presente invención pueden usarse solos o en combinación con otras composiciones perfumantes, disolventes, adyuvantes y similares. La naturaleza y variedad de los otros ingredientes que también pueden emplearse son conocidas para aquellos expertos en la materia. Pueden emplearse muchos tipos de fragancias en la presente invención, siendo la única limitación la compatibilidad con los otros componentes que se emplean. Fragancias adecuadas incluyen, pero no se limitan a, frutas tales como almendra, manzana, cereza, uva, pera, piña, naranja, fresa, frambuesa; almizcle, aromas florales tales como de tipo lavanda, de tipo rosa, de tipo iris, de tipo clavel. Otros aromas agradables incluyen aromas herbales y boscosos derivados de olores a pino, píceas y otros olores forestales. Las fragancias también pueden derivar de diversos aceites, tales como aceites esenciales, o de materiales vegetales tales como menta piperita, hierbabuena y similares.

Se proporciona una lista de fragancias adecuadas en la patente de EE.UU. N.º 4.534.891, cuyo contenido se incorpora por referencia como si se expusiera en su totalidad. Se encuentra otra fuente de fragancias adecuadas en Perfumes, Cosmetics and Soaps, segunda edición, editado por W. A. Poucher, 1959. Entre las fragancias proporcionadas en este tratado están mimosa, aroma francés, chipre, ciclamen, helecho, gardenia, espinillo blanco, heliotropo, madreselva, jacinto, jazmín, lila, lirio, magnolia, mimosa, narciso, heno recién cortado, azahar, orquídea, Reseda, guisante de olor, trébol, nardo, vainilla, violeta, alhelí, y similares.

Los compuestos de la presente invención pueden usarse en combinación con un compuesto de fragancia complementario. El término "compuesto de fragancia complementario", como se usa en el presente documento, se define como un compuesto de fragancia seleccionado del grupo que consiste en 2-[(4-metilfenil)metil]-heptanal (Acalea), éster alílico de ácido iso-amiloxiacético (glicolato de alil-amilo), etilpropano-1,3-dioato de (3,3-dimetilciclohexil)etilo (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)oxi]exo-1-propanol (Bornafix), 1,2,3,5,6,7-hexahidro-1,1,2,3,3-pentametil-4H-inden-4-ona (Cashmeran), trimetilciclopentenilmetiloxabicyclooctano (Cassifix), 1,1-dimetoxi-3,7-dimetil-2,6-octadieno (citral-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 (Cyclacet), propinoato de 3A,4,5,6,7,7A-hexahidro-4,7-metano-1H-inden-5/6-ilo (Cyclaprop), 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-dimetilpropanonitrilo (Fleuranil), 3-(o/p-etilfenil)-2,2-dimetilpropionaldehído (Floralozone), tetrahidro-4-metil-2-(2-metilpropil)-2H-piran-4-ol (Floriffol), 1,3,4,6,7,8-hexahidro-4,6,6,7,8-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-tetrametil-2-naftalenil)-etan-1-ona (Iso E Super), 3-oxo-2-pentilciclopentanoacetato de metilo (Kharismal), 2,2,4-trimetil-4-fenil-butanonitrilo (Khusinil), 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 (Ocimene), orto-toliletanol (Peomosa), 3-metil-5-fenilpentanol (fenoxanol), 1-metil-4-(4-metil-3-pentenil)ciclohex-3-eno-1-carboxaldehído (precilomona 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), terpineol, 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), acetilcedreno (Vertofix), 3,6/4,6-dimetilciclohex-3-eno-1-carboxaldehído (Vertoliff) y (3Z)-1-[(2-metil-2-propenil)oxi]-3-hexeno (Vivaldie).

Los términos "composición de aroma" y "formulación de aroma" significan lo mismo y se refieren a una composición de consumo que produce un aroma agradable o deseado. La composición de aroma contiene un compuesto o una mezcla de compuestos. La composición de aroma de la presente invención es una composición de consumo que comprende un compuesto de la presente invención.

El término "alimento", como se usa en el presente documento, incluye tanto materiales ingeribles sólidos como líquidos para el hombre o animales, materiales que normalmente tienen, pero no necesitan, tener valor nutritivo. Así, los alimentos incluyen carnes, salsas de carne, sopas, alimentos precocinados, malta, bebidas alcohólicas y otras, leche y productos lácteos, marisco, que incluye pescado, crustáceos, moluscos y similares, caramelos, verduras, cereales, refrescos, tentempiés, comida para perros y gatos, otros productos veterinarios, y similares.

Los términos "composición de fragancia", "formulación de fragancia" y "composición de perfume" significan lo mismo y se refieren a una composición de consumo que es una mezcla de compuestos que incluyen, 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 composición de fragancia de la presente invención es una composición de consumo que comprende un compuesto de la presente invención. La composición 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.

El término "producto de fragancia" significa un producto de consumo que contiene un ingrediente de fragancia que se añade a la fragancia o enmascara el mal olor. Productos de fragancia pueden incluir, por ejemplo, perfumes, colonias, jabones en pastilla, 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 pelo para lavar, aclarar, acondicionar, decolorar, colorar, teñir y peinar, desodorantes y antitranspirantes, productos de higiene femenina tales como tampones y compresas, productos para el cuidado de bebés tales como pañales, baberos y toallitas, productos para el cuidado familiar tales como papeles higiénicos, pañuelos faciales, pañuelos de papel o toallitas de papel, productos para tejidos tales como suavizantes de tejidos y ambientadores, productos para el cuidado del aire tales como ambientadores y sistemas de suministro de fragancias, preparaciones cosméticas, agentes limpiadores y desinfectantes tales como detergentes, materiales para el lavado de vajillas, composiciones para fregar, limpiadores de cristal y metal tales como limpiadores de ventanas, limpiadores de encimeras, limpiadores de suelos y moquetas, limpiadores para el baño y aditivos blanqueantes, agentes de lavado tales como agentes multiusos, de gran potencia y para lavar a mano o lavar tejidos delicados que incluyen detergentes para la ropa y aditivos de aclarado, productos dentales y de higiene oral tales como pastas de dientes, geles de dientes, hilos dentales, limpiadores para dentaduras postizas, adhesivos para dentaduras postizas, dentífricos, blanqueantes dentales y enjuagues bucales, productos sanitarios y nutricionales y productos alimenticios tales como productos de tentempié 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 contiene un compuesto de la presente invención y además un compuesto de fragancia complementario como se ha definido anteriormente.

El término "mejorar" se entiende que significa elevar una composición de aroma o fragancia a un carácter más deseable. El término "potenciar" se entiende que significa hacer la composición de aroma o fragancia mayor en eficacia o proporcionar la composición de aroma o fragancia con un carácter mejorado. El término "modificar" se entiende que significa proporcionar la composición de aroma o fragancia con un cambio en el carácter.

El término "cantidad aceptable olfativa" se entiende que significa la cantidad de un compuesto en una composición de aroma o fragancia, en la que el compuesto contribuirá a sus características olfativas individuales. Sin embargo, el efecto olfativo de la composición de aroma o fragancia será la suma del efecto de cada uno de los ingredientes de aroma o fragancia. Así, el compuesto de la presente invención puede usarse para mejorar o potenciar las características de aroma de la composición de aroma o fragancia, o modificar la reacción olfativa contribuida por otros ingredientes en la composición. La cantidad aceptable olfativa puede variar dependiendo de muchos factores que incluyen otros ingredientes, sus cantidades relativas y el efecto olfativo que se desea.

Generalmente, la cantidad aceptable olfativa de los compuestos empleados en una composición de aroma es mayor que aproximadamente 0,1 partes por billón en peso, preferentemente de aproximadamente 1 parte por billón a aproximadamente 500 partes por millón en peso, más preferentemente de aproximadamente 10 partes por billón a aproximadamente 100 partes por millón en peso, incluso más preferentemente de aproximadamente 100 partes por billón a aproximadamente 50 partes por millón en peso. La cantidad aceptable olfativa de los compuestos empleados en una composición de fragancia varía de aproximadamente el 0,005 a aproximadamente el 70 por ciento en peso, preferentemente del 0,005 a aproximadamente el 50 por ciento en peso, más preferentemente de aproximadamente el 0,5 a aproximadamente el 25 por ciento en peso, e incluso más preferentemente de aproximadamente el 1 a aproximadamente el 10 por ciento en peso. Aquellos expertos en la materia serán capaces de emplear la cantidad deseada para proporcionar el efecto y la intensidad de aroma o fragancia deseados. Además de los compuestos de la presente invención, también pueden usarse otros materiales conjuntamente con la composición de aroma o fragancia para encapsular y/o suministrar el aroma o fragancia. Algunos materiales muy conocidos son, por ejemplo, pero no se limitan a, polímeros, oligómeros, otros no polímeros tales como tensioactivos, emulsionantes, lípidos que incluyen 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.

Además, los compuestos de la presente invención también pueden proporcionar rendimiento de ingredientes superior y poseer ventajas inesperadas en aplicaciones para contrarrestar el mal olor tales como transpiración corporal, olor ambiental tal como moho y mildiu, baño, y etc. Los compuestos de la presente invención eliminan sustancialmente la percepción de los malos olores y/o previenen la formación de tales malos olores, así, pueden utilizarse con un amplio número de productos funcionales.

Ejemplos de productos funcionales se proporcionan en el presente documento para ilustrar los diversos aspectos de la presente invención. Sin embargo, no pretenden limitar el alcance de la presente invención. Los productos funcionales pueden incluir, por ejemplo, una composición de ambientador convencional (o desodorante) tal como esprays ambientadores, un aerosol u otro spray, difusores de fragancia, una mecha u otro sistema líquido, o un sólido, por ejemplo velas o un base de cera como en pomos de olor y plásticos, polvos como en sobres o esprays o geles secos, como en barras de gel sólido, desodorantes para ropa como se aplican por aplicaciones de lavadora tales como en detergentes, polvos, líquidos, blanqueantes o suavizantes de tejidos, refrescantes de tejidos, esprays para sábanas, bloques para armarios, esprays en aerosol para armarios, o áreas de almacenamiento de ropa o en limpieza en seco para vencer las notas de disolvente residual en las ropas, accesorios de baños tales como toallas de papel, papeles higiénicos, compresas, toallitas húmedas, toallas desechables, pañales desechables y desodorantes para cubos de basura de pañales, limpiadores tales como desinfectantes y limpiadores de inodoros, productos cosméticos tales como antitranspirantes y desodorantes, desodorantes para el cuerpo general en forma

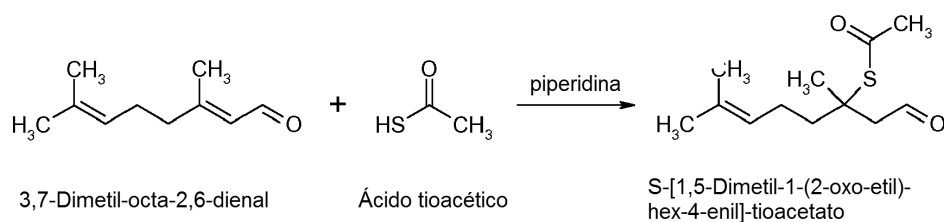
de polvos, aerosoles, líquidos o sólido, o productos de cuidado del pelo tales como espray para el pelo, acondicionadores, aclarados, colores y tintes para el pelo, ondas permanentes, depilatorios, alisadores del pelo, aplicaciones de cepillado del pelo tales como pomada, cremas y lociones, productos para el cuidado del pelo medicados 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 para los pies, líquidos o colonias, lociones para después del afeitado y corporales, o jabones y detergentes sintéticos tales como pastillas, líquidos, espumas o polvos, control del olor tal como durante procesos de fabricación, tal como en la industria del acabado de textiles y la industria de la impresión (tintas y papel), control de efluentes tal como en procesos implicados en la fabricación de pasta, procesamientos de corrales y carne, tratamiento de aguas residuales, bolsas de basura, o deposición de basura, o en el control del olor de productos como en mercancías acabadas textiles, mercancías acabadas de caucho o ambientadores para coches, productos agrícolas y para el cuidado de mascotas tales como perro y efluentes de gallineros y productos para el cuidado de animales domésticos y de mascotas tales como desodorantes, champú o agentes de limpieza, o material de cama de animales y en sistemas cerrados de aire a gran escala tales como auditorios, y metros y sistemas de transporte.

Así, se observará que la composición de la invención es normalmente una en la que el contrarrestante del mal olor está presente junto con un vehículo por medio del cual o a partir del cual el contrarrestante del mal olor puede introducirse en el espacio de aire en el que el mal olor está presente, o un sustrato sobre el que el mal olor se ha depositado. Por ejemplo, el vehículo puede ser un propulsor de aerosol tal como un clorofluorometano, o un sólido tal como una cera, material de 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 contrarrestante del mal olor está presente sobre un sustrato fibroso. En muchas composiciones de la invención también está presente un componente de fragancia que confiere una fragancia a la composición. Pueden emplearse todas las fragancias establecidas anteriormente.

Cantidad eficaz contrarrestante del mal olor se entiende que significa la cantidad del contrarrestante del mal olor inventivo empleado en un espacio de aire o un sustrato tal en el producto funcional que es organolépticamente eficaz para reducir un mal olor dado mientras que se reduce la intensidad combinada del nivel de olor, en el que el mal olor dado está presente en el espacio de aire o se ha depositado sobre un sustrato. La cantidad exacta de agente contrarrestante del mal olor empleada puede variar dependiendo del tipo de contrarrestante del mal olor, el tipo del vehículo empleado y el nivel de contrarresto del mal olor deseado. En general, la cantidad de agente contrarrestante del mal olor presente es la dosis habitual requerida para obtener el resultado deseado. Tal dosis es conocida para el profesional habitual en la materia. En una realización preferida, cuando se usa conjuntamente con productos funcionales sólidos o líquidos malolientes, por ejemplo, jabón y detergente, los compuestos de la presente invención pueden estar presentes en una cantidad que oscila de aproximadamente el 0,005 a aproximadamente el 50 por ciento en peso, preferentemente de aproximadamente el 0,01 a aproximadamente el 20 por ciento en peso, más preferentemente de aproximadamente el 0,05 a aproximadamente el 10 por ciento en peso e incluso más preferentemente de aproximadamente el 0,1 a aproximadamente el 5 por ciento en peso. Cuando se usa en un espacio de aire que está conjuntamente con productos funcionales gaseosos malolientes, los compuestos de la presente invención pueden estar presentes en una cantidad que oscila de aproximadamente 0,2 mg a aproximadamente 2 g por metro cúbico de aire, más preferentemente de aproximadamente 0,4 mg a aproximadamente 0,8 g por metro cúbico de aire, más preferentemente de aproximadamente 2 mg a aproximadamente 0,4 g por metro cúbico de aire e incluso más preferentemente de aproximadamente 4 mg a aproximadamente 0,2 g por metro cúbico de aire.

Lo siguiente se proporciona como realizaciones específicas de la presente invención. Otras modificaciones de la presente invención serán rápidamente evidentes para aquellos expertos en la materia. Se entiende que tales modificaciones están dentro del alcance de la presente invención. Como se usa en el presente documento, todos los porcentajes son porcentaje en peso, a menos que se indique lo contrario, ppb se entiende que representa partes por billón, ppm se entiende que representa partes por millón, l se entiende que es litro, ml se entiende que es mililitro, kg se entiende que es kilogramo, g se entiende que es gramo, mol se entiende que es mol y M se entiende que es molar. IFF como se usa en los ejemplos se entiende que significa International Flavors & Fragrances Inc., Nueva York, NY, EE.UU.

### Ejemplo I





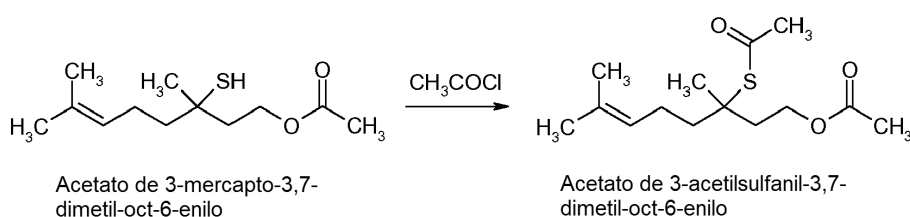


temperatura se mantuvo por debajo de 10 °C. Después de completarse la adición, se retiró el baño de refrigeración. La mezcla de reacción se agitó a temperatura ambiente durante 30 minutos adicionales. Se produjo el producto intermedio S-[1-(2-hidroxi-etil)-1,5-dimetil-hex-4-enil]-tioacetato (Estructura 61), pero se convirtió instantáneamente en el producto acetato de 3-mercapto-3,7-dimetil-oct-6-enilo. La mezcla de reacción se vertió en disolución de cloruro de amonio (100 ml) y se transfirió a un embudo de decantación y luego se extrajo con metil *t*-butil éter (200 ml). La fase orgánica se lavó con salmuera dos veces. El disolvente se eliminó a vacío. El bruto se purificó por cromatografía en columna de sílice usando eluyente de acetato de etilo/hexanos (relación de peso de 10:90) proporcionando el producto final acetato de 3-mercapto-3,7-dimetil-oct-6-enilo (8,2 g).

5  
10  
<sup>1</sup>H RMN (CDCl<sub>3</sub>, 400-MHz): 5,00-5,14 ppm (m, 1H), 4,21-4,30 ppm (m, 2H), 2,07-2,15 ppm (m, 2H), 2,04 ppm (s, 3H), 1,92-1,96 ppm (m, 2H), 1,68 ppm (s, 3H), 1,62 ppm (s, 3H), 1,56-1,70 ppm (m, 3H), 1,38 ppm (s, 3H)

Se describió que el acetato de 3-mercapto-3,7-dimetil-oct-6-enilo tenía notas organolépticas de pomelo jugoso y mandarina.

#### Ejemplo IV

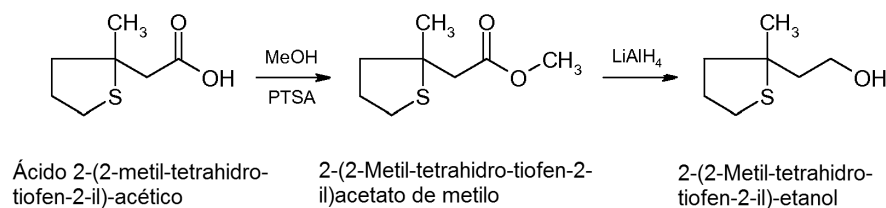


15 **Preparación de acetato de 3-acetilsulfanil-3,7-dimetil-oct-6-enilo (Estructura 65):** Se disolvieron acetato de 3-mercapto-3,7-dimetil-oct-6-enilo (obtenido como antes en el Ejemplo III, 4,61 g, 20 mmoles) y trietilamina ((CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>N) (2,23 g, 22 mmoles) en diclorometano (40 ml). La temperatura de la mezcla de reacción se redujo a 0 °C con un baño de refrigeración. Se añadió gota a gota cloruro de acetilo (CH<sub>3</sub>COCl) (1,73 g, 22 mmoles) a la mezcla de reacción. Después de completarse la adición, se retiró el baño de refrigeración. La mezcla de reacción se agitó a temperatura ambiente durante 2 horas adicionales, se transfirió a un embudo de decantación y entonces se lavó con salmuera (10 ml), ácido clorhídrico (1 M, 10 ml) y salmuera (10 ml). El disolvente se eliminó a vacío. El bruto se purificó sobre una columna de sílice usando acetato de etilo/hexanos proporcionando el producto acetato de 3-acetilsulfanil-3,7-dimetil-oct-6-enilo (4,9 g).

20  
25  
<sup>1</sup>H RMN (CDCl<sub>3</sub>, 500-MHz): 5,06 ppm (m, 1H), 4,17 ppm (t, J=7,3 Hz, 2H), 2,24 ppm (s, 3H), 2,22-2,28 ppm (m, 1H), 2,09-2,18 ppm (m, 1H), 2,03 ppm (s, 3H), 1,92-2,07 ppm (m, 2H), 1,77-1,87 ppm (m, 1H), 1,67 ppm (s, 3H), 1,64-1,72 ppm (m, 1H), 1,60 ppm (s, 3H), 1,44 ppm (s, 3H)

Se describió que el acetato de 3-acetilsulfanil-3,7-dimetil-oct-6-enilo tenía notas organolépticas sulfurosas, tropicales y de naranja madura.

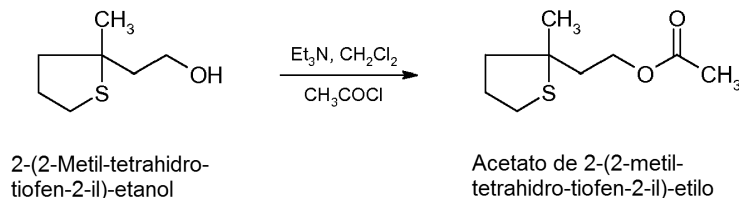
#### Ejemplo V



30  
35  
40  
**Preparación de 2-(2-metil-tetrahidro-tiofen-2-il)-etanol (Estructura 1):** Se disolvió ácido 2-(2-metil-tetrahidro-tiofen-2-il)-acético (5,1 g, 32 mmoles), preparado según el procedimiento descrito previamente (véase, Bunce, et al. J. Org. Chem. (1992) 57:1727-1733), en metanol (MeOH) (100 ml). Se añadió ácido *p*-toluenosulfónico monohidratado (PTSA) (0,6 g, 3 mmoles) y la mezcla de reacción se sometió a reflujo durante 3 horas. El disolvente se eliminó a vacío y entonces se añadió acetato de etilo (EtOAc) (100 ml). La fase orgánica se lavó con disolución de bicarbonato sódico (5 %, 100 ml) seguido de salmuera (100 ml), y se secó sobre sulfato de magnesio (MgSO<sub>4</sub>). Filtración y concentración adicionales proporcionaron el 2-(2-metil-tetrahidro-tiofen-2-il)acetato de metilo en bruto (5,0 g). Se disolvió hidruro de litio y aluminio (LiAlH<sub>4</sub>) (1,1 g, 29 mmoles) en THF (100 ml) y se cargó en un matraz de reacción. Bajo N<sub>2</sub>, se añadió gota a gota una disolución del 2-(2-metil-tetrahidro-tiofen-2-il)acetato de metilo en bruto (5,0 g, 29 mmoles) en THF (40 ml) al matraz de reacción. Se dejó entonces que la mezcla de reacción se agitara durante 2 horas adicionales a temperatura ambiente. La mezcla resultante se añadió a una disolución de cloruro de amonio (NH<sub>4</sub>Cl) (10 %, 200 ml) y se extrajo con éter (200 ml). La fase orgánica se lavó con salmuera (100 ml) y se secó sobre MgSO<sub>4</sub>. La filtración, concentración y purificación adicional con cromatografía en columna de sílice usando acetato de etilo/hexanos proporcionó el producto 2-(2-metil-tetrahidro-tiofen-2-il)-etanol (3,8 g).

$^1\text{H}$  RMN ( $\text{CDCl}_3$ , 500-MHz): 3,74-3,89 (m, 2H), 2,87-3,03 (m, 2H), 2,39 (s a, 1H), 2,00-2,16 (m, 2H), 1,71-1,98 (m, 4H), 1,41 (s, 2H), 1,36-1,44 (m, 1H)

### Ejemplo VI

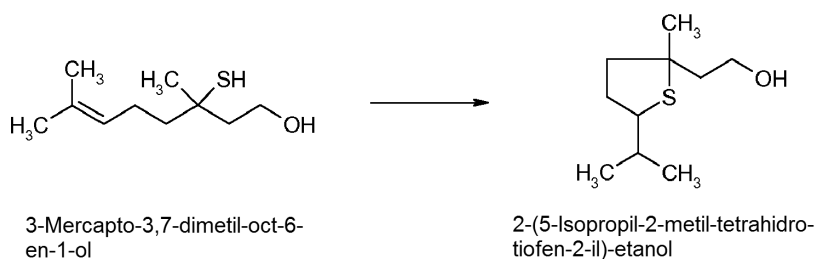


- 5 **Preparación de acetato de 2-(2-metil-tetrahidro-tiofen-2-il)-etilo (Estructura 7):** Se disolvieron 2-(2-metil-tetrahidro-tiofen-2-il)-etanol (obtenido como antes en el Ejemplo V, 3,8 g, 26 mmoles) y trietilamina ( $\text{Et}_3\text{N}$ ) (3,2 g, 32 mmoles) en diclorometano ( $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ ) (100 ml), se cargaron en un matraz de reacción y se enfriaron a 0 °C. Con agitación, se añadió gota a gota una disolución de cloruro de acetilo ( $\text{CH}_3\text{COCl}$ ) (2,5 g, 32 mmoles) en  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$  (20 ml) al matraz de reacción. La mezcla de reacción se agitó entonces durante 2 horas adicionales a temperatura ambiente. La mezcla resultante se transfirió a un embudo de decantación y se lavó con una disolución de  $\text{NH}_4\text{Cl}$  (10 %, 100 ml), una disolución de  $\text{NaHCO}_3$  (5 %, 100 ml), salmuera (100 ml) y luego se secó sobre  $\text{MgSO}_4$ . La filtración, concentración y purificación adicional con cromatografía en columna de sílice usando acetato de etilo/hexanos proporcionó el producto acetato de 2-(2-metil-tetrahidro-tiofen-2-il)-etilo.

15  $^1\text{H}$  RMN ( $\text{CDCl}_3$ , 400-MHz): 4,17-4,29 (m, 2H), 2,88-3,01 (m, 2H), 1,98-2,12 (m, 4H), 2,05 (s, 3H), 1,73-1,89 (m, 2H), 1,42 (s, 3H).

Se describió que el acetato de 2-(2-metil-tetrahidro-tiofen-2-il)-etilo tenía notas organolépticas ligeramente afrutadas, ligeramente tropicales, cítricas, florales, verdes y sulfurosas.

### Ejemplo VII

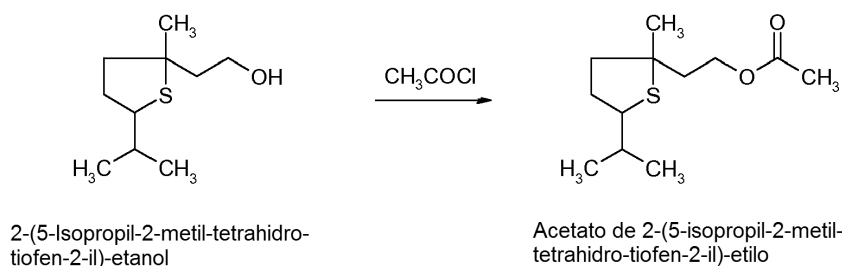


- 20 **Preparación de 2-(5-isopropil-2-metil-tetrahidro-tiofen-2-il)-etanol (Estructura 10):** Se sometió 3-mercapto-3,7-dimetil-oct-6-en-1-ol (obtenido como antes en el Ejemplo II, 8,3 g) a ciclación interna a temperatura ambiente durante 10 días proporcionando 2-(5-isopropil-2-metil-tetrahidro-tiofen-2-il)-etanol (8,0 g).

$^1\text{H}$  RMN ( $\text{CDCl}_3$ , 500-MHz): 3,72-3,86 ppm (m, 2H), 3,24-3,32 ppm (m, 1H), 2,59 ppm (a, 1H), 1,56-2,18 ppm (m, 7H), 1,41 ppm (s, ~ 50% de 3H), 1,38 ppm (s, ~ 50% de 3H), 0,92-0,98 ppm (m, 6H)

- 25 Se describió que el 2-(5-isopropil-2-metil-tetrahidro-tiofen-2-il)-etanol tenía notas organolépticas de lima, tropicales y verdes de hoja.

### Ejemplo VIII



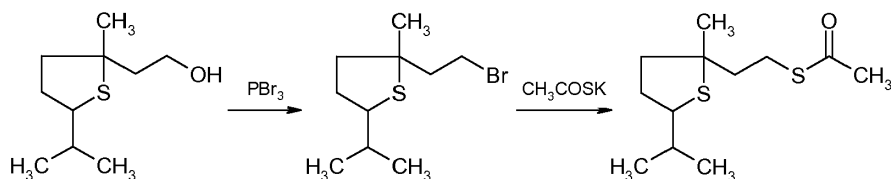
- 30 **Preparación de acetato de 2-(5-isopropil-2-metil-tetrahidro-tiofen-2-il)-etilo (Estructura 16):** Se cargó un matraz de 50 ml equipado con un agitador magnético y un termómetro con 2-(5-isopropil-2-metil-tetrahidro-tiofen-2-il)-etanol (obtenido como antes en el Ejemplo VII, 600 mg, 3,2 mmoles) y diclorometano ( $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ ) (5 ml). La mezcla de reacción se enfrió a 0 °C. Se añadió trietilamina (500 mg, 4,8 mmoles) seguido de cloruro de acetilo (280 mg, 3,5 mmoles). Después de una hora, se añadió ácido clorhídrico (1 M) (5 ml) y la reacción se extrajo dos veces con

diclorometano. La mezcla de reacción se lavó entonces con agua (10 ml) y salmuera (10 ml) y se secó sobre sulfato de magnesio anhidro (MgSO<sub>4</sub>). El disolvente se evaporó y el producto en bruto se purificó por cromatografía en columna de sílice usando eluyente de acetato de etilo/hexanos (relación de peso de 95:5). El producto acetato de 2-(5-isopropil-2-metil-tetrahydro-tiofen-2-il)-etilo se obtuvo como un aceite (500 mg).

- 5 <sup>1</sup>H RMN (CDCl<sub>3</sub>, 500-MHz): 4,12-4,33 ppm (m, 2H), 3,17-3,36 ppm (m, 1H), 2,07-2,20 ppm (m, 1H), 2,04 ppm (s, 3H), 1,64-2,03 ppm (m, 6H), 1,42 ppm (s, ~ 50% de 3H), 1,40 ppm (s, ~ 50% de 3H), 0,91-0,98 ppm (m, 6H)

Se describió que el acetato de 2-(5-isopropil-2-metil-tetrahydro-tiofen-2-il)-etilo tenía notas organolépticas tropicales, de fresa y pimienta verde.

### Ejemplo IX



2-(5-Isopropil-2-metil-tetrahydro-tiofen-2-il)-etanol

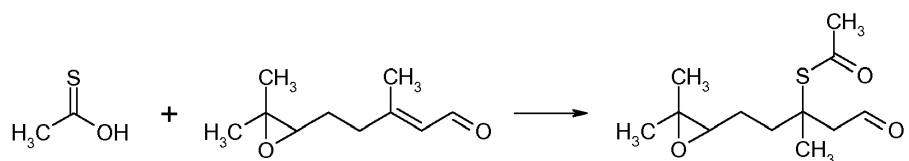
S-[2-(5-Isopropil-2-metil-tetrahydro-tiofen-2-il)-etil]-tioacetato

- 10 **Preparación de S-[2-(5-isopropil-2-metil-tetrahydro-tiofen-2-il)-etil]-tioacetato (Estructura 52):** Se añadió gota a gota tribromuro de fósforo (PBr<sub>3</sub>) (19 g, 70 mmoles) a 2-(5-isopropil-2-metil-tetrahydro-tiofen-2-il)-etanol (40 g, 0,212 moles) a 10 °C y la mezcla de reacción se envejeció durante 1 hora. Entonces se añadieron dietil éter ((C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>)<sub>2</sub>O) (100 ml) y salmuera (50 ml). La fase orgánica se separó y se concentró a vacío, y posteriormente se disolvió en dimetilformamida (DMF) (250 ml) y se combinó con tioacetato de potasio (CH<sub>3</sub>COSK) (32,7 g, 0,287 moles). La mezcla de reacción se calentó a 80 °C durante 1 hora y luego se enfrió hasta temperatura ambiente. Se añadió agua (400 ml) y la mezcla acuosa se extrajo con dietil éter. La fase orgánica se concentró a vacío y se destiló por destilación fraccionada proporcionando S-[2-(5-isopropil-2-metil-tetrahydro-tiofen-2-il)-etil]-tioacetato (19 g).

- 20 <sup>1</sup>H RMN (CDCl<sub>3</sub>, 500-MHz): 3,17-3,37 (m, 1H), 2,83-3,08 (m, 2H), 2,32 (s, 45% de 3H), 2,32 (s, 55% of 3H), 2,08-2,20 (m, 1H), 1,60-2,02 (m, 6H), 1,44 (s, 45% of 3H), 1,41 (s, 55% de 3H), 0,90-0,99 (m, 6H)

Se describió que el acetato de 2-(5-isopropil-2-metil-tetrahydro-tiofen-2-il)-etilo tenía notas organolépticas poderosas, tropicales, afrutadas, ácidas, frescas, vegetativas, de azúcar quemado, de nuez, de sésamo y beicon.

### Ejemplo X



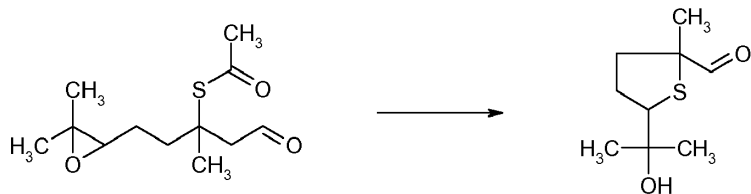
Ácido tioacético

5-(3,3-Dimetil-oxiran-2-il)-3-metil-pent-2-enal

S-(1-(3,3-Dimetil-oxiran-2-il)-3-metil-5-oxo-pentan-3-il)etanotioato

- 25 **Preparación de S-(1-(3,3-dimetil-oxiran-2-il)-3-metil-5-oxo-pentan-3-il)etanotioato:** Se combinaron ácido tioacético (4,0 g, 53 mmoles) y 5-(3,3-dimetil-oxiran-2-il)-3-metil-pent-2-enal (8,9 g, 53 mmoles) y se agitaron a 60 °C durante 5 horas. La mezcla de reacción se lavó con una disolución de NaHCO<sub>3</sub> (5 %, 80 ml) y se secó sobre MgSO<sub>4</sub>. La purificación con cromatografía en columna de sílice usando acetato de etilo/hexanos (relación de peso de 1:3) proporcionó S-(1-(3,3-dimetil-oxiran-2-il)-3-metil-5-oxo-pentan-3-il)etanotioato (1,0 g).

- 30 <sup>1</sup>H RMN (CDCl<sub>3</sub>, 400-MHz): 9,79-9,82 (m, 1H), 3,02-3,20 (m, 1H), 2,84-2,95 (m, 1H), 2,64-2,73 (m, 1H), 2,28 (s, 50% de 3H), 2,27 (s, 50% de 3H), 2,02-2,17 (m, 1H), 1,80-1,95 (m, 1H), 1,50-1,72 (m, 2H), 1,53 (s, 50% de 3H), 1,50 (s, 50% de 3H), 1,30 (s, 3H), 1,27 (s, 50% de 3H), 1,26 (s, 50% de 3H)

**Ejemplo XI**

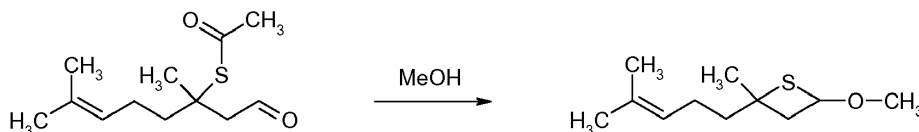
S-(1-(3,3-Dimetil-oxiran-2-il)-3-metil-5-oxo-pentan-3-il)etanotioato

5-(1-Hidroxi-1-metil-etil)-2-metil-tetrahidro-tiofeno-2-carbaldehído

**Preparación de 5-(1-hidroxi-1-metil-etil)-2-metil-tetrahidro-tiofeno-2-carbaldehído (Estructura 34a):** Se disolvió S-(1-(3,3-dimetil-oxiran-2-il)-3-metil-5-oxo-pentan-3-il)etanotioato (obtenido como antes en el Ejemplo X, 1,0 g, 4,1 mmoles) en THF (100 ml) y se enfrió a 0 °C. Se añadió gota a gota hidróxido sódico acuoso (NaOH) (0,5 M, 8 ml) y la mezcla de reacción se agitó a 0 °C durante aproximadamente 10 minutos. La reacción se lavó con una disolución de NH<sub>4</sub>Cl (10 %, 50 ml) y se secó sobre MgSO<sub>4</sub>. El disolvente se eliminó a vacío. La purificación con cromatografía en columna de sílice usando acetato de etilo/hexanos (relación de peso de 1:3) proporcionó el producto 5-(1-hidroxi-1-metil-etil)-2-metil-tetrahidro-tiofeno-2-carbaldehído (0,6 g).

<sup>1</sup>H RMN (CDCl<sub>3</sub>, 400-MHz): 9,82 (d, J=2,0 Hz, 50% de 1H), 9,81 (d, J=2,0 Hz, 50% de 1H), 3,62-3,84 (m, 1H), 2,60-2,90 (m, 2H), 2,21-2,49 (m, 1H), 1,71-2,18 (m, 4H), 1,56 (s, 50% de 3H), 1,49 (s, 50% de 3H), 1,25 (s, 50% de 3H), 1,23 (s, 50% de 3H), 1,21 (s, 50% de 3H), 1,20 (s, 50% de 3H)

Se describió que el 5-(1-hidroxi-1-metil-etil)-2-metil-tetrahidro-tiofeno-2-carbaldehído tenía notas organolépticas frescas, verdes, herbales y terrosas, pero sulfurosas y débiles.

**Ejemplo XII**

S-[1,5-Dimetil-1-(2-oxo-etil)-hex-4-enil]-tioacetato

4-Metoxi-2-metil-2-(4-metil-pent-3-enil)-tietano

**Preparación de 4-metoxi-2-metil-2-(4-metil-pent-3-enil)-tietano (Estructura 72):** Se disolvió S-[1,5-dimetil-1-(2-oxo-etil)-hex-4-enil]-tioacetato (obtenido como antes en el Ejemplo I, 5 g, 21,9 mmoles) en metanol (CH<sub>3</sub>OH) (100 ml) y se enfrió a 0 °C con un baño de refrigeración. Se disolvió hidróxido potásico (KOH) (1,48 g, 26,3 mmoles) en agua (5 ml) y se añadió gota a gota a la mezcla de reacción. Después de completarse la adición, la mezcla de reacción se agitó a 0 °C durante 10 minutos, se transfirió a un embudo de decantación y se añadió ácido clorhídrico (1 M, 50 ml). La mezcla de reacción se extrajo con metil *t*-butil éter (100 ml). La fase orgánica se lavó con salmuera dos veces y se secó con sulfato de magnesio. El disolvente se eliminó a vacío. El bruto se purificó por cromatografía en columna de sílice usando eluyente de acetato de etilo/hexanos (relación de peso de 95:5) proporcionando 4-metoxi-2-metil-2-(4-metil-pent-3-enil)-tietano (2,1 g).

<sup>1</sup>H RMN (CDCl<sub>3</sub>, 500-MHz): 5,12-5,18 ppm (m, 1H), 5,09-5,13 ppm (m, ~40% de 1H), 5,00-5,04 ppm (m, ~60% de 1H), 3,27 ppm (s, ~60% de 3H), 3,25 ppm (s, ~40% de 3H), 3,05 ppm (dd, J=12,8 Hz, 7,1 Hz, ~60% de 1H), 2,95 ppm (dd, J=12,7 Hz, 7,3 Hz, ~40% de 1H), 2,69 ppm (dd, J=12,7 Hz, 4,3 Hz, ~40% de 1H), 2,60 ppm (dd, J=12,8, 3,6 Hz, ~60% de 1H), 1,93-2,13 ppm (m, 2H), 1,72-1,93 ppm (m, 2H), 1,69 ppm (s, ~60% de 3H), 1,68 ppm (s, ~40% de 3H), 1,63 ppm (s, ~60% de 3H), 1,62 ppm (s, ~40% de 3H), 1,57 ppm (s, ~60% de 3H), 1,54 ppm (s, ~40% de 3H)

Se describió que el 4-metoxi-2-metil-2-(4-metil-pent-3-enil)-tietano tenía notas organolépticas de limón, lima y a quemado dulces.

**Ejemplo XIII**

Además, los siguientes compuestos fueron similarmente preparados según los procedimientos descritos en lo anterior.

Se describió que el 2-(5-isopropil-2-metil-2,3-dihidro-tiofen-2-il)-etanol (Estructura 12) tenía notas organolépticas de cáscara de pomelo, ácidas, cáscara de cítrico, verdes, frescas y florales.

## ES 2 686 519 T3

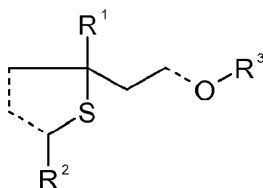
Se describió que el acetato de 2-[5-(1-hidroxil-1-metil-etil)-2-metil-tetrahidro-tiofen-2-il]-etilo (Estructura 34b) tenía notas organolépticas verdes de hoja pero débiles y sulfúricas.

Se describió que el acetato de 2-(5-isopropenil-2-metil-tetrahidro-tiofen-2-il)-etilo (Estructura 32) tenía notas organolépticas de hoja, menta, frescas, jugosas pero terrosas.

- 5 Se describió que el 2-(5-isopropil-2-metil-tetrahidro-tiofen-2-il)-etanotiol (Estructura 43) tenía notas organolépticas de hoja, champiñón, dulces, tostadas pero sulfurosas y crudas.

REIVINDICACIONES

1. Un compuesto representado por la fórmula I:

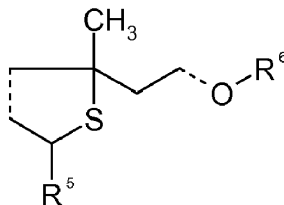


Fórmula I

en la que

- 5 R¹ es un grupo alquilo C₁-C₄;
- R² está seleccionado del grupo que consiste en hidrógeno, un grupo alquilo C₁-C₄ que opcionalmente contiene un grupo hidroxilo y un grupo alquenilo C₁-C₄ que opcionalmente contiene un grupo hidroxilo;
- R³ está seleccionado del grupo que consiste en hidrógeno, un grupo alquilo C₁-C₄ y -C(O)R⁴, en la que R⁴ está seleccionado del grupo que consiste en hidrógeno y un grupo alquilo C₁-C₄;
- 10 una de las líneas de puntos en el anillo representa un doble enlace carbono-carbono opcional; y la línea de puntos en la cadena lateral representa un doble enlace carbono-oxígeno opcional,
- con la condición de que, cuando el doble enlace carbono-oxígeno opcional esté presente, R³ está ausente.

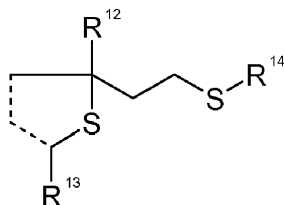
2. El compuesto de la reivindicación 1 representado por la fórmula III:



Fórmula III

- 15 en la que R⁵ representa hidrógeno, isopropilo o 1-hidroxi-1-metil-etilo; R⁶ representa hidrógeno; la línea de puntos en el anillo representa un doble enlace carbono-carbono opcional; y la línea de puntos en la cadena lateral representa un doble enlace carbono-oxígeno opcional,
- con la condición de que, cuando el doble enlace carbono-oxígeno opcional esté presente, R⁶ está ausente; y cuando R⁵ representa un grupo isopropilo y el doble enlace carbono-carbono opcional está ausente, el doble enlace carbono-oxígeno opcional está presente y R⁶ está ausente.
- 20

3. Un compuesto representado por la fórmula VI:



Fórmula VI

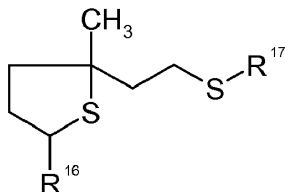
en la que

- R¹² es un grupo alquilo C₁-C₄;
- 25 R¹³ está seleccionado del grupo que consiste en hidrógeno, un grupo alquilo C₁-C₄ que opcionalmente contiene un grupo hidroxilo y un grupo alquenilo C₁-C₄ que opcionalmente contiene un grupo hidroxilo;

R<sup>14</sup> está seleccionado del grupo que consiste en hidrógeno, un grupo alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub> y -C(O)R<sup>5</sup>, en la que R<sup>15</sup> está seleccionado del grupo que consiste en hidrógeno y un grupo alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>; y

una de las líneas de puntos representa un doble enlace carbono-carbono opcional.

4. El compuesto de la reivindicación 3 representados por la fórmula VIII:



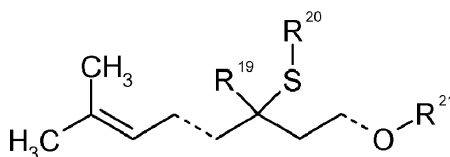
Fórmula VIII

en la que R<sup>16</sup> representa hidrógeno, isopropilo o 1-hidroxi-1-metil-etilo; y

R<sup>17</sup> está seleccionado del grupo que consiste en un grupo alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub> y -C(O)R<sup>18</sup>,

en la que R<sup>18</sup> está seleccionado del grupo que consiste en hidrógeno y un grupo alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>.

5. Un compuesto representado por la fórmula IX:



Fórmula IX

en la que

R<sup>19</sup> es un grupo alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>;

R<sup>20</sup> está seleccionado del grupo que consiste en hidrógeno y -C(O)R<sup>22</sup>, en la que R<sup>22</sup> está seleccionado del grupo que consiste en hidrógeno y un grupo alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>;

R<sup>21</sup> está seleccionado del grupo que consiste en hidrógeno, un grupo alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub> y -C(O)R<sup>23</sup>, en la que R<sup>23</sup> está seleccionado del grupo que consiste en hidrógeno y un grupo alquilo C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>;

las líneas de puntos representan un doble enlace carbono-carbono opcional y un doble enlace carbono-oxígeno opcional,

con la condición de que, cuando el doble enlace carbono-oxígeno opcional esté presente, R<sup>21</sup> está ausente.

6. El compuesto de la reivindicación 5 seleccionado del grupo que consiste en:

3-mercapto-3,7-dimetil-oct-6-en-1-ol;

3-mercapto-3,7-dimetil-oct-6-enal;

S-[1-(2-hidroxi-etil)-1,5-dimetil-hex-4-enil]-tioacetato; y

acetato de 3-acetilsulfanil-3,7-dimetil-oct-6-enilo.

7. Una composición de aroma que comprende una cantidad aceptable olfativa del compuesto de cualquiera de las reivindicaciones precedentes.

8. La composición de aroma de la reivindicación 7 que comprende además un material seleccionado del grupo que consiste en un alimento, un chicle, un producto dental, un producto de higiene oral y una especialidad farmacéutica.

9. La composición de aroma de la reivindicación 7, en la que la cantidad aceptable olfativa es de aproximadamente 1 parte por billón a aproximadamente 1000 partes por millón en peso; o

en la que la cantidad aceptable olfativa es de aproximadamente 10 partes por billón a aproximadamente 100 partes por millón en peso; o

en la que la cantidad aceptable olfativa es de aproximadamente 100 partes por billón a aproximadamente 10 partes por millón en peso.

10. Un método de mejora, potenciamiento o modificación de una composición de aroma mediante la adición de una cantidad aceptable olfativa del compuesto de cualquiera de las reivindicaciones precedentes.

5 11. Una composición de fragancia que comprende una cantidad aceptable olfativa del compuesto de cualquiera de las reivindicaciones precedentes.

10 12. La composición de fragancia de la reivindicación 11 que comprende además un material seleccionado del grupo que consiste en un polímero y un no polímero, y opcionalmente o preferentemente en la que el no polímero está seleccionado del grupo que consiste en un oligómero, un tensioactivo, un emulsionante, 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.

13. La composición de fragancia de la reivindicación 12, parte opcional o preferible, en la que el material de superficie sólida está seleccionado del grupo que consiste en zeolita y sílice.

15 14. La composición de fragancia de la reivindicación 11, en la que la cantidad aceptable olfativa es de aproximadamente el 0,005 a aproximadamente el 50 por ciento en peso de la composición de fragancia; o

en la que la cantidad aceptable olfativa es de aproximadamente el 0,5 a aproximadamente el 25 por ciento en peso de la composición de fragancia; o

en la que la cantidad aceptable olfativa es de aproximadamente el 1 a aproximadamente el 10 por ciento en peso de la composición de fragancia.

20 15. Un método de mejora, potenciamiento o modificación de una composición de fragancia mediante la adición de una cantidad aceptable olfativa del compuesto de cualquiera de las reivindicaciones precedentes.