

19



OFICINA ESPAÑOLA DE  
PATENTES Y MARCAS

ESPAÑA



11 Número de publicación: **2 751 901**

51 Int. Cl.:

**C07C 13/19** (2006.01)

**C11B 9/00** (2006.01)

12

TRADUCCIÓN DE PATENTE EUROPEA

T3

96 Fecha de presentación y número de la solicitud europea: **06.12.2017** E 17205637 (6)

97 Fecha y número de publicación de la concesión europea: **11.09.2019** EP 3339279

54 Título: **Compuestos organolépticos noveles**

30 Prioridad:

**20.12.2016 US 201662436523 P**

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

**02.04.2020**

73 Titular/es:

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

72 Inventor/es:

**AMORELLI, BENJAMIN;  
AMEGOR, IYARE;  
MONTELEONE, MICHAEL G. y  
COLANDREA, VINCENT**

74 Agente/Representante:

**LEHMANN NOVO, María Isabel**

ES 2 751 901 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**

Compuestos organolépticos noveles

Campo de la invención

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

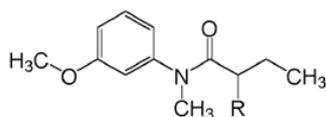
Antecedentes de la invención

10 En la industria de las fragancias existe una necesidad constante de proporcionar nuevos productos químicos para dar a los perfumistas y a otras personas la capacidad de crear nuevas fragancias para perfumes, colonias y productos para el cuidado personal. Los expertos en la técnica aprecian cómo las diferencias en la estructura química de la molécula pueden causar diferencias significativas en el olor, notas y características de una molécula. Estas variaciones y la necesidad constante de descubrir y utilizar los nuevos productos químicos en el desarrollo de nuevas fragancias permiten a los perfumistas aplicar los nuevos compuestos en la creación de nuevas fragancias.

Resumen de la invención

15 La presente invención proporciona nuevos compuestos y su uso ventajoso inesperado para realzar, mejorar o modificar la fragancia de perfumes, colonias, agua de colonia, productos para el cuidado de las telas, productos personales y similares.

Más específicamente, la presente invención se relaciona con nuevos compuestos de metoxifenil butanamida representados por la Fórmula I que se expone a continuación:



Fórmula I

20 donde R se selecciona del grupo que comprende metilo y etilo.

Otra realización de la presente invención se refiere a una formulación de fragancia que comprende los compuestos nuevos proporcionados anteriormente.

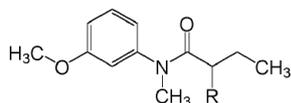
Otra realización de la presente invención se refiere a un producto de fragancia que comprende los compuestos proporcionados anteriormente.

25 Otra realización de la presente invención se refiere a un método de mejorar, realzar o modificar una formulación de fragancia a través de la adición de los compuestos nuevos proporcionados anteriormente.

Estas y otras realizaciones de la invención presente serán evidentes al leer la siguiente especificación.

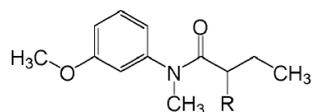
Aspectos de la invención también pueden ser suministrados por los siguientes párrafos numerados.

1. Un compuesto de fórmula:



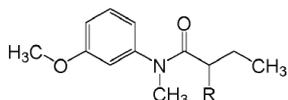
30 donde R se selecciona del grupo que comprende metilo y etilo.

2. Una composición de fragancia que comprende una cantidad olfativa aceptable de un compuesto de fórmula:



donde R se selecciona del grupo que comprende metilo y etilo.

3. La formulación de fragancia del párrafo 2, donde la cantidad olfativa aceptable es de aproximadamente 0,005 a aproximadamente el 50 por ciento en peso de la formulación de fragancia.
- 5 4. La formulación de fragancia del párrafo 2, donde la cantidad olfativa aceptable es de aproximadamente 0,5 a aproximadamente el 25 por ciento en peso de la formulación de fragancia.
5. La formulación de fragancia del párrafo 2, donde la cantidad olfativa aceptable es de aproximadamente 1 a aproximadamente el 10 por ciento en peso de la formulación de fragancia.
- 10 6. La formulación de fragancia del párrafo 2 comprende además un material seleccionado del grupo compuesto por un polímero, un oligómero y un no polímero.
7. La formulación de fragancia del párrafo 6, en la que el polímero se selecciona del grupo formado por poliácido, poliurea, poliuretano, poliacrilamida, poliéster, poliéter, poliamida, poli(acrilato-co-acrilamida), almidón, sílice, gelatina y goma arábiga, alginato, quitosán, polilactida, poli(melamina-formaldehído), poli(urea-formaldehído) y una combinación de los mismos.
- 15 8. Un método de mejorar, realzar o modificar una formulación de fragancia que consiste en añadir una cantidad olfativa aceptable de un compuesto de fórmula:

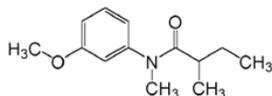


donde R se selecciona del grupo que comprende metilo y etilo a la formulación de fragancia.

- 20 9. El método del párrafo 8, en el que la cantidad olfativa aceptable es de aproximadamente 0,005 a aproximadamente el 50 por ciento en peso de la formulación de fragancia.
10. El método del párrafo 8, en el que la cantidad olfativa aceptable es de aproximadamente 0,5 a aproximadamente el 25 por ciento en peso de la formulación de fragancia.
11. El método del párrafo 8, en el que la cantidad olfativa aceptable oscila entre el 1 y el 10 por ciento en peso de la formulación de fragancia.
- 25 12. Un producto de fragancia que contenga el compuesto del párrafo 1.
13. El producto de fragancia del párrafo 12, en el que el producto de fragancia se selecciona del grupo consistente en un perfume, una colonia, agua de colonia, 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 en barra, un jabón líquido, un gel de ducha, una espuma de baño, un cosmético, un producto para el cuidado de la piel, un producto para el cuidado del cabello, un desodorante, un antitranspirante, un producto para el cuidado femenino, un producto para el cuidado del bebé, un producto para el cuidado de la familia, un producto textil, 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 bucal y dental, un producto para el cuidado de la salud y la nutrición y un producto alimentario.
- 30 14. El producto de fragancia del párrafo 13, en el que el producto de limpieza se selecciona del grupo que consiste en un detergente, un material para lavavajillas, una composición para limpieza, un limpiador de cristales, un limpiador de metales, un limpiador de encimeras, un limpiador de pisos, un limpiador de alfombras, un limpiador de inodoro y un aditivo de lejía.
- 35 15. El producto de fragancia del párrafo 13, en el que el agente de lavado se selecciona del grupo consistente en un detergente para ropa y un aditivo para el aclarado.
- 40 Descripción detallada de la invención

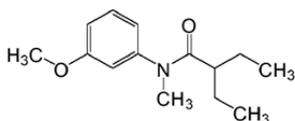
Los compuestos de butanamida de metoxifenilo representados por la Fórmula I de la presente invención se ilustran, por ejemplo, con el siguiente ejemplo.

*N*-(3-metoxifenil)-*N*,2-dimetilbutanamida



Estructura 1

5 2-etil-*N*-(3-metoxifenil)-*N*-metilbutanamida



Estructura 2

Los expertos en la técnica reconocerán que los compuestos de la presente invención pueden tener un número de isómeros tales como isómeros posicionales dependiendo de los materiales iniciales disponibles. Se pretende en la presente memoria que los compuestos aquí descritos incluyan mezclas isoméricas así como isómeros solos que pueden ser separados utilizando técnicas conocidas por los expertos en la técnica. Entre las técnicas adecuadas figuran la cromatografía, como la cromatografía líquida de alta resolución, denominada HPLC y en particular, la cromatografía de gel de sílice y la captura por cromatografía de gases, denominada captura por CG. Sin embargo, los productos comerciales se ofrecen principalmente en forma de mezclas isoméricas.

La preparación de los compuestos de la presente invención se detalla en los Ejemplos. Los materiales fueron comprados a Aldrich Chemical Company a menos que se indique lo contrario.

El uso de los compuestos de la presente invención es ampliamente aplicable a los productos de perfumería actuales, incluida la preparación de perfumes y colonias, el perfumado de productos de cuidado personal tales como jabones, geles de ducha y productos para el cuidado del cabello, productos para el cuidado de telas, ambientadores y preparaciones cosméticas. La presente invención también puede ser utilizada para perfumar agentes de limpieza, tales como, entre otros, detergentes, materiales para lavaplatos, composiciones de lavado, limpiadores de ventanas y similares.

En estas preparaciones, los compuestos de la presente invención pueden ser utilizados solos o en combinación con otras composiciones para perfumar, solventes, adyuvantes y similares. La naturaleza y variedad de los otros ingredientes que también pueden ser empleados son conocidas por los expertos en la técnica. En la presente invención se pueden usar muchos tipos de fragancias y la única limitación es la compatibilidad con los otros componentes utilizados. Las fragancias adecuadas incluyen pero no se limitan a frutas como la almendra, manzana, cereza, uva, pera, piña, naranja, fresa, frambuesa; almizcle, aromas florales como lavanda, rosa, lirio o clavel. Otros aromas agradables incluyen aromas herbales y forestales derivados de los olores de pino, abeto y otros olores del bosque. Las fragancias también pueden derivarse de diversos aceites, como los aceites esenciales, o de materiales vegetales como la menta, la menta verde y otros similares.

Se proporciona una lista de fragancias adecuadas en la Patente N° 4.534.891 de EE.UU. Otra fuente de fragancias adecuadas se encuentra en *Perfumes, Cosmetics and Soaps*, Segunda Edición, editado por W. A. Poucher, 1959, pero también en la patente europea EP 1 399 413 B1 y la publicación internacional WO 96/30470 A1.

Entre las fragancias proporcionadas en este tratado se encuentran acacia, grosella negra, chipre, ciclamen, helecho, gardenia, espino, hilitropo, madre selva, jacinto, jazmín, lila, azucena, magnolia, mimosa, narciso, heno fresco, flor de naranjo, orquídea, reseda, guisantes de olor, trébol, nardo, vainilla, violeta, alhelí y otras similares.

Los compuestos de la presente invención pueden ser utilizados en combinación con un compuesto de fragancia complementario. El término "compuesto de fragancia complementario", tal como se utiliza en el presente documento, se define como un compuesto de fragancia seleccionado del grupo que comprende 2-[(4-metilfenil)metileno]-heptanal (Acalea), éster alílico de ácido iso-amiloxiacético (alil-amil-glicolato), (3,3-dimetilciclohexil)etil propano-1,3-dioato de 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-trimetilbiclo[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), trimetilciclopentenilmetiloxabiciclooctano (Cassifix), 1,1-dimetoxi-3,7-dimetil-2,6-octadieno (Citril 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), propionato 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 Damascone), 3-(4-etilfenil)-2,2-dimetilpropanonitrilo (Fleuranil), 3-(O/P-etilfenil) 2,2-dimetilpropionaldehído (Floralozona), tetrahidro-4-metil-2-(2-metilpropil)-2H-piran-4-ol (Florifol), 1,3,4,6,7,8-hexahidro-4,6,6,7,8,8-hexametilciclopenta-gamma-2-benzopirano (Galaxolide), 1-(5,5-dimetil-1-ciclohexen-1-il)pent-4-en-1-ona (Galbascone), acetato de E/Z-3,7-dimetil-2,6-octadien-1-ilo (acetato de geranilo),  $\alpha$ -metil-1,3-benzodioxol-5-propanal (Helional), 1-(2,6,6,6-trimetil-2-ciclohexen-1-il)-1,6-heptadien-3-ona (Hexalon), (Z)-3-hexenil-2-hidroxibenzoato (salicilato de hexenilo, CIS-3), 4-(2,6,6-trimetil-2-ciclohexen-1-il)-3-buten-2-ona (ionona  $\alpha$ ), 1-(1,2,3,4,5,6,7,8-octahidro-2,3,8,8-tetrametil-2-naftalenil)-etan-1-ona (Iso E Super), metil 3-oxo-2-pentilciclopentanoacetato (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) ciclohexen-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 (almizcle Z4), 3,3,4,5,5-pentametil-11,13-dioxatriciclo[7.4.0.0<2,6>]tridec-2(6)-eno (Nebulona), acetato de 3,7-dimetil-2,6-octadien-1-ilo (acetato de nerilo), 3,7-dimetil-1,3,6-octatrieno (Ocimeno), orto-toliletanol (Peomosa), 3-metil-5-fenilpentanol (fenoxanol), 1-metil-4-(4-metil-3-pentenil) ciclohex-3-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 (Verdorex), acetato de 4-*terc*-butilciclohexilo (Vertenex), acetyl cedreno (Vertofix), 3,6/4,6-dimetilciclohex-3-en-1-carboxaldehído (Vertoliff) y (3Z)-1-[(2-metil-2-propenil)oxi]-3-hexeno (Vivaldie).

El término "alquilo" significa un hidrocarburo monovalente saturado lineal o ramificado, por ejemplo, metilo, etilo, propilo, 2-propilo, butilo (incluidas todas las formas isoméricas), pentilo (incluidas todas las formas isoméricas), hexilo (incluidas todas las formas isoméricas) y similares. El término "alquilenilo" significa un hidrocarburo alifático no saturado, lineal o ramificado, que contiene al menos un enlace doble carbono-carbono. El término "alquilenol" se refiere al alquilo bivalente. Los ejemplos incluyen  $-\text{CH}_2-$ ,  $-\text{CH}_2\text{CH}_2-$ ,  $-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2-$ ,  $-\text{CH}_2(\text{CH}_3)\text{CH}_2-$ ,  $-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2-$ , y similares.

Los términos "formulación de fragancia", "composición de fragancia" y "composición de perfume" significan lo mismo y se refieren a un producto 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 modo que la combinación de los olores de cada uno de los componentes produce una fragancia agradable o deseada. La formulación de fragancia de la presente invención es un producto 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.

El término "producto de fragancia" significa un producto de consumo que contiene un ingrediente de fragancia que agrega fragancia o enmascara el mal olor. Los productos de fragancia pueden incluir, por ejemplo, perfumes, colonias, jabones en barra, jabones líquidos, geles de ducha, espuma para baño, cosméticos, productos para el cuidado de la piel como cremas, lociones y productos para afeitarse, productos para el cuidado del cabello para lavado, aclarado, acondicionamiento, blanqueamiento, coloración, teñido y peinado, desodorantes y antitranspirantes, productos para el cuidado femenino como tampones y compresas femeninas, productos para el cuidado del bebé como pañales, baberos y toallitas, productos para el cuidado de la familia como papel higiénico, pañuelos faciales, pañuelos de papel o toallas de papel, productos para telas como suavizantes y aromatizantes, productos para el cuidado del aire como aromatizantes y sistemas de distribución de fragancias, preparaciones cosméticas, agentes de limpieza y desinfectantes como detergentes, materiales para lavavajillas, composiciones de lavado, limpiadores de cristales y metales como limpiadores para ventanas y encimeras, limpiadores para pisos y alfombras, limpiadores para inodoro y aditivos de lejía, agentes de lavado como los de uso general, de uso intensivo y para lavarse las manos o para lavar telas finas, incluidos los detergentes para ropa y los aditivos para aclarado, productos para higiene dental y bucal como las pastas dentales, geles dentales, hilo dental, limpiadores de dentaduras postizas, adhesivos para dentaduras postizas, dentífricos, blanqueadores dentales y enjuagues bucales, los productos para el cuidado de la salud y los productos nutricionales y productos alimenticios, como los bocadillos y las bebidas. 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 fragancias complementario como se define anteriormente.

El término "mejorar" en la frase "mejorar, realzar o modificar la formulación de una fragancia" se entiende como llevar la formulación de fragancia a un carácter más deseable. Se entiende que el término "realzar" significa aumentar la eficacia de la formulación de la fragancia o dotar a la formulación de fragancia de un carácter mejorado. Se entiende por "modificación" el hecho de proporcionar a la formulación de fragancia un cambio de carácter.

Se entiende por "cantidad olfativa aceptable" la cantidad de un compuesto en una formulación perfumada, en la que el compuesto aportará sus características olfativas individuales. Sin embargo, el efecto olfativo de la formulación de fragancia será la suma del efecto de cada uno de los ingredientes de la fragancia. Así, el compuesto de la presente invención puede ser utilizado para mejorar o realzar las características de aroma de la formulación de fragancia, o modificando la reacción olfativa 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 de los compuestos de la presente invención empleados en una formulación de fragancia varía de aproximadamente 0,005 a aproximadamente 70 por ciento en peso, preferiblemente de 0,005 a aproximadamente 50 por ciento en peso, más preferiblemente de aproximadamente 0,5 a aproximadamente 25 por ciento en peso, e incluso más preferiblemente de aproximadamente 1 a aproximadamente 10 por ciento en peso. Los expertos en la técnica serán capaces de emplear la cantidad deseada para proporcionar el efecto deseado de fragancia e intensidad. Además de los compuestos de la invención presente, otros materiales también pueden ser utilizados en conjunto con la formulación de fragancia para encapsular y/o suministrar la fragancia. Algunos materiales conocidos son, por ejemplo, entre otros, polímeros, oligómeros, otros no polímeros como tensioactivos, emulsionantes, lípidos incluidas las grasas, ceras y fosfolípidos, aceites orgánicos, aceites minerales, petrolato, aceites naturales, fijadores de perfume, fibras, almidones, azúcares y materiales de superficie sólidos como zeolita y sílice. Algunos polímeros preferidos incluyen poliacrilato, poliurea, poliuretano, poliacrilamida, poliéster, poliéter, poliamida, poli(acrilato de co-acrilamida), almidón, sílice, gelatina y goma arábiga, alginato, chitosan, polilactida, poli(melamina-formaldehído), poli(urea-formaldehído) o una combinación de los mismos.

Cuando se usan en una formulación de fragancia, estos ingredientes proporcionan notas adicionales para hacer que la formulación de fragancia sea más deseable y notoria y añaden la percepción de valor. Las cualidades de olor que se encuentran en estos materiales ayudan a embellecer y mejorar el acabado final, así como a mejorar el rendimiento de los otros materiales en la fragancia.

Además, de manera sorprendente se ha encontrado que los compuestos de la presente invención también proporcionan un desempeño superior de los ingredientes y poseen ventajas inesperadas en las aplicaciones para contrarrestar el mal olor como la transpiración corporal, el olor ambiental como el del moho y hongos, del baño, etc. Los compuestos de la presente invención eliminan sustancialmente la percepción de mal olor y/o impiden la formación de tales olores; así, pueden ser utilizados con un número extenso de productos funcionales.

En la presente memoria, se proporcionan ejemplos de los productos funcionales para ilustrar los diferentes 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 convencional de ambientador (o desodorante) de interiores como pulverizadores, aerosoles u otros pulverizadores, difusores de fragancias, pabilos u otros sistemas líquidos, o sólidos, por ejemplo velas o una base de cera, como en pomas y plásticos, polvos como en sobres o aerosoles o geles secos, como en barras de gel sólido, desodorantes de ropa como los aplicados en aplicaciones con lavadoras como en detergentes, polvos, líquidos, blanqueadores o suavizantes de telas, revitalizantes para telas, pulverizadores para ropa, pastillas para armarios, pulverizadores para armarios, o áreas de almacenamiento de ropa o limpieza en seco para superar las notas residuales de disolventes en las ropas, accesorios de baño tales como toallas de papel, papel higiénico, compresas femeninas, toallas húmedas, paños desechables, pañales desechables y desodorantes de cubeta para pañales, productos de limpieza como desinfectantes y limpiadores para váter de inodoro, productos cosméticos como antitranspirantes y desodorantes, desodorantes corporales en general en forma de polvos, pulverizadores, líquidos o sólidos, o productos para el cuidado del cabello como pulverizadores, acondicionadores y aclarados, colorantes y tintes para el cabello, productos para ondas permanentes, depilatorios, alisados para el cabello, aplicaciones para el cuidado del cabello como pomadas, cremas y lociones, productos medicinales para el cuidado del cabello que contengan ingredientes como sulfuro de selenio, alquitrán o salicilatos, o champús, o productos para el cuidado de los pies como polvos para los pies, líquidos o colonias, productos para después de afeitar y lociones corporales, o jabones y detergentes sintéticos como barras, líquidos, espumas o polvos, control de olores como durante los procesos de fabricación, como en la industria de acabado textil y en la industria de impresión (tintas y papel), control de efluentes, como en los procesos relacionados con la fabricación de pulpa, el almacenamiento y el procesamiento de carne, el tratamiento de aguas residuales, las bolsas de residuos o eliminación de residuos, o el control de olores de los productos, como en los productos textiles finales, productos finales de caucho o ambientadores de automóviles, productos agrícolas y para el cuidado de mascotas, como los efluentes de los criaderos de perros y gallinas, y los productos para el cuidado de animales domésticos y mascotas, como desodorantes, champú o productos de limpieza, o el material deshecho de animales, así como en los sistemas de cerrados de aire a gran escala como los auditorios y sistemas de transporte y subterráneos.

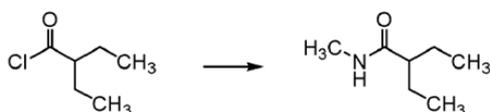
Por lo tanto, se verá que la composición de la invención es generalmente una en la que el supresor del mal olor está presente junto con un portador por medio del cual o desde el cual el supresor de mal olor puede ser introducido en el

espacio aéreo en el que el mal olor está presente, o en un sustrato en el que el mal olor se ha depositado. Por ejemplo, el portador puede ser un propelente de pulverizador como un clorofluoro-metano, o un sólido como una cera, material plástico, caucho, polvo inerte o gel. En un ambientador de tipo pabilo, el portador es un líquido sustancialmente inodoro de baja volatilidad. En varias aplicaciones, una composición de la invención contiene un agente activo de superficie o un desinfectante, mientras que en otros, el supresor del mal olor está presente en un sustrato fibroso. En muchas composiciones de la invención también está presente un componente de fragancia que imparte una fragancia a la composición. Se pueden utilizar todas las fragancias mencionadas anteriormente.

Por cantidad efectiva que contrarresta el mal olor se entiende la cantidad de supresor de mal olor del invento empleado en un producto funcional que es organolépticamente eficaz para reducir un mal olor determinado al mismo tiempo que reduce la intensidad combinada del nivel de olor, en donde el mal olor está presente en el espacio aéreo o se ha depositado en un sustrato. La cantidad exacta de supresor del mal olor puede variar dependiendo del tipo de supresor del mal olor, el tipo de portador empleado y el nivel de supresión deseado del mal olor. En general, la cantidad del agente supresor del mal olor presente es la dosis habitual que se requiere para obtener el resultado deseado. Tal dosificación es conocida por los expertos en la técnica. En una realización preferida, cuando se usa conjuntamente con productos funcionales sólidos o líquidos que desprenden mal olor, p. ej., jabón y detergente, los compuestos de la presente invención pueden estar presentes en una cantidad que oscila entre aproximadamente 0,005 a aproximadamente 50 por ciento en peso, preferentemente entre aproximadamente 0,01 a aproximadamente 20 por ciento en peso, y más preferentemente entre aproximadamente 0,05 a aproximadamente 5 por ciento en peso, y cuando se usa conjuntamente con productos funcionales gaseosos que desprenden mal olor, los compuestos de la presente invención pueden estar presentes en una cantidad que oscila entre aproximadamente 0,1 a 10 mg por metro cúbico de aire.

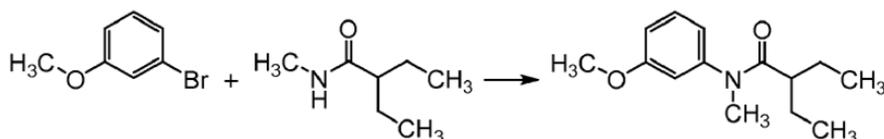
Las siguientes son proporcionadas como realizaciones específicas de la presente invención. Otras modificaciones de esta invención serán rápidamente evidentes para los expertos en la técnica. Se comprende que tales modificaciones se consideran dentro del alcance de la presente invención. Como se utiliza en la presente, todos los porcentajes son porcentaje en peso a menos que se indique lo contrario, se entiende que ppm representa partes por millón, L se entiende que es litro, mL que es mililitro, g que es gramo, Kg que es kilogramo, mol que es mol, mmol que es milimol, psig que es libra de fuerza por pulgada cuadrada y mmHg que es milímetros (mm) de mercurio (Hg). IFF, tal como se utiliza en los ejemplos, se entiende como International Flavors & Fragrances Inc. de Nueva York, NY, EE.UU.

### Ejemplo I



Cloruro de 2-etilbutanoil

2-etil-N-metilbutanamida



1-bromo-3-metoxibenceno

2-etil-N-metilbutanamida

2-etil-N-(3-metoxifenil)-N-metilbutanamida

Preparación de 2-etil-N-(3-metoxifenil)-N-metilbutanamida (Estructura 2): se añadió gota a gota cloruro de 2-etilbutanoilo (8,15 g) en tetrahidrofurano (THF) (10 mL) a una solución de metilamina (60,5 mL, 2M) en THF a 0 °C. La mezcla se mantuvo a temperatura ambiente durante 2 horas y luego se concentró. El residuo se disolvió en acetato de etilo (CH<sub>3</sub>COOC<sub>2</sub>H<sub>5</sub>) (50 mL) y se lavó con una solución acuosa de carbonato de sodio (Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>). La capa orgánica se secó sobre sulfato de sodio (Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>), se filtró y se concentró para obtener 2-etil-N-metilbutanamida cruda. En un vial de 1 dram equipado con una barra de agitación, se agregó carbonato de potasio (K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>) (296 mg, 2,14 mmol), yoduro de cobre(I) (CuI) (10,2 mg, 0,053 mmol) y 2-etil-N-metilbutanamida en bruto (obtenida en la etapa anterior) (166 mg, 1,28 mmol) seguido de la adición de 1-bromo-3-metoxibenceno (200 mg, 1,07 mmol), dioxano (C<sub>4</sub>H<sub>8</sub>O<sub>2</sub>) (5 mL) y (1R,2R)-N1,N2-dimetilciclohexano-1,2-diamina (C<sub>8</sub>H<sub>18</sub>N<sub>2</sub>) (15,2 mg, 0,107 mmol). El vial se cerró herméticamente y se calentó a 100 °C durante 15 horas. A continuación, la mezcla de reacción se enfrió hasta temperatura ambiente y se filtró a través de un lecho de sílice (SiO<sub>2</sub>) (1,5 x 1,5 cm, eluido con diclorometano). El filtrado se concentró en vacío y se

purificó mediante cromatografía flash (gel de sílice, acetato de etilo (EtOAc)/Hexano con un gradiente del 5% al 20%) para obtener la 2-etil-*N*-(3-metoxifenil)-*N*-metilbutanamida como un polvo blanco (98 mg).

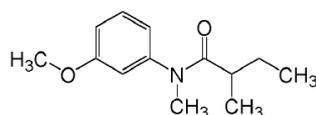
$^1\text{H NMR}$  (500 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ): 7,30 (dd,  $J=8,4, 7,7$  Hz, 1H), 6,87 (dd,  $J=8,4, 2,2$  Hz, 1H), 6,75 (d,  $J=7,7$  Hz, 1H), 6,66-6,71 (m, 1H), 3,81 (s, 3H), 3,26 (s, 3H), 2,17-2,28 (m, 1H), 1,53-1,69 (m, 2H), 1,30-1,44 (m, 2H), 0,81 (t,  $J=7,4$  Hz, 6H).

- 5 Según su descripción la 2-etil-*N*-(3-metoxifenil)-*N*-metilbutanamida presentó notas frescas, jugosas, parecidas a grosella negra y pomelo y dulces parecidas a la guayaba. La nota de pomelo aparecía fresca y agria. La nota parecida a la guayaba parecía carnosa, madura, azucarada, ácida y natural.

### Ejemplo II

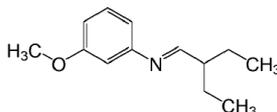
Los siguientes compuestos fueron preparados de manera similar.

- 10 *N*-(3-metoxifenil)-*N*,2-dimetilbutanamida (Estructura 1)



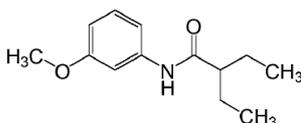
$^1\text{H NMR}$  (400 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ): 7,33 (dd,  $J=8,1, 8,1$  Hz, 1H), 6,90 (dd,  $J=8,1, 1,9$  Hz, 1H), 6,75-6,81 (m, 1H), 6,72 (dd,  $J=2,2, 2,2$  Hz, 1H), 3,84 (s, 3H), 3,27 (s, 3H), 2,27-2,45 (m, 1H), 1,61-1,86 (m, 1H), 1,21-1,41 (m, 1H), 1,04 (d,  $J=6,7$  Hz, 3H), 0,81 (t,  $J=7,4$  Hz, 3H)

- 15 2-etil-*N*-(3-metoxifenil)butano-1-imina (Estructura 3)



$^1\text{H NMR}$  (400 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ): 7,65 (d,  $J=6,7$  Hz, 1H), 7,25 (dd,  $J=8,4, 7,3$  Hz, 1H), 6,76 (ddd,  $J=8,4, 2,5, 1,0$  Hz, 1H), 6,59-6,67 (m, 2H), 3,83 (s, 3H), 2,21-2,34 (m, 1H), 1,53-1,69 (m, 4H), 0,99 (t,  $J=7,5$  Hz, 6H)

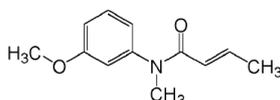
2-etil-*N*-(3-metoxifenil)butanamida (Estructura 4)



20

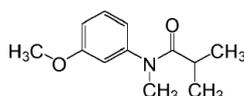
$^1\text{H NMR}$  (400 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ): 7,42 (s, 1H), 7,26-7,36 (m, 1H), 7,22 (dd,  $J=8,1, 8,1$  Hz, 1H), 6,99 (br d,  $J=7,9$  Hz, 1H), 6,68 (dd,  $J=8,3, 1,6$  Hz, 1H), 3,82 (s, 3H), 1,97-2,18 (m, 1H), 1,67-1,85 (m, 2H), 1,49-1,67 (m, 2H), 0,98 (t,  $J=7,5$  Hz, 6H)

*N*-(3-metoxifenil)-*N*-metilbut-2-enamida (Estructura 5)



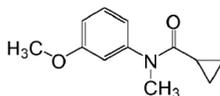
- 25  $^1\text{H NMR}$  (400 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ): 6,81-7,33 (m, 4H), 6,62-6,68 (m, 1H), 5,94-6,00 (m, 1H), 3,82 (s, 3H), 3,32 (s, 3H), 1,89 (dd,  $J=6,8, 1,7$  Hz, 3H)

*N*-(3-metoxifenil)-*N*-metilisobutiramida (Estructura 6)



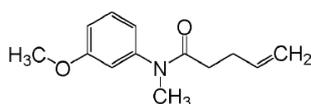
$^1\text{H}$  NMR (400 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ): 7,34 (dd,  $J=8,1$ , 8,1 Hz, 1H), 6,88-6,94 (m, 1H), 6,77-6,83 (m, 1H), 6,74 (dd,  $J=2,2$ , 2,2 Hz, 1H), 3,84 (s, 3H), 3,26 (s, 3H), 2,48-2,70 (m, 1H), 1,06 (d,  $J=6,7$  Hz 6H)

*N*-(3-metoxifenil)-*N*-metilciclopropanocarboxamida (Estructura 7)



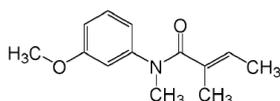
5  $^1\text{H}$  NMR (400 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ): 7,33 (dd,  $J=8,0$ , 8,0 Hz, 1H), 6,85-6,92 (m, 2H), 6,81-6,85 (m, 1H), 3,84 (s, 3H), 3,29 (s, 3H), 1,39-1,53 (m, 1H), 0,94-1,09 (m, 2H), 0,56-0,71 (m, 2H)

*N*-(3-metoxifenil)-*N*-metilpent-4-enamida (Estructura 8)



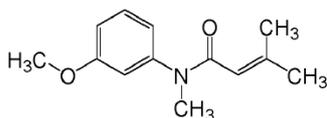
10  $^1\text{H}$  NMR (400 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ): 7,33 (dd,  $J=8,1$ , 8,1 Hz, 1H), 6,89 (dd,  $J=8,3$ , 2,1 Hz, 1H), 6,76-6,81 (m, 1H), 6,72 (dd,  $J=2,1$ , 2,1 Hz, 1H), 5,63-5,85 (m, 1H), 4,78-5,07 (m, 2H), 3,83 (s, 3H), 3,26 (s, 3H), 2,30-2,40 (m, 2H), 2,14-2,27 (m, 2H)

*N*-(3-metoxifenil)-*N*,2-dimetilbut-2-enamida (Estructura 9)



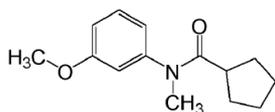
$^1\text{H}$  NMR (400 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ): 7,23 (dd,  $J=8,1$ , 8,1 Hz, 1H), 6,77 (ddd,  $J=8,3$ , 2,5, 0,8 Hz, 1H), 6,68-6,74 (m, 1H), 6,62-6,68 (m, 1H), 5,72-5,84 (m, 1H), 3,80 (s, 3H), 3,34 (s, 3H), 1,59-1,62 (m, 3H), 1,52 (dd,  $J=6,9$ , 1,1 Hz, 3H)

15 *N*-(3-metoxifenil)-*N*,3-dimetilbut-2-enamida (Estructura 10)



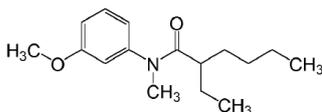
$^1\text{H}$  NMR (400 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ): 7,27-7,31 (m, 1H), 6,85 (ddd,  $J=8,4$ , 2,5, 0,7 Hz, 1H), 6,75-6,80 (m, 1H), 6,71-6,73 (m, 1H), 5,51-5,57 (m, 1H), 3,83 (s, 3H), 3,31 (s, 3H), 2,15 (d,  $J=1,1$  Hz, 3H), 1,71 (d,  $J=0,9$  Hz, 3H)

*N*-(3-metoxifenil)-*N*-metilciclopentanocarboxamida (Estructura 11)



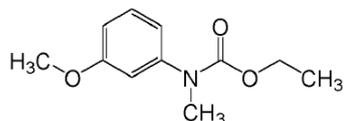
20  $^1\text{H}$  NMR (500 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ): 6,59-7,36 (m, 4H), 3,83 (s, 3H), 3,25 (s, 3H), 2,52-2,75 (m, 1H), 1,33-2,05 (m, 8H)

2-etil-*N*-(3-metoxifenil)-*N*-metilhexanamida (Estructura 12)



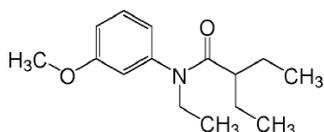
25  $^1\text{H}$  NMR (500 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ): 7,30 (dd,  $J=8,2$ , 8,2 Hz, 1H), 6,87 (dd,  $J=8,2$ , 2,1 Hz, 1H), 6,72-6,78 (m, 1H), 6,69 (dd,  $J=2,1$ , 2,1 Hz, 1H), 3,81 (s, 3H), 3,26 (s, 3H), 2,27 (tt,  $J=8,4$ , 5,5 Hz, 1H), 1,04-1,67 (m, 8H), 0,74-0,87 (m, 6H)

(3-metoxifenil)(metil)carbamato de etilo (Estructura 13)



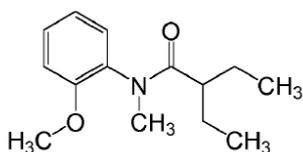
$^1\text{H NMR}$  (400 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ): 7,23-7,30 (m, 1H), 6,82-6,90 (m, 2H), 6,78 (ddd,  $J=8,3, 2,5, 0,9$  Hz, 1H), 4,19 (q,  $J=7,0$  Hz, 2H), 3,82 (s, 3H), 3,31 (s, 3H), 1,26 (t,  $J=7,1$  Hz, 3H)

5 *N*,2-dietil-*N*-(3-metoxifenil)butanamida (Estructura 14)



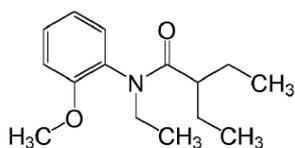
$^1\text{H NMR}$  (500 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ): 7,31 (dd,  $J=8,1, 8,1$  Hz, 1H), 6,89 (br d,  $J=8,1$  Hz, 1H), 6,74 (br d,  $J=8,1$  Hz, 1H), 6,65-6,69 (m, 1H), 3,82 (s, 3H), 3,75 (q,  $J=6,9$  Hz, 2H), 2,04-2,26 (m, 1H), 1,53-1,65 (m, 2H), 1,36 (dt,  $J=13,6, 6,8$  Hz, 2H), 1,13 (t,  $J=7,1$  Hz, 3H), 0,82 (t,  $J=7,4$  Hz, 6H)

10 2-etil-*N*-(2-metoxifenil)-*N*-metilbutanamida (Estructura 15)



$^1\text{H NMR}$  (500 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ): 7,28-7,41 (m, 1H), 7,14 (dd,  $J=7,7, 1,7$  Hz, 1H), 6,86-7,03 (m, 2H), 3,81 (s, 3H), 3,19 (s, 3H), 1,93-2,08 (m, 1H), 1,48-1,68 (m, 2H), 1,22-1,44 (m, 2H), 0,81 (t,  $J=7,4$  Hz, 3H), 0,74 (t,  $J=7,4$  Hz, 3H)

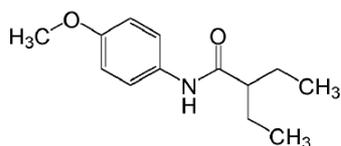
*N*,2-dietil-*N*-(2-metoxifenil)butanamida (Estructura 16)



15

$^1\text{H NMR}$  (500 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ): 7,30-7,35 (m, 1H), 7,10 (dd,  $J=7,6, 1,6$  Hz, 1H), 6,93-7,00 (m, 2H), 4,01 (dq,  $J=13,8, 7,1$  Hz, 1H), 3,80 (s, 3H), 3,37 (dq,  $J=13,8, 7,1$  Hz, 1H), 1,93 (tt,  $J=7,7, 5,8$  Hz, 1H), 1,49-1,69 (m, 2H), 1,23-1,44 (m, 2H), 1,07 (t,  $J=7,3$  Hz, 3H), 0,80 (t,  $J=7,4$  Hz, 3H), 0,74 (t,  $J=7,6$  Hz, 3H)

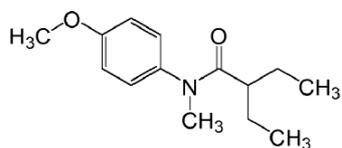
2-etil-*N*-(4-metoxifenil)butanamida (Estructura 17)



20

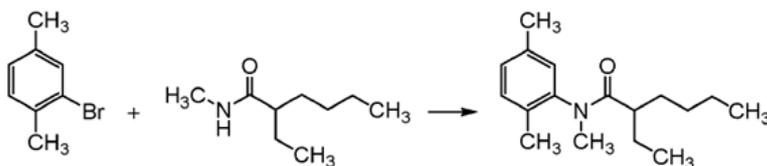
$^1\text{H NMR}$  (400 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ): 7,50 (br s, 1H), 7,46 (m, 2H), 6,85 (m, 2H), 3,79 (s, 3H), 2,04 (m, 1H), 1,72 (m, 2H), 1,55 (m, 2H), 0,96 (t,  $J=7,4$  Hz, 6H)

2-etil-*N*-(4-metoxifenil)-*N*-metilbutanamida (Estructura 18)



$^1\text{H NMR}$  (500 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ): 7,07 (m, 2H), 6,92 (m, 2H), 3,84 (s, 3H), 3,25 (s, 3H), 2,19 (m, 1H), 1,60 (m, 2H), 1,36 (m, 2H), 0,81 (t,  $J=7,5$  Hz, 6H)

### Ejemplo III



2-bromo-1,4  
dimetilbenceno

2-etil-*N*-metilhexanamida

*N*-(2,5-dimetilfenil)-2-etil-*N*-metilhexanamida

5

Preparación de la *N*-(2,5-dimetilfenil)-2-etil-*N*-metilhexanamida (Estructura 27): en un vial de 1 *dram* equipado con una barra de agitación, se agregó carbonato de potasio ( $\text{K}_2\text{CO}_3$ ) (296 mg, 2,14 mmol), yoduro de cobre(I) ( $\text{CuI}$ ) (10,2 mg, 0,053 mmol) y 2-etil-*N*-metilhexanamida (202 mg, 1,28 mmol), seguido de la adición de 2-bromo-1,4-dimetilbenceno (198 mg, 1,07 mmol), dioxano ( $\text{C}_4\text{H}_8\text{O}_2$ ) (5 mL) y (1*R*,2*R*)-*N*1,*N*2-dimetilciclohexano-1,2-diamina ( $\text{C}_8\text{H}_{18}\text{N}_2$ ) (15,2 mg, 0,107 mmol). El frasco se cerró herméticamente y se calentó a 100 °C durante 15 horas. A continuación, la mezcla de reacción se enfrió hasta temperatura ambiente y se filtró a través de un lecho de sílice ( $\text{SiO}_2$ ) (1,5 x 1,5 cm, eluido con diclorometano). El filtrado se concentró al vacío y se purificó mediante cromatografía flash (gel de sílice, acetato de etilo (EtOAc)/Hexano con un gradiente del 5% al 20%) para obtener *N*-(2,5-dimetilfenil)-2-etil-*N*-metilhexanamida como aceite incoloro (168 mg).

10

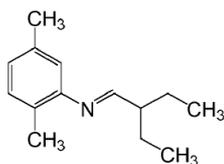
$^1\text{H NMR}$  (400 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ): 7,18 (d,  $J=7,8$  Hz, 1H), 7,08 (dd,  $J=7,8, 1,1$  Hz, 1H), 6,92 (d,  $J=1,1$  Hz, 1H), 3,19 (s, 3H), 2,34 (s, 3H), 2,21 (s, 3H), 1,94-2,09 (m, 1H), 1,52-1,68 (m, 2H), 1,30-1,49 (m, 2H), 1,06-1,25 (m, 4H), 0,74-0,91 (m, 6H)

15

### Ejemplo IV

Los siguientes compuestos se prepararon de manera similar.

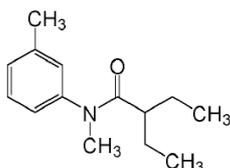
*N*-(2,5-dimetilfenil)-2-etilbutan-1-imina (Estructura 19)



20

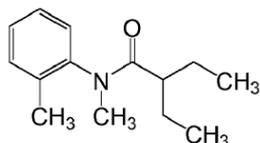
$^1\text{H NMR}$  (500 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ): 7,51 (d,  $J=6,3$  Hz, 1H), 7,05 (d,  $J=7,6$  Hz, 1H), 6,89 (d,  $J=7,6$  Hz, 1H), 6,53 (s, 1H), 2,32 (s, 3H), 2,23 (s, 3H), 2,20-2,36 (m, 1H), 1,58-1,65 (m, 4H), 1,00 (t,  $J=7,4$  Hz, 6H)

2-etil-*N*-metil-*N*-(*m*-tolil)butanamida (Estructura 20)



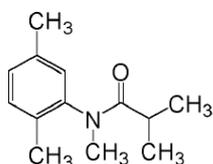
$^1\text{H NMR}$  (400 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ): 7,24-7,34 (m, 1H), 7,14 (d,  $J=7,5$  Hz, 1H), 6,90-7,03 (m, 2H), 3,27 (s, 3H), 2,38 (s, 3H), 2,13-2,27 (m, 1H), 1,52-1,70 (m, 2H), 1,26-1,45 (m, 2H), 0,81 (t,  $J=7,5$  Hz, 6H)

2-etil-*N*-metil-*N*-(*o*-tolil)butanamida (Estructura 21)



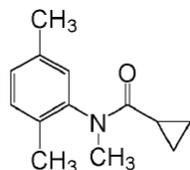
5  $^1\text{H NMR}$  (500 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ): 7,16-7,33 (m, 3H), 7,08 (dd,  $J=7,6$ , 1,3 Hz, 1H), 3,16 (s, 3H), 2,23 (s, 3H), 1,87-1,97 (m, 1H), 1,57 (dq,  $J=14,0$ , 7,2 Hz, 2H), 1,28-1,47 (m, 2H), 0,77 (td,  $J=7,4$ , 2,5 Hz, 6H)

*N*-(2,5-dimetilfenil)-*N*-metilisobutiramida (Estructura 22)



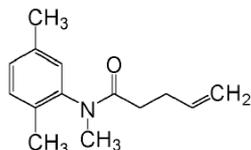
10  $^1\text{H NMR}$  (400 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ): 7,19 (d,  $J=7,8$  Hz, 1H), 7,09 (dd,  $J=7,8$ , 1,1 Hz, 1H), 6,94 (d,  $J=1,1$  Hz, 1H), 3,18 (s, 3H), 2,35 (s, 3H), 2,28-2,39 (m, 1H), 2,19 (s, 3H), 1,04 (dd,  $J=6,7$ , 4,8 Hz, 6H)

*N*-(2,5-dimetilfenil)-*N*-metilciclopropanocarboxamida (Estructura 23)



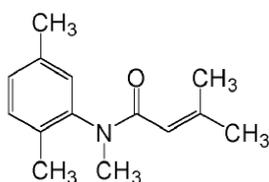
$^1\text{H NMR}$  (500 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ): 7,17 (d,  $J=7,9$  Hz, 1H), 7,07 (d,  $J=7,9$  Hz, 1H), 7,02 (s, 1H), 3,19 (s, 3H), 2,34 (s, 3H), 2,22 (s, 3H), 1,16-1,32 (m, 1H), 0,91-1,02 (m, 2H), 0,50-0,66 (m, 2H)

15 *N*-(2,5-Dimetilfenil)-*N*-metilpent-4-enamida (Estructura 24)



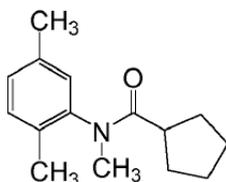
$^1\text{H NMR}$  (400 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ): 7,15-7,21 (m, 1H), 7,09 (dd,  $J=7,8$ , 1,1 Hz, 1H), 6,92 (d,  $J=1,1$  Hz, 1H), 5,75 (ddt,  $J=17,0$ , 10,3, 6,6 Hz, 1H), 4,85-5,04 (m, 2H), 3,18 (s, 3H), 2,28-2,40 (m, 2H), 2,34 (s, 3H), 2,18 (s, 3H), 2,07-2,17 (m, 1H), 1,91-2,03 (m, 1H)

20 *N*-(2,5-Dimetilfenil)-*N*,3-dimetilbut-2-enamida (Estructura 25)



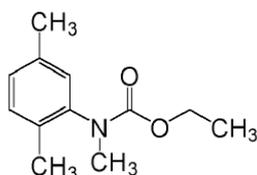
<sup>1</sup>H NMR (500 MHz, CDCl<sub>3</sub>): 7,06 (d, J=7,9 Hz, 1H), 6,94-7,01 (m, 1H), 6,83 (s, 1H), 5,17-5,38 (m, 1H), 3,11 (s, 3H), 2,25 (s, 3H), 2,09 (d, J=1,3 Hz, 3H), 2,05 (s, 3H), 1,58 (d, J=0,9 Hz, 3H)

*N*-(2,5-dimetilfenil)-*N*-metilciclopentanocarboxamida (Estructura 26)



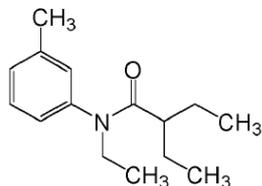
5 <sup>1</sup>H NMR (400 MHz, CDCl<sub>3</sub>): 7,18 (d, J=7,7 Hz, 1H), 7,09 (dd, J=7,7, 1,4 Hz, 1H), 6,93 (d, J=1,4 Hz, 1H), 3,18 (s, 3H), 2,35 (s, 3H), 2,30-2,47 (m, 1H), 2,19 (s, 3H), 1,50-1,92 (m, 6H), 1,35-1,48 (m, 2H)

(2,5-dimetilfenil)(metil)carbamato de etilo (Estructura 28)



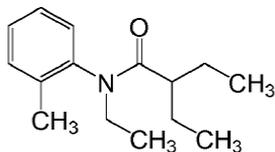
10 <sup>1</sup>H NMR (400 MHz, CDCl<sub>3</sub>): 7,13 (d, J=7,8 Hz, 1H), 7,03 (br d, J=7,8 Hz, 1H), 6,94 (s, 1H), 3,96-4,33 (m, 2H), 3,20 (s, 3H), 2,33 (s, 3H), 2,18 (s, 3H), 1,17 (t, J=7,0 Hz, 3H)

*N*,2-dietil-*N*-(*m*-tolil)butanamida (Estructura 29)



<sup>1</sup>H NMR (400 MHz, CDCl<sub>3</sub>): 7,25-7,35 (m, 1H), 7,15 (d, J=7,4 Hz, 1H), 6,83-6,97 (m, 2H), 3,75 (q, J=7,2 Hz, 2H), 2,38 (s, 3H), 2,03-2,15 (m, 1H), 1,52-1,74 (m, 2H), 1,28-1,42 (m, 2H), 1,12 (t, J=7,2 Hz, 3H), 0,80 (t, J=7,4 Hz, 6H)

15 *N*,2-dietil-*N*-(*o*-tolil)butanamida (Estructura 30)



<sup>1</sup>H NMR (400 MHz, CDCl<sub>3</sub>): 7,19-7,41 (m, 3H), 7,10 (d, J=7,4 Hz, 1H), 4,14-4,32 (m, 1H), 2,99-3,26 (m, 1H), 2,26 (s, 3H), 1,75-1,95 (m, 1H), 1,52-1,72 (m, 2H), 1,30-1,49 (m, 2H), 1,14 (t, J=7,2 Hz, 3H), 0,81 (t, J=7,4, 3H), 0,80 (t, J=7,4, 3H)

### Ejemplo V

20 Las propiedades de fragancia de los compuestos arriba mencionados fueron evaluadas usando (i) intensidad de olor de 0 a 10, donde 0 = ninguno, 1 = muy débil, 5 = moderado, 10 = extremadamente fuerte; y (ii) nivel de complejidad, donde 0 = ninguna, 1 = muy baja, 5 = moderada, 10 = extremadamente alta. Los resultados promediados se indican a continuación:

ES 2 751 901 T3

Compuesto	Perfil del olor	Intensidad	Complejidad
<i>N</i> -(3-metoxifenil)- <i>N</i> ,2-dimetilbutanamida (Estructura 1)	Jugoso, parecida a la manzana y pera madura, natural y atractiva	8	9
2-etil- <i>N</i> -(3-metoxifenil)- <i>N</i> -metilbutanamida (Estructura 2)	Fresco, jugoso, similar al pomelo y guayaba dulce, similar a grosella negra. Las notas frutales parecieron carnosas, maduras, azucaradas, ácidas y agrias y naturales	9	9
2-etil- <i>N</i> -(3-metoxifenil)butan-1-imina (Estructura 3)	Frutado, solvente, químico y sucio	3	3
2-etil- <i>N</i> -(3-metoxifenil)butanamida (Estructura 4)	Almizclado y pulverulento con de carácter picante	3	3
<i>N</i> -(3-metoxifenil)- <i>N</i> -metilbut-2-enamida (Estructura 5)	Frutado, resinoso y sucio	2	2
<i>N</i> -(3-metoxifenil)- <i>N</i> -metilisobutiramida (Estructura 6)	Frutado, azucarado y químico de carácter similar al látex	2	2
<i>N</i> -(3-metoxifenil)- <i>N</i> -metilciclopropanocarboxamida (Estructura 7)	Similar a cebolla, sucio	2	2
<i>N</i> -(3-metoxifenil)- <i>N</i> -metilpent-4-enamida (Estructura 8)	Similar a cebolla, sucio	3	2
( <i>E</i> )- <i>N</i> -(3-metoxifenil)- <i>N</i> ,2-dimetilbut-2-enamida (Estructura 9)	Frutado pero muy débil	1	1
<i>N</i> -(3-metoxifenil)- <i>N</i> ,3-dimetilbut-2-enamida (Estructura 10)	Floral y dulce pero débil y simple	3	3
<i>N</i> -(3-metoxifenil)- <i>N</i> -metilciclopentanocarboxamida (Estructura 11)	Amaderado, solvente y sucio	3	3
2-etil- <i>N</i> -(3-metoxifenil)- <i>N</i> -metilhexanamida (Estructura 12)	Frutado débil	1	1
(3-metoxifenil)(metil) carbamato de etilo (Estructura 13)	Dulce azucarado con matices similares al caramelo y un toque de fruta pero débil	2	2
<i>N</i> ,2-dietil- <i>N</i> -(3-metoxifenil)butanamida (Estructura 14)	Dulce y frutado pero débil	2	2
2-etil- <i>N</i> -(2-metoxifenil)- <i>N</i> -metilbutanamida (Estructura 15)	Frutado y resinoso, muy débil	2	2
<i>N</i> ,2-dietil- <i>N</i> -(2-metoxifenil)butanamida (Estructura 16)	Ácido y sucio	2	2
2-etil- <i>N</i> -(4-metoxifenil)butanamida (Estructura 17)	Floral pero débil	2	2
2-etil- <i>N</i> -(4-metoxifenil)- <i>N</i> -metilbutanamida (Estructura 18)	Floral débil y sucio	4	3

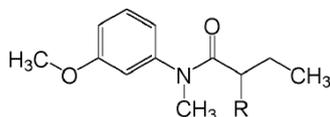
ES 2 751 901 T3

Compuesto	Perfil del olor	Intensidad	Complejidad
<i>N</i> -(2,5-dimetilfenil)-2-etilbutan-1-imina (Estructura 19)	Indólico y alcanfor, como fruta madura, dulce y solvente	7	4
2-etil- <i>N</i> -metil- <i>N</i> -( <i>m</i> -tolil)butanamida (Estructura 20)	Similar al pomelo con características verdes y cualidad agria	6	7
2-etil- <i>N</i> -metil- <i>N</i> -( <i>o</i> -tolil)butanamida (Estructura 21)	Cítrico, parecido al pomelo y jugoso, rústico	4	3
<i>N</i> -(2,5-dimetilfenil)- <i>N</i> -metilisobutiramida (Estructura 22)	Frutado, verde, similar al pomelo, químico y similar al látex	3	3
<i>N</i> -(2,5-dimetilfenil)- <i>N</i> -metilciclopropanocarboxamida (Estructura 23)	Hierbas aromáticas y dulces pero débiles	2	2
<i>N</i> -(2,5-dimetilfenil)- <i>N</i> -metilpent-4-enamida (Estructura 24)	Ligeramente frutado, similar al ajo y sucio	2	1
<i>N</i> -(2,5-dimetilfenil)- <i>N</i> ,3-dimetilbut-2-enamida (Estructura 25)	Floral de carácter picante	3	3
<i>N</i> -(2,5-dimetilfenil)- <i>N</i> -metilciclopentanocarboxamida (Estructura 26)	Herbáceo, cítrico, sintético, solvente y similar al látex	4	7
<i>N</i> -(2,5-dimetilfenil)-2-etil- <i>N</i> -metilhexanamida (Estructura 27)	Como nuez y dulce pero débil	2	2
(2,5-dimetilfenil)(metil)carbamato de etilo (Estructura 28)	Amaderado y fresco pero muy débil	1	1
<i>N</i> ,2-dietil- <i>N</i> -( <i>m</i> -tolil)butanamida (Estructura 29)	Frutado muy débil	1	1
<i>N</i> ,2-dietil- <i>N</i> -( <i>o</i> -tolil)butanamida (Estructura 30)	Frutado, solvente y muy débil	1	1

La *N*-(3-metoxifenil)-*N*,2-dimetilbutanamida y la 2-etil-*N*-(3-metoxifenil)-*N*-metilbutanamida presentaron notas únicas y particularmente deseables. Sus perfiles de olor son fuertes y complejos, superiores a todos los demás compuestos análogos. Tales propiedades ventajosas son imprevistas.

## REIVINDICACIONES

1. Un compuesto de fórmula:



en donde R se selecciona del grupo que comprende metilo y etilo.

- 5 2. Una formulación de fragancia que comprende el compuesto según la reivindicación 1.
3. La formulación de fragancia de la reivindicación 2, en la que el compuesto está presente en una cantidad de aproximadamente 0,005 a aproximadamente el 50 por ciento en peso de la formulación de fragancia.
4. La formulación de fragancia de la reivindicación 2, en la que el compuesto está presente en una cantidad de aproximadamente 0,5 a aproximadamente el 25 por ciento en peso de la formulación de fragancia.
- 10 5. La formulación de fragancia de la reivindicación 2, en la que el compuesto está presente en una cantidad de aproximadamente 1 a aproximadamente 10 por ciento en peso de la formulación de fragancia.
6. La formulación de fragancia de cualquiera de las reivindicaciones 2 a 5, que comprende además un material seleccionado del grupo formado por un polímero, un oligómero y un no polímero.
- 15 7. La formulación de fragancia de la reivindicación 6, en la que el polímero se selecciona del grupo compuesto de poliacrilato, poliurea, poliuretano, poliacrilamida, poliéster, poliéter, poliamida, poli(acrilato-co-acrilamida), almidón, sílice, gelatina y goma arábiga, alginato, quitosano, polilactida, poli(melamina-formaldehído), poli(urea-formaldehído) y una combinación de los mismos.
8. Un método para mejorar, realzar o modificar una formulación de fragancia que consiste en añadir el compuesto de la reivindicación 1 a la formulación de fragancia.
- 20 9. El método de la reivindicación 8, en donde el compuesto está presente en una cantidad de aproximadamente 0,005 a aproximadamente 50 por ciento en peso de la formulación de fragancia.
10. El método de la afirmación 8, en el que el compuesto está presente en una cantidad de aproximadamente 0,5 a aproximadamente el 25 por ciento en peso de la formulación de fragancia.
- 25 11. El método de la reivindicación 8, en el que el compuesto está presente en una cantidad de aproximadamente 1 a aproximadamente 10 por ciento en peso de la formulación de fragancia.
12. Un producto de fragancia que contiene el compuesto de la reivindicación 1.
13. El producto de fragancia de la reivindicación 12, en el que se selecciona el producto de fragancia del grupo que consiste en un perfume, una colonia, agua de tocador, un producto cosmético, un producto para el cuidado personal, un producto para el cuidado de telas, un producto de limpieza y un ambientador, un jabón en barra, un jabón líquido, un gel de ducha, espuma para baño, un cosmético, un producto para el cuidado de la piel, un producto para el cuidado del cabello, un desodorante, un antitranspirante, un producto para el cuidado femenino, un producto para el cuidado del bebé, un producto para el cuidado de la familia, un producto textil, un producto para el cuidado del aire, un sistema de distribución de fragancias, un preparado cosmético, un agente de limpieza, un desinfectante, un agente de lavado, un producto de higiene dental y bucal, un producto para el cuidado de la salud y nutricional, un producto alimenticio y sus combinaciones.
- 30 14. El producto de fragancia de la reivindicación 13, en la que el producto de limpieza se selecciona del grupo que consiste en un detergente, un material para lavar platos, una composición de lavado, un limpiador de cristales, un limpiador de metales, un limpiador de encimeras, un limpiador de pisos, un limpiador de alfombras, un limpiador de inodoro, un aditivo de lejía y combinaciones de los mismos.
- 35 15. El producto de fragancia de cualquiera de las reivindicaciones 13 y 14, en las que el agente de lavado se selecciona del grupo que consiste en un detergente para ropa, un aditivo para aclarado y combinaciones de los mismos.
- 40