(19) OFICINA ESPAÑOLA DE PATENTES Y MARCAS

ESPAÑA

(11) Número de publicación: **2 694 042**

(51) Int. Cl.:

A61K 8/49 (2006.01)
C07D 309/18 (2006.01)
C11B 9/00 (2006.01)
A61Q 13/00 (2006.01)

(12) TRADUCCIÓN DE PATENTE EUROPEA T3

(96) Fecha de presentación y número de la solicitud europea: **23.03.2016** **E 16162098 (4)**

(97) Fecha y número de publicación de la concesión europea: **05.09.2018** **EP 3072501**

(54) Título: **Compuesto organoléptico**

(30) Prioridad:

27.03.2015 US 201562139154 P

(45) Fecha de publicación y mención en BOPI de la traducción de la patente:
17.12.2018

(73) Titular/es:

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

(72) Inventor/es:

CLOSSON, ADAM P.;
MERTZ, GARY;
LEVORSE, JR., ANTHONY T.;
NARULA, ANUBHAV P.S.;
MONTELEONE, MICHAEL G. y
COLANDREA, VINCENT

(74) Agente/Representante:

LEHMANN NOVO, María Isabel

ES 2 694 042 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

Compuesto organoléptico

Campo de la invención

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

Antecedentes de la invención

Existe una necesidad continua en la industria de las fragancias de proporcionar nuevas sustancias químicas para dar a los perfumistas y a otras personas la capacidad para crear nuevas fragancias para perfumes, colonias y productos para el cuidado personal. Los expertos en la técnica apreciarán cómo las diferencias en la estructura química de la molécula pueden dar como resultado diferencias significativas en el olor, notas y características de una molécula. Estas variaciones, y la necesidad continua de descubrir y usar las nuevas sustancias químicas en el desarrollo de nuevas fragancias, permiten a los perfumistas aplicar los nuevos compuestos para crear nuevas fragancias.

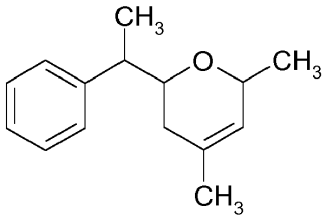
Los compuestos de dihidropirano son materiales de partida importantes para las fragancias (véase la patente U.S. nº 5,162,551). Por ejemplo, el documento WO 2008/065181 se refiere a derivados de pirano y a su uso en saborizantes y fragancias. Los fenil-dihidropiranos, tales como 3,6-dihidro-4-metil-2-fenil-2H-pirano, se han usado desde hace mucho tiempo para preparar fenilpentanoles, tales como 3-metil-5-fenilpentanol, que es un material de fragancia valioso (véase la patente suiza nº 655932; las solicitudes chinas n°s 102731260 y 104876800). Estos compuestos de dihidropirano no se consideran ellos mismos como fragancias funcionales. Consistentemente, está bien reconocido por la industria del perfume que mientras algunos compuestos de dihidropirano, tales como 6-(2-metil-1-propenil)-2,4,6-trimetil-2H,5H-dihidropirano, 2,4-dimetil-6-n-butil-2,3-dihidro-6H-pirano, 2,4-dimetil-6-n-butil-5,6-dihidro-2H-pirano, 2-metil-4-metilen-n-butiltetrahidropirano y 3,6-dihidro-4,6-dimetil-2-fenil-2H-pirano, se han dado a conocer como fragancias funcionales, la utilidad en la perfumería no es una propiedad común entre todos los dihidropiranos (véanse las patentes U.S. n°s 3.309.276 y 3.681.263). Muchos compuestos de dihidropirano se prepararon e investigaron, aunque no se pudo establecer ninguna función de fragancia (véanse las patentes U.S. n°s 3.309.276, 3.681.263, 4.070.491 y 5.162.551).

De este modo, el experto en la técnica apreciará que descubrir un compuesto de dihidropirano adecuado para uso como fragancia es impredecible. Además, pequeñas diferencias estructurales entre los dihidropiranos pueden dar como resultado compuestos con propiedades de fragancia distintas, que son muy valiosas. Permiten a los perfumistas crear perfumes con caracteres únicos y distinguidos.

Sumario de la invención

La presente invención proporciona un nuevo compuesto de dihidropirano y su uso ventajoso inesperado potenciando, mejorando o modificando la fragancia de perfumes, colonias, agua de baño, productos para el cuidado de tejidos, productos personales, y similares.

Más específicamente, la presente invención se refiere a 4,6-dimetil-2-(1-fenil-etil)-3,6-dihidro-2H-pirano, representado por la Estructura 1 expuesta a continuación:



Estructura 1

Otra realización de la presente invención se refiere a una composición de fragancia que comprende una cantidad olfativa aceptable de 4,6-dimetil-2-(1-fenil-etil)-3,6-dihidro-2H-pirano.

Otra realización de la presente invención se refiere a un producto de fragancia que comprende 4,6-dimetil-2-(1-fenil-etil)-3,6-dihidro-2H-pirano.

Otra realización de la presente invención se refiere a un método para mejorar, potenciar o modificar una formulación de fragancia mediante la adición de una cantidad olfativa aceptable de 4,6-dimetil-2-(1-fenil-etil)-3,6-dihidro-2H-pirano.

4,6-Dimetil-2-(1-fenil-etil)-3,6-dihidro-2H-pirano de la presente invención posee fuertes notas boscosas, aromáticas, herbáceas, terrosas, verdes, florales y pulverulentas, con un nivel elevado inesperado de complejidad.

Estas y otras realizaciones de la presente invención serán manifiestas al leer la siguiente memoria descriptiva.

Descripción detallada de la invención

Aquellos con pericia en la técnica reconocerán que 4,6-dimetil-2-(1-fenil-etil)-3,6-dihidro-2H-pirano de la presente invención puede tener un número de isómeros ópticos. Se pretende aquí que el compuesto descrito aquí incluya mezclas isoméricas ópticas, así como isómeros ópticos individuales, que se pueden separar usando técnicas conocidas por aquellos que tienen pericia en la técnica. Tales técnicas incluyen cromatografía, tal como cromatografía de líquidos de altas prestaciones, denominada HPLC, y particularmente cromatografía en gel de sílice y cromatografía de gases por atrapamiento, conocido como GC de atrapamiento. Sin embargo, los productos comerciales se ofrecen mayoritariamente como mezclas isoméricas ópticas. Por ejemplo, 4,6-dimetil-2-(1-fenil-etil)-3,6-dihidro-2H-pirano de la presente invención también puede comprender un componente minoritario, 3,5-dimetil-2-(1-fenil-etil)-3,6-dihidro-2H-pirano. Además, 4,6-dimetil-2-(1-feniletil)-3,6-dihidro-2H-pirano incluye los isómeros (2R,6R)-4,6-dimetil-2-((R)-1-feniletil)-3,6-dihidro-2H-pirano, (2R,6R)-4,6-dimetil-2-((S)-1-fenil-etil)-3,6-dihidro-2H-pirano, (2R,6S)-4,6-dimetil-2-((R)-1-fenil-etil)-3,6-dihidro-2H-pirano, (2R,6S)-4,6-dimetil-2-((S)-1-fenil-etil)-3,6-dihidro-2H-pirano, (2S,6S)-4,6-dimetil-2-((R)-1-fenil-etil)-3,6-dihidro-2H-pirano, (2S,6S)-4,6-dimetil-2-((S)-1-fenil-etil)-3,6-dihidro-2H-pirano, (2S,6R)-4,6-dimetil-2-((R)-1-fenil-etil)-3,6-dihidro-2H-pirano y (2S,6R)-4,6-dimetil-2-((S)-1-fenil-etil)-3,6-dihidro-2H-pirano. De forma similar, 3,5-dimetil-2-(1-fenil-etil)-3,6-dihidro-2H-pirano incluye (2R,3R)-3,5-dimetil-2-((R)-1-fenil-etil)-3,6-dihidro-2H-pirano, (2R,3R)-3,5-dimetil-2-((S)-1-fenil-etil)-3,6-dihidro-2H-pirano, (2R,3S)-3,5-dimetil-2-((R)-1-fenil-etil)-3,6-dihidro-2H-pirano, (2R,3S)-3,5-dimetil-2-((S)-l-fenil-etil)-3,6-dihidro-2H-pirano, (2S,3S)-3,5-dimetil-2-((R)-1-fenil-etil)-3,6-dihidro-2H-pirano, (2S,3S)-3,5-dimetil-2-((S)-1-fenil-etil)-3,6-dihidro-2H-pirano, (2S,3R)-3,5-dimetil-2-((R)-1-fenil-etil)-3,6-dihidro-2H-pirano y (2S,3R)-3,5-dimetil-2-((S)-1-fenil-etil)-3,6-dihidro-2H-pirano.

La preparación del compuesto de la presente invención se detalla en los Ejemplos. Los materiales se adquirieron de Aldrich Chemical Company, excepto que se señale de otro modo.

El uso del compuesto de la presente invención es ampliamente aplicable en productos de perfumería actuales, incluyendo la preparación de perfumes y colonias, el perfumado de productos para el cuidado personal tales como jabones, geles de ducha, y productos para el cuidado del cabello, productos para el cuidado de tejidos, ambientadores, y preparaciones cosméticas. La presente invención también se puede usar para perfumar agentes de limpieza, tales como, pero sin limitarse a, detergentes, materiales para lavadoras, composiciones para fregar, limpiadores de ventanas, y similares.

En estas preparaciones, el compuesto de la presente invención se puede usar solo o en combinación con otras composiciones perfumantes, disolventes, adyuvantes, y similares. La naturaleza y variedad de los otros ingredientes que también se pueden emplear son conocidas por aquellos con pericia en la técnica. En la presente invención se pueden emplear muchos tipos de fragancias, siendo la única limitación la compatibilidad con los otros componentes que se estén empleando. Las 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 lirio, de tipo clavel. Otros aromas agradables incluyen aromas de hierbas y a bosques, derivados de pino, pícea, y otros olores a bosques. Las fragancias también pueden derivar de diversos aceites, tales como aceites esenciales, o de materiales vegetales tales como menta piperita, hierbabuena, y similares.

En la patente US nº 4.534.891 se proporciona una lista de fragancias adecuadas. Otra fuente de fragancias adecuadas se encuentra en Perfumes, Cosmetics and Soaps, Segunda Edición, editado por W. A. Poucher, 1959. Entre las fragancias proporcionadas en este tratado, se encuentran la goma arábiga, mimosa, chipre, ciclamen, helecho, gardenia, majuelo, heliotropo, madreselva, jacinto, jazmín, lila, lirio, magnolia, mimosa, narciso, heno recién cortado, azahar, orquídea, reseda, guisantes de olor, trébol, nardo, vainilla, violeta, alhelí, y similares.

El compuesto de la presente invención se puede usar en combinación con un compuesto de fragancia complementario. La expresión “compuesto de fragancia complementario”, como se usa aquí, se define como un compuesto de fragancia seleccionado del grupo que consiste en 2-[(4-metilfenil)metilen]-heptanal (Acalea), éster alílico del ácido iso-amiloxiacético (Glicolato de Alilo y Amilo), propano-1,3-dioato de (3,3-dimetilciclohexil)etilo y 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-trimetilbiciclo[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®), trimetilciclopentenilmetiloxabicicloctano (Cassiffix®), 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-1*H*-inden-5/6-ilo (Cyclacet®), propinoato de 3A,4,5,6,7,7A-hexahidro-4,7-metano-1*H*-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-dimetil propanonitrilo (Fleuranilo), 3-(O/P-etilfenil) 2,2-dimetil propionaldehído (Floralozona), tetrahidro-4-metil-2-(2-metilpropil)-2H-pirano-4-ol (Floriffol), 1,3,4,6,7,8-hexahidro-4,6,6,7,8,8-hexametilciclopenta-gamma-2-benzopirano (Galaxolide®), 1-(5,5-dimetil-1-ciclohexen-1-il)pent-4-en-1-ona (Galbascona), acetato de E/Z-3,7-dimetil-2,6-octadien-1-ilo (Acetato de Geranilo), α-

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 α), 1-(1,2,3,4,5,6,7,8-octahidro-2,3,8,8-tetrametil-2-naftalenil)-etan-1-ona (Iso E Super®), 3-oxo-2-pentilciclopentanoacetato de metilo (Kharismal®), 2,2,4-trimetil-4-fenil-butanonitrilo (Khusinil), 3,4,5,6,6-pentametilhept-3-en-2-ona (Koavone®), 3/4-(4-hidroxi-4-metil-pentil)ciclohexeno-1-carboxaldehído (Lyral®), 3-metil-4-(2,6,6-trimetil-2-ciclohexen-1-il)-3-buten-2-ona (Metil Ionona γ), 1-(2,6,6-trimetil-2-ciclohexen-1-il)pent-1-en-3-ona (Metil Ionona α Extra, Metil Ionona N), 3-metil-4-fenilbutan-2-ol (Muguesia), ciclopentadec-4-en-1-ona (Musk Z4), 3,3,4,5,5-pentametil-11,13-dioxatriciclo[7.4.0.0<2,6>]tridec-2(6)-eno (Nebulone®), acetato de 3,7-dimetil-2,6-octadien-1-ilo (Acetato de Nerilo), 3,7-dimetil-1,3,6-octatrieno (Ocimeno), orto-toliletanol (Peomosa), 3-metil-5-fenilpentanol (Phenoxanol®), 1-metil-4-(4-metil-3-pentenil)ciclohex-3-en-1-carboxaldehído (Preciclemona B), 4-metil-8-metilen-2-adamantanol (Prismantol), 2-etil-4-(2,2,3-trimetil-3-ciclopenten-1-il)-2-buten-1-ol (Sanjinol), 2-metil-4-(2,2,3-trimetil-3-ciclopenten-1-il)-2-buten-1-ol (Santaliff®), Terpineol, 2,4-dimetil-3-ciclohexen-1-carboxaldehído (Triplal®), decahidro-2,6,6,7,8,8-hexametil-2H-indeno[4,5-B]furano (Trisamber®), acetato de 2-terc-butilciclohexilo (Verdox™), acetato de 4-terc-butilciclohexilo (Vertenex®), acetil cedreno (Vertofix®), 3,6/4,6-dimetilcoclohex-3-en-1-carboxaldehído (Vertoliff), y (3Z)-1-[(2-metil-2-propenil)oxi]-3-hexeno (Vivaldie).

La complejidad de las notas de olor se refiere a la presencia de múltiples olores y/o mixtos, pero definidos, en lugar de una sola nota o unas pocas notas fácilmente identificables. También se asignan niveles elevados de complejidad a compuestos que poseen notas ambiguas y en cierto modo difíciles de definir debido a la contribución directa o a las muchas combinaciones olfativas de olores producidas. Se considera que los materiales de fragancia de nivel elevado de complejidad tienen una calidad inusual y elevada.

Las expresiones “formulación de fragancia”, “composición de fragancia”, y “composición de perfume” significan lo mismo, y se refieren a una composición para el consumidor que es una mezcla de compuestos que incluye, 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 producen una fragancia agradable o deseada. La formulación de fragancia de la presente invención es una composición para el consumidor que comprende un compuesto de la presente invención. La formulación de fragancia de la presente invención comprende un compuesto de la presente invención y además un compuesto de fragancia complementario como se define anteriormente. Además, también se pueden usar otros materiales junto con la formulación de fragancia para encapsular y/o suministrar la fragancia. Algunos materiales bien conocidos son, por ejemplo, pero sin limitarse a, polímeros, oligómeros, otros no polímeros tales como tensioactivos, emulsionantes, lípidos, incluyendo grasas, ceras y fosfolípidos, aceites orgánicos, aceites minerales, vaselina, aceites naturales, fijadores del perfume, fibras, almidones, azúcares, y materiales superficiales sólidos tales como zeolita y sílice.

La expresión “producto de fragancia” significa un producto para el consumidor que contiene un ingrediente de fragancia que añade fragancia o enmascara el mal olor. Los productos de fragancia pueden incluir, por ejemplo, perfumes, colonias, jabones de barra, jabones líquidos, geles de ducha, baños de espuma, cosméticos, productos para el cuidado de la piel tales como cremas, lociones y productos para el afeitado, productos para el cuidado del cabello para enjabonar, aclarar, acondicionar, decolorar, colorear, teñir y estilizar, desodorantes y antitranspirantes, productos para el cuidado femenino tales como tampones y compresas femeninas, productos para el cuidado del bebé tales como pañales, baberos y toallitas, productos para el cuidado de la familia tales como papel higiénico, pañuelos faciales, pañuelos de papel o toallitas de papel, productos para los tejidos, tales como suavizantes y ambientadores de tejidos, 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 lavavajillas, composiciones para fregar, limpiadores de cristales y metales, tales como limpiadores de ventanas, limpiadores de encimeras, limpiadores de suelos y de alfombras, limpiadores de baños y aditivos de lejía, agentes de lavado tales como agentes de lavado para todo tipo, de alto rendimiento, y para lavar las manos, o agentes de lavado de tejidos finos, incluyendo detergentes para lavadoras y aditivos del aclarado, productos para la higiene dental y oral tales como pastas de dientes, geles para dientes, hilos dentales, limpiadores de dentaduras, adhesivos para dentaduras, dentífricos, blanqueadores de dientes y colutorios, productos para el cuidado de la salud y nutricionales, y productos alimentarios tales como aperitivos y productos de bebidas. El producto de fragancia de la presente invención es un producto para el consumidor 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 define anteriormente.

El término “mejorar” en la frase “mejorar, potenciar o modificar una formulación de fragancia” se entiende que significa elevar la formulación de fragancia hasta un carácter más deseable. El término “potenciar” se entiende que significa hacer más eficaz la formulación de fragancia, o proporcionar a la formulación de fragancia un carácter mejorado. El término “modificar” se entiende que significa proporcionar a la formulación de fragancia un cambio en el carácter.

La expresión “cantidad olfativa aceptable” se entiende que significa la cantidad de un compuesto en una formulación de fragancia, en el que el compuesto contribuirá a sus características olfativas individuales. Sin embargo, el efecto olfativo de la formulación de fragancia será la suma de efectos de cada uno de los ingredientes de la fragancia. De este modo, el compuesto de la presente invención se puede usar para mejorar o potenciar las características del aroma de la formulación de fragancia, o modificar la reacción olfativa aportada por otros ingredientes en la

formulación. La cantidad olfativa aceptable puede variar dependiendo de muchos factores, incluyendo otros ingredientes, sus cantidades relativas, y el efecto olfativo que se desee.

La cantidad del compuesto de la presente invención empleada en una formulación de fragancia varía de 0,005 a 70 por ciento en peso, preferiblemente de 0,005 a 50 por ciento en peso, más preferiblemente de 0,5 a 25 por ciento en peso, e incluso más preferiblemente de 1 a 10 por ciento en peso. Los expertos en la técnica serán capaces de emplear la cantidad deseada para proporcionar el efecto e intensidad deseados de la fragancia.

Cuando se usan en una formulación de fragancia, estos ingredientes proporcionan notas adicionales para hacer una formulación de fragancia más deseable y notoria, y añade la percepción de valor. Las calidades de olor encontradas en estos materiales ayuda a embellecer y potenciar el acuerdo acabado, así como mejorar el comportamiento de los otros materiales en la fragancia.

Además, también se encuentra sorprendentemente que el compuesto de la presente invención proporciona un comportamiento superior de los ingredientes, y posee ventajas inesperadas en aplicaciones para contrarrestar el mal olor, tal como la transpiración corporal, el olor medioambiental, tal como moho y mildiu, baño, etc. El compuesto de la presente invención elimina sustancialmente la percepción de malos olores y/o previene la formación de tales malos olores, y de este modo se puede utilizar con un basto número de productos funcionales.

Los ejemplos de los productos funcionales se proporcionan aquí 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 ambientadora (o desodorante) de la habitación convencional, tales como pulverizadores ambientadores de habitaciones, un aerosol u otra pulverización, difusores de fragancias, un sistema de mecha o de otro líquido, o un sólido, por ejemplo velas o una base de cera como en bolas aromáticas y plásticos, polvos como en saquitos o pulverizaciones secas o geles, como en barritas de gel sólido, desodorantes para ropas según se aplican mediante aplicaciones de lavadora, tales como en detergentes, polvos, líquidos, blanqueadores o suavizantes de tejidos, ambientadores de tejidos, pulverizadores para ropa blanca, pastillas para armarios, pulverizaciones de aerosoles para armarios, o áreas de almacenamiento de ropas, o en la limpieza en seco para eliminar las notas de disolventes residuales en las ropas, accesorios para el baño tales como toallitas de papel, papeles higiénicos, compresas, toallitas húmedas, toallitas desechables, pañales desechables, y desodorantes para el cubo de pañales, limpiadores tales como desinfectantes y limpiadores del inodoro, productos cosméticos tales como antitranspirantes y desodorantes, desodorantes corporales generales en forma de polvos, aerosoles, líquidos o sólidos, o productos para el cuidado del cabello tales como pulverizadores del cabello, acondicionadores, enjuagues, colores y tintes para el cabello, permanentes, productos para depilación, alisadores del cabello, aplicaciones para cepillar el cabello, tales como pomadas, cremas y lociones, productos medicados para el cuidado del cabello que contienen ingredientes tales como sulfuro de selenio, alquitrán de hulla o salicilatos, o champús, productos para el cuidado de los pies tales como polvos para los pies, líquidos o colonias, lociones para después del afeitado y lociones corporales, o jabones y detergentes sintéticos tales como barras, líquidos, espumas o polvos, control del olor tal como durante los procesos de fabricación, tal como en la industria del acabado textil y en la industria de la impresión (tintas y papel), control de efluente tal como en procesos implicados en los procesamientos de la pulpa, del corral y de la carne, el tratamiento de aguas residuales, bolsas para basuras, o desecho de bolsas, o en el control del olor de los productos, como en bienes acabados textiles, bienes acabados del caucho o ambientadores para coches, productos agrícolas y para el cuidado de mascotas, tales como efluentes de perreras y gallineros, y productos para el cuidado de animales domésticos y de mascotas, tales como desodorantes, champús o agentes de limpieza, o material para camas de animales, o en sistemas de aire cerrados a gran escala, tales como auditorios, y metropolitanos y sistemas de transporte.

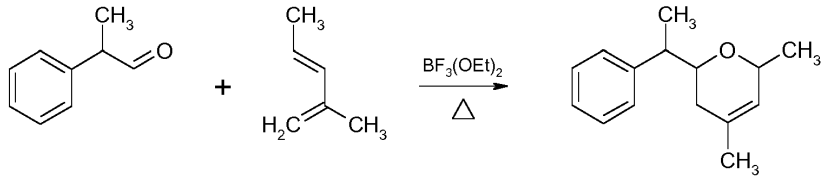
De este modo, se observará que la composición de la invención es habitualmente aquella en la que el agente que contrarresta el mal olor está presente junto con un vehículo por medio del cual o a partir del cual el agente que contrarresta el mal olor se puede introducir en el espacio de aire en el que está presente el mal olor, o un sustrato en el que se ha depositado el mal olor. Por ejemplo, el vehículo puede ser un propelente de aerosol, tal como clorofluorometano, o un sólido tal como una cera, material plástico, caucho, polvo inerte o gel. En un ambientador de tipo mecha, el vehículo es un líquido sustancialmente inodoro de baja volatilidad. En varias aplicaciones, una composición de la invención contiene un agente tensioactivo o un desinfectante, mientras que, en otras, el agente que contrarresta el mal olor está presente sobre un sustrato fibroso. En muchas composiciones de la invención, también está presente un componente de fragancia que aporta una fragancia a la composición. Se pueden emplear todas aquellas fragancias señaladas anteriormente.

La cantidad eficaz que contrarresta el mal olor se entiende que significa la cantidad del agente de la invención que contrarresta el mal olor empleada en un producto funcional que es organolépticamente eficaz para reducir un mal olor dado a la vez que reduce la intensidad combinada del nivel del olor, en el que el mal olor dado está presente en el espacio de aire o se ha depositado en un sustrato. La cantidad exacta de agente que contrarresta el mal olor empleada puede variar dependiendo del tipo de agente que contrarresta el mal olor, del tipo del vehículo empleado, y del nivel de contraataque del mal olor deseado. En general, la cantidad de agente que contrarresta el mal olor presente es la dosis normal requerida para obtener el resultado deseado. Tal dosis es conocida por el experto en la técnica. En una realización preferida, cuando se usa junto con productos funcionales sólidos o líquidos malolientes, por ejemplo jabón y detergente, el compuesto de la presente invención puede estar presente en una cantidad que

oscila de 0,005 a 50 por ciento en peso, preferiblemente de 0,01 a 20 por ciento en peso, más preferiblemente de 0,05 a 5 por ciento en peso, y cuando se usa junto con productos funcionales gaseosos malolientes, el compuesto de la presente invención puede estar presente en una cantidad que oscila de 0,1 a 10 mg por metro cúbico de aire.

Lo siguiente se proporciona como realizaciones específicas de la presente invención. Otras modificaciones de esta invención serán fácilmente manifiestas para los expertos en la técnica. Se entiende que tales modificaciones están dentro del alcance de esta invención. Como se usa aquí, todos los porcentajes son porcentajes en peso, excepto que se señale de otro modo, se entiende que ppm representa partes por millón, se entiende que l es litro, se entiende que ml es mililitro, se entiende que g es gramos, se entiende que Kg es kilogramos, se entiende que mol es moles, se entiende que psi es libras de fuerza por pulgada cuadrado, y se entiende que mmHg es milímetros (mm) de mercurio (Hg). Como se usa en los ejemplos, se entiende que IFF significa International Flavors & Fragrances Inc., Nueva York, NY, USA.

EJEMPLO I



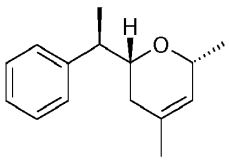
2-fenilpropanal 2-metil-1,3-pentadieno 4,6-dimetil-2-(1-fenil-etil)-3,6-dihidro-2H-pirano

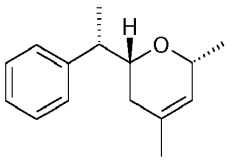
Preparación de 4,6-dimetil-2-(1-fenil-etil)-3,6-dihidro-2H-pirano (Estructura 1): Un matraz de reacción de 5 l equipado con un condensador de reflujo se cargó con tolueno (1 l) y eterato de trifluoruro de boro ($C_4H_{10}BF_3O$) (16 g, 0,012 moles). El matraz de reacción se enfrió hasta 0ºC, y se añadió 2-fenilpropanal (300 g, 2,23 moles) a lo largo de 15 minutos. Se añadió 2-metil-1,3-pentadieno (1,22 Kg, 4,92 moles) a lo largo de 1 hora. Durante la alimentación, la reacción se hizo exotérmica hasta 10ºC. La mezcla de reacción se envejeció toda la noche, y después se paralizó con hidróxido sódico acuoso (50%, 1 l). La destilación a vacío de la mezcla resultante dio 4,6-dimetil-2-(1-fenil-etil)-3,6-dihidro-2H-pirano (120 g) que tiene un punto de ebullición de 118-120ºC a 400 pascales (3 mmHg).

RMN ^{1}H (400 MHz, $CDCl_3$): 7,10-7,42 (m, 5H), 5,22-5,47 (m, 1H), 3,43-5,06 (m, 2H), 2,62-3,33 (m, 1H), 0,65-2,36 (m, 11H)

Se describió que 4,6-dimetil-2-(1-fenil-etil)-3,6-dihidro-2H-pirano tiene notas a madera, aromáticas, florales y verdes.

EJEMPLO II





Estructura 1a Estructura 1b

Preparación de (2R,6R)-4,6-dimetil-2-((R)-1-fenil-etil)-3,6-dihidro-2H-pirano (Estructura 1a) y (2R,6R)-4,6-dimetil-2-((S)-1-fenil-etil)-3,6-dihidro-2H-pirano (Estructura 1b): Adicionalmente, se aislaron y evaluaron los isómeros (2R,6R)-4,6-dimetil-2-((R)-1-fenil-etil)-3,6-dihidro-2H-pirano y (2R,6R)-4,6-dimetil-2-((S)-1-feniletil)-3,6-dihidro-2H-pirano.

(2R,6R)-4,6-Dimetil-2-((R)-1-fenil-etil)-3,6-dihidro-2H-pirano tiene las siguientes características espectrales de RMN:

RMN ^{1}H (500 MHz, $CDCl_3$): 7,17-7,32 (m, 5H), 5,32-5,40 (m, 1H), 4,34-4,44 (m, 1H), 3,67-3,74 (m, 1H), 2,75 (dq, J= 8,9Hz, 6,9Hz, 1H), 1,63-2,14 (m, 2H), 1,58 (s, 3H), 1,36 (d, J=6,9 Hz, 3H), 1,24 (d, J=6,6 Hz, 3H)

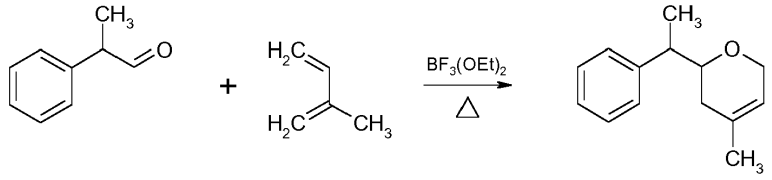
Se describió que (2R,6R)-4,6-dimetil-2-((R)-1-fenil-etil)-3,6-dihidro-2H-pirano tiene caracteres florales, verdes, enérgicos pero débiles.

(2R,6R)-4,6-Dimetil-2-((S)-1-fenil-etil)-3,6-dihidro-2H-pirano tiene las siguientes características espectrales de RMN:

RMN ^{1}H NMR (500 MHz, $CDCl_3$): 7,17-7,32 (m, 5H), 5,32-5,40 (m, 1H), 4,24-4,33 (m, 1H), 3,80-3,87 (m, 1H), 2,86 (dq, J= 7,3Hz, 6,9Hz, 1H), 1,63-2,14 (m, 2H), 1,68 (s, 3H), 1,27 (d, J=6,9 Hz, 3H), 1,11 (d, J=6,9 Hz, 3H)

Se describió que (2R,6R)-4,6-dimetil-2-((S)-1-fenil-etil)-3,6-dihidro-2H-pirano tiene caracteres florales, verdes, terrosos pero débiles.

EJEMPLO III DE REFERENCIA



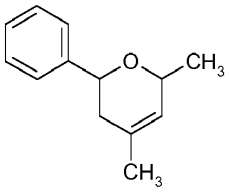
2-fenilpropanal 2-metil-1,3-butadieno 4-metil-2-(1-fenil-etil) -3,6-dihidro-2H-pirano

Preparación de 4-metil-2-(1-feniletil)-3,6-dihidro-2H-pirano: 4-Metil-2-(1-feniletil)-3,6-dihidro-2H-pirano se preparó de forma similar de acuerdo con el EJEMPLO I usando 2-fenilpropanal (500 g, 3,72 moles) y 2-metil-1,3-butadieno (279 g, 4,1 moles). 4-Metil-2-(1-feniletil)-3,6-dihidro-2H-pirano (100 g) se obtuvo con un punto de ebullición de 115-116ºC a 400 pascales (3 mmHg).

RMN ^{1}H (400 MHz, $CDCl_3$): 7,10-7,42 (m, 5H), 5,22-5,47 (m, 1H), 3,70-4,10 (m, 3H), 2,62-2,88 (m, 1H), 1,95-2,23 (m, 2H), 1,62-1,70 (m, 3H), 1,30-1,35 (m, 3H)

Se describió que 4-metil-2-(1-feniletil)-3,6-dihidro-2H-pirano tiene caracteres florales, verdes pero penetrantes.

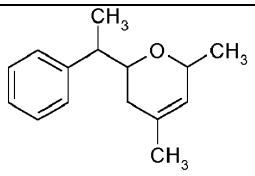
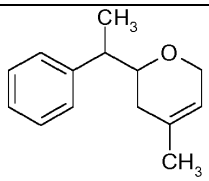
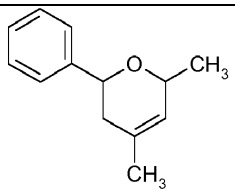
EJEMPLO IV DE REFERENCIA



Además, se obtuvo 4,6-dimetil-2-fenil-3,6-dihidro-2H-pirano (comercialmente disponible en Firmenich SA).

EJEMPLO V

Las propiedades de fragancia de los compuestos anteriores se evaluaron usando (i) la intensidad del olor de 0 a 10, en la que 0 = ninguna, 1 = muy débil, 5 = moderada, 10 = extremadamente fuerte; y (ii) nivel de complejidad, en el que 0 = ninguno, 1 = muy bajo, 5 = moderado, 10 = extremadamente alto. Las puntuaciones promedio se dan en lo siguiente:

Nombre químico	Compuesto	Perfil de olor	Intensidad	Complejidad
4,6-Dimetil-2-(1-fenil-etil)-3,6-dihidro-2H-pirano		Boscoso, aromático, herbáceo, terroso, verde, floral y pulverulento	9	10
4-Metil-2-(1-feniletil)-3,6-dihidro-2H-pirano (Ejemplo de referencia)		Floral, verde, vegetal, similar a champiñón y penetrante	9	6
4,6-Dimetil-2-fenil-3,6-dihidro-2H-pirano (Ejemplo de referencia)		Verde geranio y nota superior similar a heno con impresión seca	7	5

La evaluación anterior demostró que 4,6-dimetil-2-(1-fenil-etil)-3,6-dihidro-2H-pirano (Estructura 1) presentó diversas

propiedades de olor deseables con un nivel elevadamente alto de complejidad. Por lo tanto, 4,6-dimetil-2-(1-fenil-etil)-3,6-dihidro-2H-pirano posee ventajas inesperadas a la hora de proporcionar un comportamiento de perfumería inusual y de alta calidad.

EJEMPLO VI

Establecimiento de modelos malolientes: Los modelos malolientes de sudor, moho/mildiu, de baño y de tabaco se prepararon en base a las formulaciones patentadas de los solicitantes, para evaluar la eficacia de diversos agentes que contrarrestan el mal olor.

Preparación de muestras de ensayo: Se colocaron dos cápsulas de aluminio en un tarro de vidrio de 0,23 kg (8 oz). Se pipeteó un material maloliente en una cápsula de vidrio, y se pipeteó 4,6-dimetil-2-(1-fenil-etil)-3,6-dihidro-2H-pirano (preparado anteriormente) diluido en un disolvente (1%) o un control de disolvente solo en la otra cápsula de aluminio. El tarro se cerró entonces con una tapa, y se dejó que las muestras se equilibraran durante una hora antes del ensayo.

Procedimiento de ensayo: Las muestras de ensayo se presentaron en un orden enmascarado y aleatorio a 15-18 panelistas internos (que consisten en hombres/mujeres con un intervalo de edades de 25 a 55). Sin embargo, las diferentes muestras de olor se dispusieron en un orden alterno (por ejemplo, sudor, moho/mildiu, sudor, moho/mildiu, etc.).

Se solicitó a los panelistas que llevaran a cabo las etapas de i) oler los tarros que contienen solamente los materiales malolientes, para la familiarización antes del ensayo; ii) destapar un tarro; iii) colocar sus narices a una distancia de alrededor de 0,08-0,1 m (3-4 pulgadas) por encima de la abertura; iv) realizar aspiraciones cortas durante 3 segundos; y v) escribir una puntuación de la intensidad global y la intensidad del mal olor en un ordenador portátil.

La intensidad global y del mal olor se puntuó usando la Escala de Magnitud Marcad (LMS) [Green, et al., Chemical Senses, 21(3), Jun 1996, 323-334]. El porcentaje de reducción del mal olor ("%MOR") representa la reducción percibida en la intensidad media del mal olor de la muestra que contiene el mal olor, en presencia de un agente que contrarresta el mal olor, con respecto al control negativo (mal olor solo).

Resultados y discusión: Las puntuaciones medias de la cobertura del mal olor para el ensayo anterior fueron las siguientes:

Compuesto (1%)	**Malodor**	**%MOR**
4,6-Dimetil-2-(1-fenil-etil)-3,6-dihidro-2H-pirano	Sudor	53,73
	Moho/Mildiu	77,23
	Baño	46,81
	Humo	51,57

Se demostró que 4,6-dimetil-2-(1-fenil-etil)-3,6-dihidro-2H-pirano es eficaz contrarrestando diversos tipos de malos olores.

REIVINDICACIONES

1. Un compuesto, 4,6-dimetil-2-(1-fenil-etil)-3,6-dihidro-2H-pirano.

2. Una formulación de fragancia que comprende una cantidad olfativa aceptable de 4,6-dimetil-2-(1-fenil-etil)-3,6-dihidro-2H-pirano.

3. Un método para mejorar, potenciar o modificar una formulación de fragancia a través de la adición de una cantidad olfativa aceptable de 4,6-dimetil-2-(1-fenil-etil)-3,6-dihidro-2H-pirano.

4. La formulación de fragancia de la reivindicación 2, o el método de la reivindicación 3, en el que la cantidad olfativa aceptable es de 0,005 a 50 por ciento en peso de la formulación de fragancia.

5. La formulación de fragancia de la reivindicación 2, o el método de la reivindicación 3, en el que la cantidad olfativa aceptable es de 0,5 a 25 por ciento en peso de la formulación de fragancia.

6. La formulación de fragancia de la reivindicación 2, o el método de la reivindicación 3, en el que la cantidad olfativa aceptable es de 1 a 10 por ciento en peso de la formulación de fragancia.

7. La formulación de fragancia de la reivindicación 2 o de cualquiera de las reivindicaciones 4 a 6, que comprende además un material seleccionado del grupo que consiste en un polímero, un oligómero y un no polímero.

8. La formulación de fragancia de la reivindicación 7, en la que el no polímero se selecciona del grupo que consiste en 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.

9. La formulación de fragancia de la reivindicación 8, en la que el material de superficie sólido se selecciona del grupo que consiste en zeolita y sílice.

10. Un producto de fragancia que comprende una cantidad olfativa aceptable del compuesto de la reivindicación 1.

11. El producto de fragancia de la reivindicación 10, en el que el producto de fragancia se selecciona del grupo que consiste en un perfume, una colonia, un agua de baño, un producto cosmético, un producto para el cuidado personal, un producto para el cuidado de tejidos, un producto de limpieza y un ambientador, un jabón de barra, un jabón líquido, un jabón de ducha, un baño de espuma, un cosmético, un producto para el cuidado de la piel, un producto para el cuidado del cabello, un desodorante, un antitranspirante, un producto para el cuidado femenino, un producto para el cuidado de bebés, un producto para el cuidado de la familia, un producto para tejidos, un producto para el cuidado del aire, un sistema de suministro de fragancias, una preparación cosmética, un agente de limpieza, un desinfectante, un agente de lavado, un producto para la higiene dental y oral, un producto para el cuidado de la salud y nutricional, y un producto alimentario.

12. El producto de fragancia de la reivindicación 11, en el que el producto de limpieza se selecciona del grupo que consiste en un detergente, un material para lavavajillas, una composición para fregar, un limpiador de vidrio, un limpiador de metales, un limpiador de encimeras, un limpiador de suelos, un limpiador de alfombras, un limpiador de baños, y un aditivo de lejía.

13. El producto de fragancia de la reivindicación 12, en el que el agente de lavado se selecciona del grupo que consiste en un detergente para la colada y un aditivo del aclarado.