(19) OFICINA ESPAÑOLA DE PATENTES Y MARCAS

ESPAÑA

(11) Número de publicación: **2 797 925**

(51) Int. Cl.:

C07C 31/137	(2006.01)
C07C 49/323	(2006.01)
C07C 49/443	(2006.01)
C07C 35/32	(2006.01)
A61K 8/33	(2006.01)
A61K 8/35	(2006.01)
A61K 8/34	(2006.01)
A61K 8/31	(2006.01)
A61Q 13/00	(2006.01)

(12) TRADUCCIÓN DE PATENTE EUROPEA T3

(86) Fecha de presentación y número de la solicitud internacional: **12.10.2016** **PCT/US2016/056486**

(87) Fecha y número de publicación internacional: **20.04.2017** **WO17066214**

(96) Fecha de presentación y número de la solicitud europea: **12.10.2016** **E 16856052 (2)**

(97) Fecha y número de publicación de la concesión europea: **06.05.2020** **EP 3362428**

(54) Título: **Nuevos compuestos de octahidroindenil propanal**

(30) Prioridad:

12.10.2015 US 201562240238 P

(45) Fecha de publicación y mención en BOPI de la traducción de la patente:
04.12.2020

(73) Titular/es:

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

(72) Inventor/es:

JONES, PAUL D.;
BELKO, ROBERT P.;
LEVORSE, JR., ANTHONY T.;
GIFFIN, NICOLE L. y
NARULA, ANUBHAV P.S.

(74) Agente/Representante:

LEHMANN NOVO, María Isabel

ES 2 797 925 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

Nuevos compuestos de octahidroindenil propanal

Campo de la invención

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

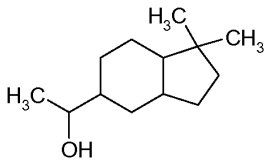
Antecedentes de la Invención

Existe una necesidad continua en la industria de las fragancias de proporcionar nuevos productos químicos para dar a los perfumistas y otras personas la capacidad de crear nuevas fragancias para perfumes, colonias y productos para el cuidado personal. Los expertos en la técnica aprecian cómo pequeñas diferencias en las estructuras químicas pueden dar lugar a diferencias inesperadas y significativas en el olor, las notas y las características de las moléculas. Estas variaciones permiten a los perfumistas y a otras personas aplicar nuevos compuestos para crear nuevas fragancias. Por ejemplo, los compuestos de benceno que difieren ligeramente en los sustituyentes poseen perfiles de olor completamente diferentes [Ishikawa, *et al.*, International Journal of Quantum Chemistry 79: 101-108 (2000)]. En el caso de terc.-butilciclohexanos se dice que el olor depende de la conformación de los compuestos y, por lo tanto, los análogos que adoptan la misma conformación poseen un olor similar. Por consiguiente, se demuestra que muchos compuestos trans comparten un olor pronunciado del tipo de la transpiración de la orina, mientras que los compuestos cis correspondientes son inodoros o, a lo sumo, poseen un olor a flores o leñoso débil e indefinible. Sin embargo, se ha demostrado que algunos otros trans- y cis-terc.-butilciclohexanos poseen actividades sensoriales opuestas [Ohloff, e*t al.*, Helvetica Chimica Acta 66, Fasc. 5: 1343-1354 (1983)]. Por lo tanto, es difícil para aquellos con habilidad en la técnica predecir que una estructura dada sería efectiva en actividades sensoriales. La identificación de productos químicos de fragancias deseables continúa planteando desafíos difíciles. El documento EP0825166 se refiere a hexahidroindanoles sustituidos con metilo y a sus usos en perfumería. El documento EP1262481 se refiere a naftofuranos y naftofuranos hidrogenados y a su uso en fragancias. El documento US7176324 describe compuestos de hexahidroindan acetal y cetal y su uso en fragancias. El documento US2004/110991 describe derivados químicos polialquilobicíclicos en fragancias. El documento US5002929 describe derivados de trimetilbiciclo-[4.3.0]-nonano que son útiles como perfumes.

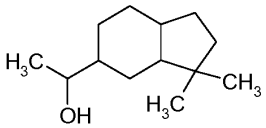
Sumario de la Invención

La presente invención proporciona nuevos compuestos, el uso ventajoso inesperado de los mismos en la potenciación, mejora o modificación de la fragancia de perfumes, colonias, aguas de tocador, productos para el cuidado de tejidos, productos para el cuidado personal, y similares.

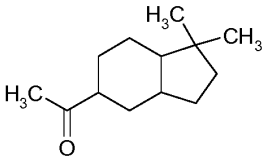
La presente invención se refiere a nuevos octahidro-indenos representados por las fórmulas indicadas a continuación:



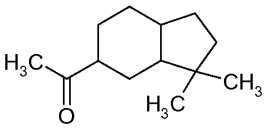
Fórmula IIa



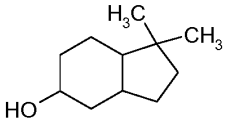
Fórmula IIb



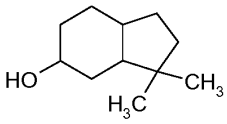
Fórmula IIIa



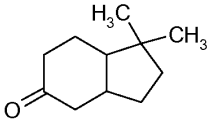
Fórmula IIIb



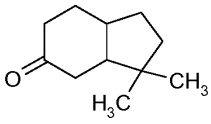
Fórmula Va



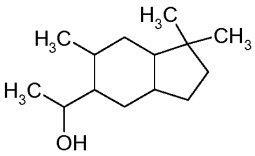
Fórmula Vb



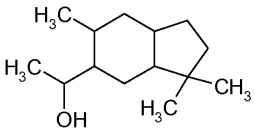
Fórmula VIa



Fórmula VIb



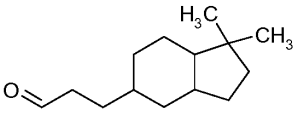
Fórmula XVa



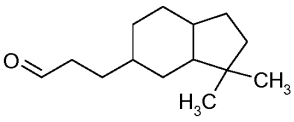
Fórmula XVb

en donde la Fórmula IIa representa 1-(1,1-dimetil-octahidro-inden-5-il)-etanol;
la Fórmula IIb representa 1-(3,3-dimetil-octahidro-inden-5-il)-etanol;
la fórmula IIIa representa 1-(1,1-dimetil-octahidro-inden-5-il)-etanona
la Fórmula IIIb representa 1-(3,3-dimetil-octahidro-inden-5-il)-etanona;
la Fórmula Va representa 1,1-dimetil-octahidro-inden-5-ol;
la Fórmula Vb representa 3,3-dimetil-octahidro-inden-5-ol;
la Fórmula VIa representa 1,1-dimetil-octahidro-inden-5-ona;
la Fórmula VIb representa 3,3-dimetil-octahidro-inden-5-ona;
la Fórmula XVa representa 1-(1,1,6-trimetil-octahidro-inden-5-il)-etanol;
la Fórmula XVb representa 1-(3,3,6-trimetil-octahidro-inden-5-il)-etanol;

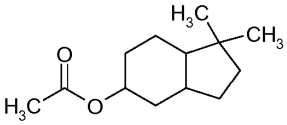
Para referencia solamente, los siguientes octahidro indenos están representados por las fórmulas indicadas a continuación:



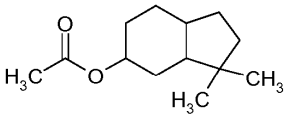
Fórmula Ia



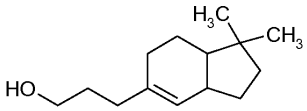
Fórmula Ib



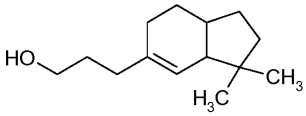
Fórmula IVa



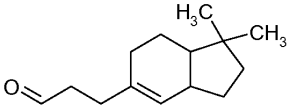
Fórmula IVb



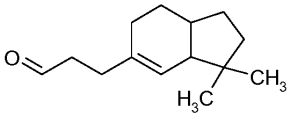
Fórmula VIIa



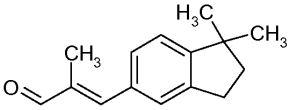
Fórmula VIIb



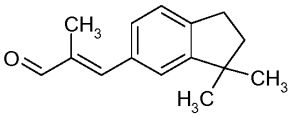
Fórmula VIIIa



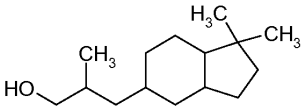
Fórmula VIIIb



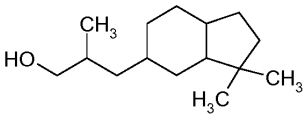
Fórmula IXa



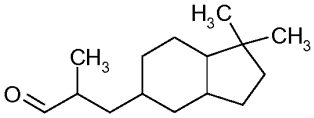
Fórmula IXb



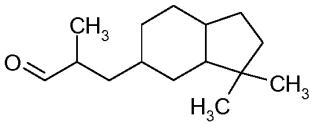
Fórmula Xa



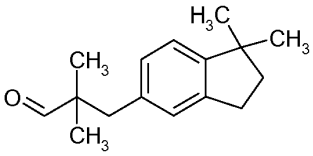
Fórmula Xb



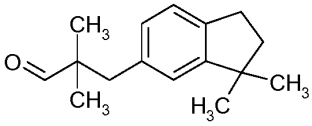
Fórmula XIa



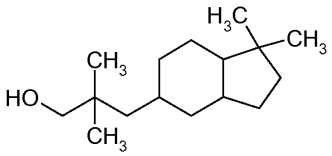
Fórmula XIb



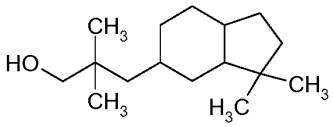
Fórmula XIIa



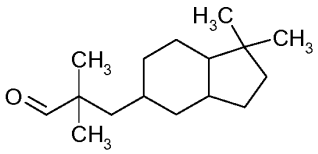
Fórmula XIIb



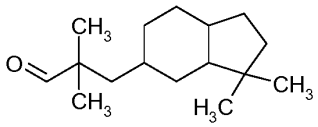
Fórmula XIIIa



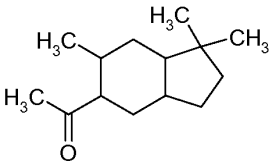
Fórmula XIIIb



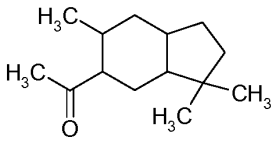
Fórmula XIVa



Fórmula XIVb



Fórmula XVIa



Fórmula XVIb

en donde

la Fórmula Ia representa 3-(1,1-dimetil-octahidro-inden-5-il)-propanal;
la Fórmula Ib representa 3-(3,3-dimetil-octahidro-inden-5-il)-propanal;
la Fórmula IVa representa acetato de 1,1-dimetil-octahidro-inden-5-ilo;
la Fórmula IVb representa acetato de 3,3-dimetil-octahidro-inden-5-ilo;
la Fórmula VIIa representa 3-(1,1-dimetil-2,3,3a,6,7,7a-hexahidro-1H-inden-5-il)-propan-1-ol;
la Fórmula VIIb representa 3-(3,3-dimetil-2,3,3a,6,7,7a-hexahidro-1H-inden-5-il)-propan-1-ol;
la Fórmula VIIIa representa 3-(1,1-dimetil-2,3,3a,6,7,7a-hexahidro -1H-inden-5-il)-propanal;
la Fórmula VIIIb representa 3-(3,3-dimetil-2,3,3a,6,7,7a-hexahidro-1H-inden-5-il)-propanal;
la Fórmula IXa representa (E)-3-(1,1-dimetil-indan-5-il)-2-metil-propenal;
la Fórmula IXb representa (E)-3-(3,3-dimetil-indan-5-il)-2-metil-propenal;
la Fórmula Xa representa 3-(1,1-dimetil-octahidro-inden-5-il)-2-metil-propan-1-ol;
la Fórmula Xb representa 3-(3,3-dimetil-octahidro-inden-5-il)-2-metil-propan-1-ol;
la Fórmula XIa representa 3-(1,1-dimetil-octahidro-inden-5-il)-2-metil-propanal;
la Fórmula XIb representa 3-(3,3-dimetil-octahidro-inden-5-il)-2-metil-propanal;
la Fórmula XIIa representa 3-(1,1-dimetil-indan-5-il)-2,2-dimetil-propanal;
la Fórmula XIIb representa 3-(3,3-dimetil-indan-5-il)-2,2-dimetil-propanal;
la Fórmula XIIIa representa 3-(1,1-dimetil-octahidro-inden-5-il)-2,2-dimetil-propan-1-ol;
la Fórmula XIIIb representa 3-(3,3-dimetil-octahidro-inden-5-il)-2,2-dimetil-propan-1-ol;
la Fórmula XIVa representa 3-(1,1-dimetil-octahidro-inden-5-il)-2,2-dimetil-propionaldehído;
la Fórmula XIVb representa 3-(1,1-dimetil-octahidro-inden-5-il)-2,2-dimetil-propionaldehído;
la Fórmula XVIa representa 1-(1,1,6-trimetil-octahidro-inden-5-il)-etanona; y
la Fórmula XVIb representa 1- (3,3,6-trimetil-octahidro-inden-5-il)-etanona.

En concreto, en un primer aspecto, la presente invención proporciona un compuesto seleccionado del grupo que consiste en:

1-(1,1-dimetil-octahidro-inden-5-il)-etanol;
1-(3,3-dimetil-octahidro-inden-5-il)-etanol;
1-(1,1-dimetil-octahidro-inden-5-il)-etanona;
1-(3,3-dimetil-octahidro-inden-5-il)-etanona;
1,1-dimetil-octahidro-inden-5-ol;

3,3-dimetil-octahidro-inden-5-ol;
1,1-dimetil-octahidro-inden-5-ona;
3,3-dimetil-octahidro-inden-5-ona;
1-(1,1,6-trimetil-octahidro-inden-5-il)-etanol;
1-(3,3,6-trimetil-octahidro-inden-5-il)-etanol; y
una mezcla de los mismos.

En otro aspecto, la invención proporciona un método para contrarrestar el mal olor en un espacio de aire o un sustrato, que comprende la etapa de introducir una cantidad eficaz para contrarrestar el mal olor de un compuesto de la invención.

En otro aspecto, la invención proporciona una formulación de fragancia que comprende una cantidad olfatoria aceptable de un compuesto seleccionado del grupo que consiste en
1-(1,1-dimetil-octahidro-inden-5-il)-etanol;
1-(3,3-dimetil-octahidro-inden-5-il)-etanol;
1-(1,1-dimetil-octahidro-inden-5-il)-etanona;
1-(3,3-dimetil-octahidro-inden-5-il)-etanona;
1,1-dimetil-octahidro-inden-5-ol;
3,3-dimetil-octahidro-inden-5-ol;
1,1-dimetil-octahidro-inden-5-ona;
3,3-dimetil-octahidro-inden-5-ona;
1-(1,1,6-trimetil-octahidro-inden-5-il)-etanol;
1-(3,3,6-trimetil-octahidro-inden-5-il)-etanol; y
una mezcla de los mismos.

En otro aspecto, la invención proporciona un método para mejorar, potenciar o modificar una formulación de fragancia a través de la adición de una cantidad olfatoria aceptable de un compuesto seleccionado del grupo que consiste en:
1-(1,1dimetil-octahidro-inden-5-il)-etanol;
1-(3,3-dimetil-octahidro-inden-5-il)-etanol;
1-(1,1-dimetil-octahidro-inden-5-il)-etanona;
1-(3,3-dimetil-octahidro-inden-5-il)-etanona;
1,1-dimetil-octahidro-inden-5-ol;
3,3-dimetil-octahidro-inden-5-ol;
1,1-dimetil-octahidro-inden-5-ona;
3,3-dimetil-octahidro-inden-5-ona;
1-(1,1,6-trimetil-octahidro-inden-5-il)-etanol;
1-(3,3,6-trimetil-octahidro-inden-5-il)-etanol; y
una mezcla de los mismos.

En otro aspecto, la invención proporciona un producto de fragancia que contiene una cantidad olfatoria aceptable de un compuesto de la invención.

Realizaciones de la presente invención resultarán evidentes leyendo la siguiente memoria descriptiva.

Descripción Detallada de la Invención

Los compuestos de la presente invención se pueden preparar de acuerdo con las etapas de reacción detalladas en los Ejemplos. Los materiales y catalizadores se adquirieron de Sigma-Aldrich Chemical Company, a menos que se indique lo contrario. Los expertos en la técnica reconocerán, además, que algunos de los compuestos de la presente invención tienen un cierto número de centros quirales, proporcionando con ello numerosos isómeros de los compuestos reivindicados. Se pretende en esta memoria que los compuestos descritos en esta memoria incluyan mezclas isoméricas de tales compuestos, así como aquellos isómeros que pueden separarse utilizando técnicas conocidas por los expertos en la técnica. Técnicas adecuadas incluyen, por ejemplo, la destilación y la cromatografía, tal como la cromatografía líquida de alto rendimiento, a la que se alude como HPLC, particularmente el cromatógrafo de gel de sílice, y el atrapamiento por cromatografía de gases conocido como atrapamiento por GC. Sin embargo, los productos comerciales se ofrecen principalmente como mezclas isoméricas.

Sorprendentemente, se encuentra que los compuestos de la presente invención poseen un potente y complejo efecto de fragancia tal como, por ejemplo, notas florales y de muguet.

El uso de los compuestos de la presente invención es ampliamente aplicable a 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 los tejidos, ambientadores y preparaciones cosméticas. La presente invención también se puede utilizar para perfumar agentes de limpieza, tales como, pero no limitados a detergentes, materiales para el lavado de la vajilla, composiciones para fregar, limpiadores de ventanas, y similares. En estas preparaciones, los compuestos de la presente invención pueden utilizarse solos o en combinación con otras composiciones perfumantes, disolventes, adyuvantes y similares. Los expertos en la técnica conocen la naturaleza y diversidad de los otros ingredientes que también pueden emplearse. Se pueden emplear muchos tipos de fragancias en la presente invención, siendo la única limitación la compatibilidad con los otros componentes que se emplean. Fragancias adecuadas incluyen, pero no se limitan a frutas, tales como almendra, manzana, cereza, uva, pera, piña tropical, naranja, fresa, frambuesa; almizcle, aromas de flores, tales como tipo lavanda, tipo rosa, tipo iris, tipo clavel. Otros aromas agradables incluyen aromas de hierbas y bosques derivados del pino, el abeto y otros olores del bosque. Las fragancias también pueden derivarse de diversos aceites, tales como aceites esenciales, o de materiales vegetales, tales como menta piperita, menta verde, y similares.

Una lista de fragancias adecuadas se proporciona en la Patente de EE.UU. Nº 4.534.891. Otra fuente de fragancias adecuadas se encuentra en Perfumes, Cosmetics and Soaps, Segunda Edición, editada por W. A. Poucher, 1959. Entre las fragancias proporcionadas en este tratado se encuentran acacia, cassie, chipre, ciclamen, helecho, gardenia, espino, heliotropo, madreselva, jacinto, jazmín, lila, lirio, magnolia, mimosa, narciso, heno recién cortado, azahar, orquídea, reseda, arveja dulce, trébol, nardo, vainilla, violeta, alhelí y similares.

Los compuestos de la presente invención se pueden utilizar en combinación con un compuesto de fragancia complementario. La expresión "compuesto de fragancia complementario" tal como se utiliza en esta memoria se define como un compuesto de fragancia seleccionado del grupo que consiste en 2-[(4-metilfenil)metileno]-heptanal (Acalea), éster alílico del ácido iso-amiloxiacético (Glicolato de Alil Amilo), propano-1,3-dioato de (3,3-dimetilciclohexil)etil etilo (Applelide), octahidro-4,7-metano-1H-indeno-5-acetaldehído; (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), trimetilciclopentenilmetiloxabiciclooctano (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-*1H*-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 (Damascona Delta), malonato de (1S)-1-[(1R)-3,3-dimetilciclohexil]etil etilo, 4-etiloctanal, 3-(4-etil-fenil)-2,2-dimetil propanonitrilo (Fleuranil), 3-(O/P-etilfenil) 2,2-dimetil propionaldehído (Floralozone), tetrahidro-4-metil-2-(2-metilpropil)-2H-piran-4-ol (Floriffol), 1,3,4,6,7,8-hexahidro-4,6,6,7,8,8-hexametilciclopenta-gamma-2-benzopirano (galaxolida), 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), 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-metilciclohexanocarboxilato de metilo, 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-ciclohexeno-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), ciclopropanocarboxilato de [(Z)-hex-3-enilo], 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 (Nebulona), acetato de 3,7-dimetil-2,6-octadien-1-ilo (Acetato de Nerilo), 3,7-dimetil-1,3,6-octatrieno (Ocimeno), dec-6 o 7 u 8-enal, 2,2,6,6,7,8,8-heptametil-4,5,6,7,8,8B-hexahidro-3AH-indeno[4,5-D][1,3]dioxol, cis-1-(1,1-dimetilpropil)-4-etoxiciclohexano, orto-toliletanol (Peomosa), 3-metil-5-fenilpentanol (Fenoxanol), 1-metil-4-(4-metil-3-pentenil)ciclohex-3-eno-1-carboxaldehído (Preciclemona B), 4-metil-8-metileno-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), 7,7,8,9,9-pentametil-6,7,8,9-tetrahidro-5H-ciclopenta[H]quinazolina, 3-[cis-4-(2-metilpropil)ciclohexil]propanal, 4-(heptiloxi)-3-metilbutanal, Terpineol, 2,4-dimetil-3-ciclohexeno-1-carboxaldehído (Triplal), decahidro-2,6,6,7,8,8-hexametil-2H-indeno[4,5-B]furano (Trisamber), biciclo[2.2.1]hept-5-eno-2-carboxilato de etilo, 3,4,5-trimetiloctahidro-1H-4,7-metanoinden-5-ol, acetato de 2-terc.-butilciclohexilo (Verdox), (3E)-4-metildec-3-en-5-ona, acetato de 4-terc.-butilciclohexilo (Vertenex), acetil cedreno (Vertofix), 3,6/4,6-dimetilciclohex-3-eno-1-carboxaldehído (Vertoliff) y (3Z)-1-[(2-metil-2-propenil)oxi]-3-hexeno (Vivaldie).

La complejidad de las notas de olor se refiere a la presencia de olores múltiples y/o mixtos pero definidos en lugar de una sola nota o unas pocas notas fácilmente identificables. También se asignan altos niveles de complejidad a los compuestos que poseen notas ambiguas y, de alguna manera, difíciles de definir debido a la contribución directa o a las muchas combinaciones olfatorias de olores producidos. Los materiales de fragancia de alto nivel de complejidad se consideran inusuales y de alta calidad.

Las expresiones "formulación de fragancia", "composición de fragancia" y "composición de perfume" significan lo mismo y se refieren a una composición de consumo que es una mezcla de compuestos que incluyen, por ejemplo,

alcoholes, aldehídos, cetonas, ésteres, éteres, lactonas, nitrilos, aceites naturales, aceites sintéticos y mercaptanos, que se mezclan de modo que los olores combinados de los componentes individuales produzcan una fragancia agradable o deseada. La formulación de fragancia de la presente invención es una composición de consumo que comprende un compuesto de la presente invención. La formulación de fragancia de la presente invención puede comprender un compuesto de la presente invención y, además, un compuesto de fragancia complementario como se definió arriba.

La expresión "producto de fragancia" significa un producto de consumo que contiene un ingrediente de fragancia que añade fragancia o enmascara el mal olor. Productos de fragancia pueden incluir, por ejemplo, perfumes, colonias, jabones en pastilla, jabones líquidos, geles de baño, 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 el lavado con champú, aclarado, acondicionamiento, blanqueo, colorantes, tinte y peinados, 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 pañuelos de baño, pañuelos faciales, pañuelos de papel o toallas 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 distribución de fragancias, preparaciones cosméticas, agentes de limpieza y desinfectantes, tales como detergentes, materiales para lavar la vajilla, composiciones para fregar, limpiadores de vidrio y metal, tales como limpiadores de ventanas, limpiadores de encimeras, limpiadores de suelos y alfombras, limpiadores de inodoros y aditivos de blanqueo, agentes de lavado, tales como de todo uso, de acción enérgica y de lavado a mano o agentes para el lavado de tejidos delicados, incluyendo detergentes para la ropa y aditivos para el aclarado, productos de higiene dental y oral tales como pastas dentífricas, geles dentífricos, hilo dental, limpiadores de dentaduras postizas, adhesivos para dentaduras postizas, dentífricos, blanqueamiento dental y colutorios, productos para el cuidado de la salud y nutricionales y productos alimenticios, tales como productos para aperitivos y de 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 puede contener un compuesto de la presente invención y, además, un compuesto de fragancia complementario tal como se definió arriba.

El término "mejorar" en la expresión "mejorar, potenciar o modificar una formulación de fragancia" se entiende que significa el aumento de la formulación de fragancia a un carácter más deseable. Se entiende que el término "potenciador" significa aumentar la eficacia de la formulación de fragancia o proporcionar a la formulación de fragancia un carácter mejorado. Se entiende que el término "modificar" significa proporcionar a la formulación de fragancia un cambio de carácter.

La expresión "cantidad olfatoria aceptable" se entiende que significa la cantidad de un compuesto en una formulación de fragancia, en donde el compuesto contribuirá con sus características olfatorias individuales. Sin embargo, el efecto olfatorio de la formulación de fragancia será la suma del efecto de cada uno de los ingredientes de la fragancia. Por lo tanto, los compuestos de la presente invención pueden utilizarse para mejorar o potenciar las características de aroma de la formulación de fragancia, o para modificar la reacción olfatoria aportada por otros ingredientes en la formulación. La cantidad olfatoria aceptable puede variar dependiendo de muchos factores, incluidos otros ingredientes, sus cantidades relativas y el efecto olfativo que se desea.

La cantidad de los compuestos de la presente invención empleada en una formulación de fragancia varía de aproximadamente 0,005 a aproximadamente 70 por ciento en peso, preferiblemente de 0,05 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 y la intensidad de fragancia deseados. Además de los compuestos de la presente invención, también se pueden utilizar otros materiales junto con la formulación de fragancia para encapsular y/o administrar la fragancia. Algunos materiales bien conocidos son, por ejemplo, pero no se limitan a polímeros, oligómeros, otros no polímeros, tales como tensioactivos, emulsionantes, lípidos, incluyendo grasas, ceras y fosfolípidos, aceites orgánicos, aceites minerales, vaselina, aceites naturales, fijadores de perfume, fibras, almidones, azúcares y materiales de superficie sólida, tales como zeolita y sílice.

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

Además, también se encontró, sorprendentemente, que los compuestos de la presente invención proporcionan un rendimiento ingrediente superior y poseen ventajas inesperadas en aplicaciones que contrarrestan los malos olores, tales como transpiración del cuerpo, olor del entorno, tal como el moho y el mildiú, cuarto de baño, etc. Los compuestos

de la presente invención eliminan sustancialmente la percepción de malos olores y/o previenen la formación de dichos malos olores, por lo tanto, pueden utilizarse con una gran cantidad de productos funcionales.

En esta memoria se proporcionan ejemplos de los productos funcionales 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 convencional de ambientador (o desodorante) tal como pulverizadores de ambientadores, un aerosol u otro pulverizador, difusores de fragancia, una mecha u otro sistema líquido, o un sólido, por ejemplo velas o base de cera, tal como en almohadillas perfumadas y plásticos, polvos, tal como en bolsitas o pulverizadores secos o geles, tal como en barras de gel sólido, desodorantes de ropa según se emplean en aplicaciones de lavadoras, tal como en detergentes, polvos, líquidos, blanqueadores o suavizantes de tejidos, ambientadores de tejidos, pulverizadores de lino, bloques de armarios, pulverizadores de aerosol para armarios, o zonas de almacenamiento de ropa o en la limpieza en seco para superar las notas de disolventes residuales en la ropa, accesorios de baño, tales como toallas de papel, pañuelos de baño, compresas sanitarias, toallitas, paños de lavado desechables, pañales desechables y desodorantes para cubetas de pañales, limpiadores, tales como desinfectantes y limpiadores de inodoros, productos cosméticos, tales como antitranspirantes y desodorantes, desodorantes generales para el cuerpo en forma de polvos, aerosoles, líquidos o sólidos, o productos para el cuidado del cabello, tales como lacas para el cabello, acondicionadores, enjuagues, tintes y colorantes para el cabello, ondas permanentes, depilatorios, planchas para el cabello, aplicaciones para el cuidado del cabello, tales como pomadas, cremas y lociones, productos medicinales para el cuidado del cabello que contienen ingredientes como sulfuro de selenio, alquitrán de hulla o salicilatos, o champús, o productos para el cuidado de los pies, tales como polvos, líquidos o colonias para los pies, para después del afeitado y lociones corporales, o jabones y detergentes sintéticos, tales como pastillas, líquidos, espumas o polvos, control de olores, tales como durante los procesos de fabricación, tal como en la industria del acabado textil y la industria de la impresión (tintas y papel), control de efluentes, tal como en procesos implicados en la fabricación de pasta papelera, en el corral de ganado y en el procesamiento de carne, tratamiento de aguas residuales, bolsas de basura o eliminación de basura, o en el control del olor del producto, tal como en productos textiles terminados, productos terminados de caucho o ambientadores de automóviles, productos agrícolas y para el cuidado de mascotas, tales como efluentes de casitas de perro y gallineros y productos para el cuidado de animales domésticos y mascotas, tales como desodorantes, champús o agentes de limpieza, o material de basura animal y en sistemas cerrados a gran escala, tales como auditorios, y sistemas de metro y transporte.

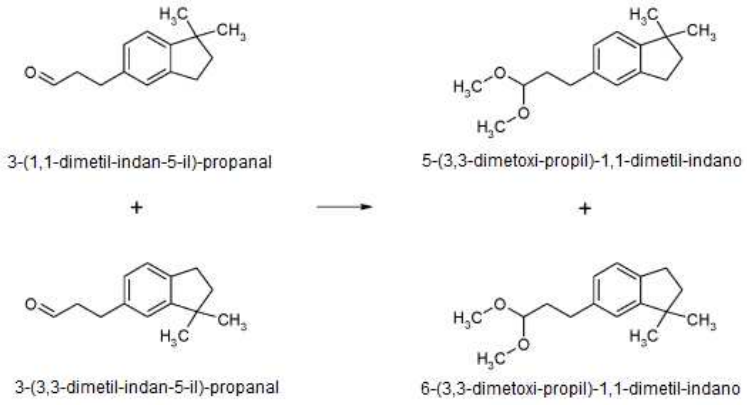
Por lo tanto, se verá que la composición de la invención es habitualmente una en la que el agente que contrarresta el mal olor está presente junto con un soporte por medio del cual o desde el cual el agente que contrarresta el mal olor se puede introducir en el espacio de aire en el que está presente el mal olor, o un sustrato sobre el cual se ha depositado el mal olor. Por ejemplo, el soporte puede ser un propulsor de aerosol, tal como un clorofluoro-metano, o un sólido, tal como una cera, material plástico, caucho, polvo inerte o gel. En un ambientador de tipo mecha, el soporte 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 en un sustrato fibroso. En muchas composiciones de la invención también está presente un componente de fragancia que imparte una fragancia a la composición. Las fragancias indicadas anteriormente se pueden emplear todas.

Se entiende que cantidad eficaz que contrarresta el mal olor significa la cantidad del agente que contrarresta el mal olor de la invención empleado en un producto funcional que es organolépticamente efectivo para reducir un mal olor, al tiempo que reduce la intensidad combinada del nivel de olor, en donde 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 soporte empleado y del nivel de agente que contrarresta el mal olor deseado. En general, la cantidad de agente que contrarresta el mal olor presente es la dosis ordinaria requerida para obtener el resultado deseado. Dicha dosis es conocida por el experto en la técnica. En una realización preferida, cuando se utiliza junto con productos funcionales sólidos o líquidos malolientes, p. ej., jabón y detergente, los compuestos de la presente invención pueden estar presentes en una cantidad que varía de aproximadamente 0,005 a aproximadamente 50 por ciento en peso, preferiblemente de aproximadamente 0,01 a aproximadamente 20 por ciento en peso, y más preferiblemente de aproximadamente 0,05 a aproximadamente 5 por ciento en peso, y cuando se utiliza junto con productos funcionales gaseosos malolientes, los compuestos de la presente invención pueden estar presentes en una cantidad que varía de aproximadamente 0,1 a 10 mg por metro cúbico de aire.

Lo siguiente se proporciona como realizaciones específicas de la presente invención, a menos que se indique lo contrario como ejemplos de referencia. Otras modificaciones de esta invención serán fácilmente evidentes para los expertos en la técnica. Se entiende que dichas modificaciones están dentro del alcance de esta invención. Tal como se utiliza en esta memoria, todos los porcentajes son porcentajes en peso a menos que se indique lo contrario, ppm representa partes por millón, L se entiende que es litros, mL se entiende que es mililitro, g se entiende que es gramo, mol se entiende que es mol, se entiende que psi son libras por pulgada cuadrada y mm de Hg son milímetros (mm)

de mercurio (Hg). IFF tal como se utiliza en los ejemplos, se entiende que significa International Flavors & Fragrances Inc., Nueva York, NY, EE.UU.

Ejemplo de referencia I

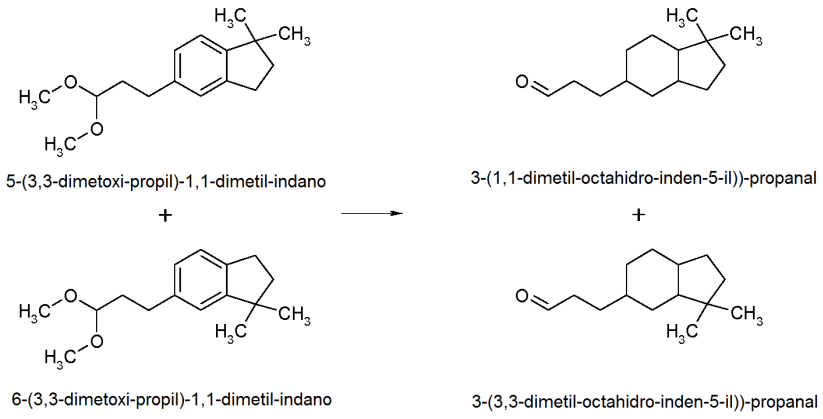


Preparación de 5-(3,3-dimetoxi-propil)-1,1-dimetil-indano y 6-(3,3-dimetoxi-propil)-1,1-dimetil-indano: La mezcla de 3-(1,1-dimetil-indan-5-il)-propanal y 3-(3,3-dimetil-indan-5-il)-propanal en una relación ponderal de 40:60 (*Véase* la Patente de EE.UU. Nº 5.552.379) (150 g, 0,74 mol) se disolvió en ortoformiato de trimetilo ($HC(OCH_3)_3$) (250 g) y metanol (50 g) y se enfrió a -10 °C. Se añadió ácido clorhídrico (HCl) (12 M, 1 mL) y la reacción se volvió rápidamente exotérmica a 40 °C. Se añadió acetato de sodio (CH3COONa) (20 g). La mezcla de reacción resultante se destiló para proporcionar la mezcla de 5-(3,3-dimetoxi-propil)-1,1-dimetil-indano y 6-(3,3-dimetoxi-propil)-1,1-dimetil-indano en una relación ponderal de 40:60 (170 g).

La mezcla de 5-(3,3 dimetoxi-propil)-1,1-dimetil-indano y 6-(3,3-dimetoxi-propil)-1,1-dimetil-indano fue descrita como que tenía notas químicas, de tipo queroseno, muguet y especiadas.

La mezcla de 5-(3,3-dimetoxi-propil)-1,1-dimetil-indano y 6-(3,3-dimetoxi-propil)-1,1-dimetil-indano poseía características del RMN espectral de:
^{1}H RMN ($CDCl_3$, 500 MHz): 6,95-7,13 (m, 3H), 4,38 (q, J = 5,6 Hz, 1H), 3,33 (s, 6H), 2,79-2,90 (m, 2H), 2,60-2,69 (m, 2H), 1,87-1,95 (m, 4H), 1,24 (s, 6H)

Ejemplo de referencia II



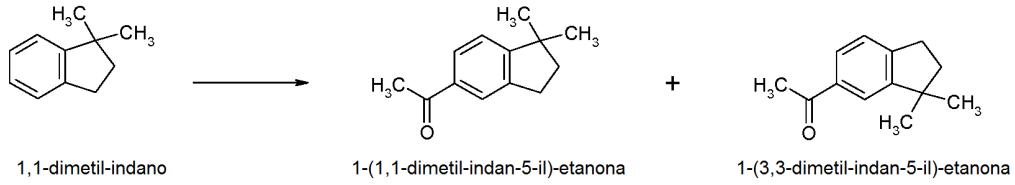
Preparación de 3-(1,1-dimetil-octahidro-inden-5-il)-propanal (Fórmula Ia) y 3-(3,3-dimetil-octahidro-inden-5-il)-propanal (Fórmula Ib): La mezcla de 5-(3,3-dimetoxi-propil)-1,1-dimetil-indano y 6-(3,3-dimetoxi-propil)-1,1-dimetil-indano (obtenida como se indica arriba en el EJEMPLO I) (108 g, 435 mmol) en isopropanol ($CH_3CHOHCH_3$) (200 mL) se hidrogenó sobre óxido de rutenio (IV) (RuO_2) a 60 °C bajo 400 psi (2757,90 kPa) de hidrógeno (H_2) durante 8 horas

La reacción se enfrió y se ventiló a la presión atmosférica. La mezcla resultante se filtró a través de Celite® y se evaporó a sequedad. El producto bruto se disolvió en metil etil cetona (MEK) ($CH_3C(O)CH_2CH_3$) (200 mL). A la solución bruta se añadió agua (50 mL) y HCl (12 M, 1 mL) y la mezcla resultante se calentó a reflujo durante 1 hora. La reacción se enfrió luego y se añadió tolueno (20 mL). La capa orgánica se separó y se evaporó a sequedad. La destilación adicional proporcionó la mezcla de 3-(1,1-dimetil-octahidro-inden-5-il)-propanal (Fórmula Ia) y 3-(3,3-dimetil-octahidro-inden-5-il)-propanal (Fórmula Ib) en una relación ponderal de 40:60 (85 g).

La mezcla de Fórmula Ia y Ib fue descrita como que tenía notas florales, de muguet, ozónicas, de orris y cerosas. Aspecto químico y áspero.

La mezcla de Fórmula Ia y Ib poseía características del RMN espectral de:
^{1}H RMN (500 MHz, $CDCl_3$): 9,70-9,74 (m, 1H), 0,54-2,20 (m, 17H), 0,93 (s, 3H), 0,88 (s, 3H)

Ejemplo de referencia III



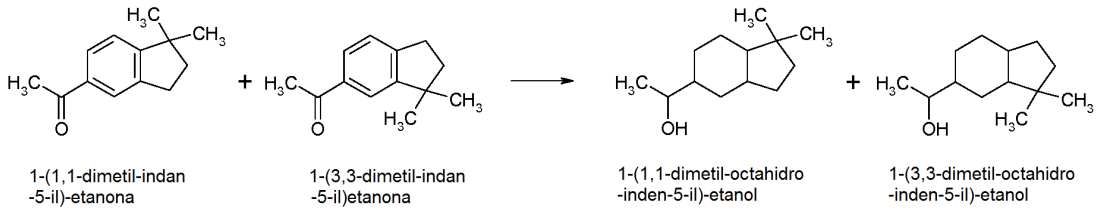
Preparación de 1-(1,1-dimetil-indan-5-il)-etanona y 1-(3,3-dimetil-indan-5-il)-etanona: Cloruro de aluminio ($AlCl_3$) (408 g, 3,1 mol) se disolvió en diclorometano (CH_2Cl_2) (1 L) y se enfrió a 0 ºC. Se alimentó cloruro de acetilo (CH_3COCl) (240 g, 3,1 mol) a lo largo de más de 30 minutos. Mientras la temperatura se mantenía a 0 ºC, se añadió 1,1-dimetil-indano (448 g, 3,1 mol) y la mezcla se agitó durante 2 horas. La mezcla resultante se vertió en hielo (5 kg). La capa orgánica se separó luego y se destiló para proporcionar un aceite transparente que comprende la mezcla de 1-(1,1-dimetil-indan-5-il)-etanona y 1-(3,3-dimetil-indan-5-il)-etanona en una relación ponderal de 40:60 (420 g).

La mezcla de 1-(1,1-dimetil-indan-5-il)-etanona y 1-(3,3-dimetil-indan-5-il)-etanona fue descrita como que tenía notas químicas, de queroseno, gaseosas y especiadas.

1-(1,1-dimetil-indan-5-il)-etanona:
^{1}H RMN ($CDCl_3$, 500 MHz): 7,77-7,81 (m, 1H), 7,73-7,76 (m, 1H), 7,24 (d, J = 8,5 Hz, 1H), 2,92 (t, J = 7,3 Hz, 2H), 2,56 (s, 3H), 1,95 (t, J = 7,3 Hz, 2H), 1,27 (s, 3H), 1,26 (s, 3H)

1-(3,3-dimetil-indan-5-il)-etanona:
^{1}H RMN ($CDCl_3$, 500 MHz): 7,77-7,81 (m, 1H), 7,73-7,76 (m, 1H), 7,19 (d, J = 8,5 Hz, 1H), 2,92 (t, J = 7,3 Hz, 2H), 2,58 (s, 3H), 1,95 (t, J = 7,3 Hz, 2H), 1,27 (s, 3H), 1,26 (s, 3H)

Ejemplo IV



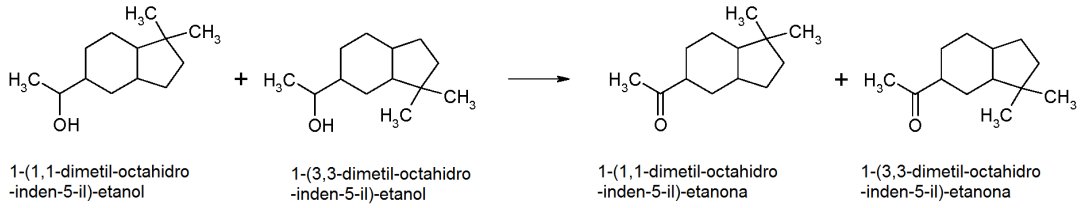
Preparación de 1-(1,1-dimetil-octahidro-inden-5-il)-etanol (Fórmula IIa) y 1-(3,3-dimetil-octahidro-inden-5-il)-etanol (Fórmula IIb): La mezcla de 1-(1,1-dimetil-indan-5-il)-etanona y 1-(3,3-dimetil-indan-5-il)-etanona (obtenida como se indica arriba en el EJEMPLO III) (535 g, 2,8 mol) se hidrogenó sobre de óxido de rutenio(IV) (3 g, 8 mmol) a 50 °C bajo 2757,90 kPa (400 psi) de H_2 durante 12 horas. La reacción se enfrió y se ventiló a presión atmosférica para proporcionar la mezcla de 1-(1,1-dimetil-octahidro-inden-5-il)-etanol (Fórmula IIa) y 1-(3,3-dimetil-octahidro-inden-5-il)-etanol (Fórmula IIb) en una relación ponderal de 40:60 (475 g).

La mezcla de la Fórmula IIa y IIb fue descrita como que tenía fuertes notas florales, especiadas y de madera con caracteres de sabor a fruta, cítricos, verdes, herbáceos y, particularmente, frescos y acuosos.

1-(1,1-dimetil-octahidro inden-5-il)-etanol:
^{1}H RMN ($CDCl_3$, 400 MHz): 3,47-3,74 (m, 1H), 0,57-2,55 (m, 14H), 1,15 (d, J = 6,8 Hz, 3H), 0,94 (s, 3H), 0,92 (s, 3H)

1-(3,3-dimetil-octahidro-inden-5-il)-etanol
^{1}H RMN ($CDCl_3$, 400 MHz): 3,47-3,74 (m, 1H), 0,57-2,55 (m, 14H), 1,17 (d, J = 6,8 Hz, 3H), 0,98 (s, 3H), 0,96 (s, 3H)

Ejemplo V

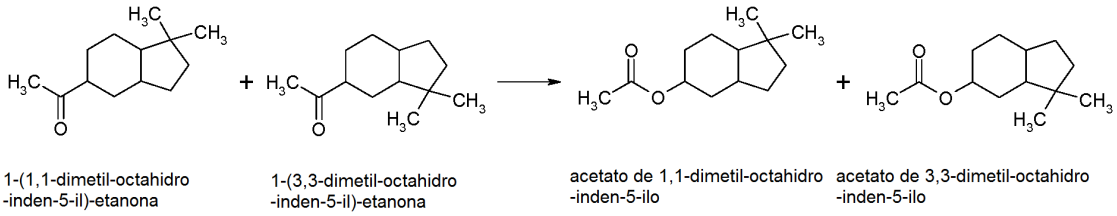


Preparación de 1-(1,1-dimetil-octahidro-inden-5-il)-etanona (Fórmula IIIa) y 1-(3,3-dimetil-octahidro-inden-5-il)-etanona (Fórmula IIIb): La mezcla de 1-(1,1-dimetil-octahidro-inden-5-il)-etanol y 1-(3,3-dimetil-octahidro-inden-5-il)-etanol (obtenida como se indica arriba en el Ejemplo IV) (425 g, 2,2 mol) se colocó en un recipiente de reacción con catalizador de deshidrogenación PriCat CZ 30/18P (Johnson Matthey Process Technologies) (25 g) y aceite mineral (150 mL). La reacción se calentó lentamente a 175 °C, se envejeció a esta temperatura durante 10 horas y se enfrió. La destilación adicional proporcionó un aceite transparente que comprendía la mezcla de 1-(1,1-dimetil-octahidro-inden-5-il)-etanona (Fórmula IIIa) y 1-(3,3-dimetil-octahidro-inden-5-il)-etanona (Fórmula IIIb) en una relación ponderal de 40:60 (375 g).

La mezcla de Fórmula IIIa y IIIb fue descrita como que tenía fuertes notas de almizcle y de madera con caracteres pulverulentos y dulces.

La mezcla de la Fórmula IIIa y IIIb poseía características del RMN espectral de:
^{1}H RMN ($CDCl_3$, 500 MHz): 2,14-2,57 (m, 2H), 2,10 (s, 3H), 0,95-1,93 (m, 11H), 0,79-0,95 (m, 6H)

Ejemplo de referencia VI

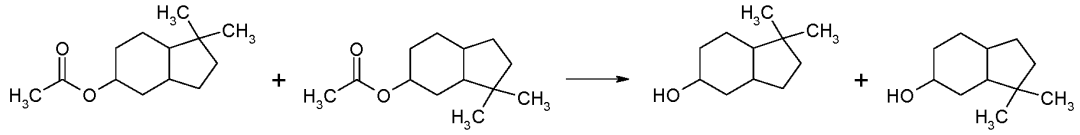


Preparación de acetato de 1,1-dimetil-octahidro-inden-5-ilo (Fórmula IVa) y acetato de 3,3-dimetil-octahidro-inden-5-ilo (Fórmula IVb): La mezcla de 1-(1,1-dimetil-octahidro-inden-5-il)-etanona y 1-(3,3-dimetil-octahidro-inden-5-il)-etanona (obtenida como se indica arriba en el EJEMPLO V) (223 g, 1,1 mol) se disolvió en tolueno (1 L) y se calentó a 50 °C. A la mezcla se alimentó ácido peracético (CH_3CO_3H) (32%) (273 g, 1,1 mol) durante 2 horas. La reacción se envejeció durante 4 horas adicionales, se enfrió y se lavó con solución acuosa de bisulfito de sodio ($NaHSO_3$) (1 M) (500 mL). La capa orgánica resultante se destiló para proporcionar la mezcla de acetato de 1,1-dimetil-octahidro-inden-5-ilo (Fórmula IVa) y acetato de 3,3-dimetil-octahidro-inden-5-ilo (Fórmula IVb) en un relación ponderal de 40:60 (196 g).

La mezcla de Fórmula IVa y IVb fue descrita como que tenía notas ahumadas y fuertemente quemadas.

La mezcla de Fórmula IVa y IVb poseía características del RMN espectral de:
^{1}H RMN ($CDCl_3$, 500 MHz): 4,54-5,02 (m, 1H), 2,27-2,59 (m, 1H), 1,96-2,06 (m, 3H), 0,97-1,95 (m, 11H), 0,86-0,96 (m, 6H)

Ejemplo VII



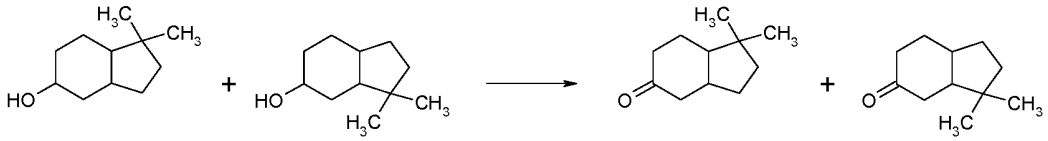
acetato de 1,1-dimetil-octahidro-inden-5-ilo | acetato de 3,3-dimetil-octahidro-inden-5-ilo | 1,1-dimetil-octahidro-inden-5-ol | 3,3-dimetil-octahidro-inden-5-ol

Preparación de 1,1-dimetil-octahidro-inden-5-ol (Fórmula Va) y 3,3-dimetil-octahidro-inden-5-ol (Fórmula Vb): La mezcla de acetato de 1,1-dimetil-octahidro-inden-5-ilo y acetato de 3,3-dimetil-octahidro-inden-5-ilo (como se indica arriba en el EJEMPLO VI) (185 g, 0,88 mol) se agitó a 80 °C en etanol (500 mL) con hidróxido de potasio (KOH) (99 g, 1,8 mol) durante 6 horas. La reacción se enfrió y se acidificó a pH 5 con ácido acético (CH_3COOH). Posteriormente se añadieron agua (1 L) y tolueno (1 L). La capa de tolueno resultante se retiró y se destiló para proporcionar la mezcla de 1,1-dimetil-octahidro-inden-5-ol (Fórmula Va) y 3,3-dimetil-octahidro-inden-5-ol (Fórmula Vb) en un relación ponderal de 40:60 (140 g).

La mezcla de Fórmula Va y Vb fue descrita como que tenía fuertes notas a animales y correosas con caracteres limpios y herbáceos.

La mezcla de Fórmula Va y Vb poseía características del RMN espectral de:
^{1}H RMN ($CDCl_3$, 400 MHz): 3,34-4,01 (m, 1H), 2,56-2,99 (m, 1H), 2,21-2,56 (m, 1H), 1,15-1,99 (m, 10H), 1,01-2,00 (m, 1H), 0,81-0,98 (m, 6H)

Ejemplo VIII



1,1-dimetil-octahidro-inden-5-ol | 3,3-dimetil-octahidro-inden-5-ol | 1,1-dimetil-octahidro-inden-5-ona | 3,3-dimetil-octahidro-inden-5-ona

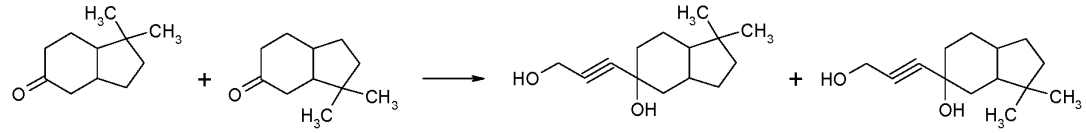
Preparación de 1,1-dimetil-octahidro-inden-5-ona (Fórmula VIa) y 3,3-dimetil-octahidro-inden-5-ona (Fórmula VIb): La mezcla de 1,1-dimetil-octahidro-inden-5-ona (Fórmula VIa) y 3,3-dimetil-octahidro-inden-5-ona (Fórmula VIb) en una relación ponderal de 40:60 (45 g) se preparó de manera similar de acuerdo con el EJEMPLO V utilizando la mezcla de 1,1-dimetil-octahidro-inden-5-ol y 3,3-dimetil-octahidro-inden-5-ol (obtenida como se indica arriba en el EJEMPLO VII) (62 g).

La mezcla de la Fórmula VIa y VIb fue descrita como que tenía notas leñosas, fuertemente correosas y herbáceas.

1,1-dimetil-octahidro-inden-5-ona:
^{1}H RMN ($CDCl_3$, 400 MHz): 1,24-2,63 (m, 12H), 0,96 (s, 3H), 0,0,86 (s, 3H)

3,3-dimetil-octahidro-inden-5-ona: ^{1}H RMN ($CDCl_3$, 400 MHz): 1,24-2,63 (m, 12H), 1,00 (s, 3H), 0,92 (s, 3H)

Ejemplo de referencia IX



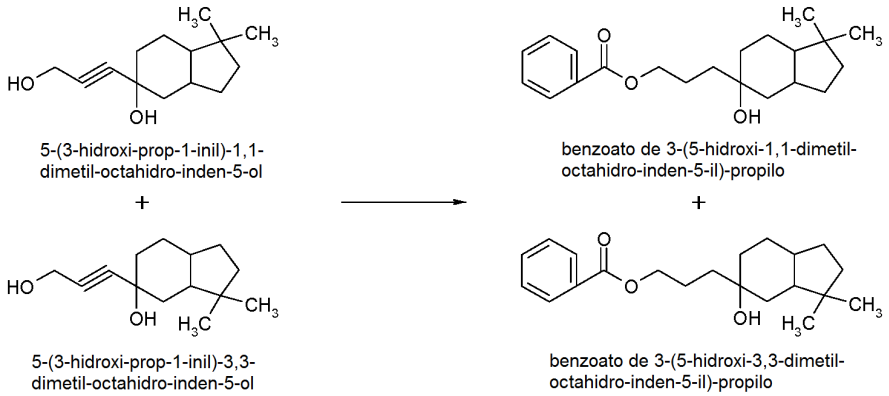
1,1-dimetil-octahidro-inden-5-ona | 3,3-dimetil-octahidro-inden-5-ona | 5-(3-hidroxi-prop-1-inil)-1,1-dimetil-octahidro.inden-5-ol | 5-(3-hidroxi-prop-1-inil)-3,3-dimetil-octahidro.inden-5-ol

Preparación de 5-(3-hidroxi-prop-1-inil)-1,1-dimetil-octahidro-inden-5-ol y 5-(3-hidroxi-prop-1-inil)-3,3-dimetil-octahidro-inden-5-ol: Alcohol propargílico ($CHCCH_2OH$) (7,4 g, 132 mmol) se alimentó a cloruro de etilmagnesio (C_2H_5MgCl) (2 M) (120 mL) a la temperatura ambiente durante 1 hora mientras la temperatura se elevó a 50 °C. Una vez completada la alimentación, la reacción se calentó a reflujo durante 1 hora y luego se enfrió a -78 ºC. La mezcla de 1,1-dimetil-octahidro-inden-5-ona y 3,3-dimetil-octahidro-inden-5-ona (obtenida como se indica arriba en el EJEMPLO VIII) (16 g, 96 mmol) se alimentó gota a gota a lo largo de 15 minutos. La reacción se dejó calentar posteriormente a temperatura ambiente a lo largo de 3,5 horas. Se añadió cloruro de amonio acuoso saturado (NH_4Cl) (50 mL) con acetato de etilo ($CH_3COOC_2H_5$) (50 mL). La capa orgánica resultante se separó y se evaporó a sequedad. La cromatografía en gel de sílice (acetato de etilo:hexanos = 1:1) proporcionó la mezcla de 5-(3-hidroxi-prop-1-inil)-1,1-dimetil-octahidro-inden-5-ol y 5-(3-hidroxi-prop-1-inil)-3,3-dimetil-octahidro-inden-5-ol en una relación ponderal de 40:60 (6 g).

La mezcla de 5-(3-hidroxi-prop-1-inil)-1,1-dimetil-octahidro inden-5-ol-y 5-(3-hidroxi-prop-1-inil)-3,3-dimetil-octahidro-inden-5-ol fue descrita como que tenía caracteres débiles y no específicos.

La mezcla de 5-(3-hidroxi-prop-1-inil)-1,1-dimetil-octahidro-inden-5-ol y 5-(3-hidroxi-prop-1-inil)-3,3-dimetil-octahidro-inden-5-ol poseía las características espectrales de:
^{1}H RMN ($CDCl_3$, 500 MHz): 4,21-4,27 (m, 2H), 2,20-3,00 (m, 3H), 1,23-1,95 (m, 11H), 0,83-0,99 (m, 6H)

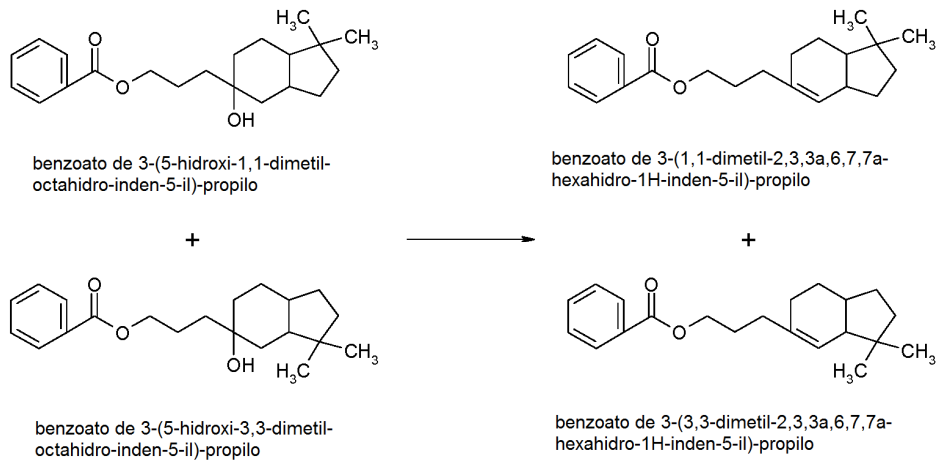
Ejemplo de referencia X



Preparación de benzoato de 3-(5-hidroxi-1,1-dimetil-octahidro-inden-5-il)-propilo y benzoato de 3-(5-hidroxi-3,3-dimetil-octahidro-inden-5-il)-propilo: La mezcla de 5-(3-hidroxi-prop-1-inil)-1,1-dimetil-octahidro-inden-5-ol y 5-(3-hidroxi-prop-1-inil)-3,3-dimetil-octahidro-inden-5-ol (obtenida como se indicó anteriormente en el EJEMPLO IX) (5 g, 22,5 mmol) en isopropanol (25 mL) se hidrogenó sobre paladio sobre óxido de aluminio (Pd/Al_2O_3) (50 mg) por debajo de 100 psi (689,48 kPa) de H_2 al producto saturado. La mezcla resultante se filtró a través de Celite® y se evaporó a sequedad. El producto bruto se disolvió en tetrahidrofurano (THF) (30 mL). A la solución bruta se añadieron trietilamina ($N(CH_2CH_3)_3$) (5 mL) y cloruro de benzoilo (C_6H_5COCl) (3,5 g, 25 mmol). La mezcla de reacción se agitó adicionalmente a temperatura ambiente durante 10 horas y se lavó con bicarbonato sódico saturado ($NaHCO_3$). La cromatografía en gel de sílice (acetato de etilo:hexanos = 1:1) proporcionó un aceite amarillo pálido que comprendía la mezcla de benzoato de 3-(5-hidroxi-1,1-dimetil-octahidro-inden-5-il)-propilo y benzoato de 3-(5-hidroxi-3,3-dimetil-octahidro-inden-5-il)-propilo en una relación ponderal de 40:60 (5,1 g).

La mezcla de benzoato de 3-(5-hidroxi-1,1-dimetil-octahidro-5-il-inden)-propilo y benzoato de 3-(5-hidroxi-3,3-dimetil-octahidro-inden-5-il)-propilo poseía las características espectrales de RMN de:
^{1}H RMN ($CDCl_3$, 500 MHz): 7,95-8,01 (m, 2H), 7,45-7,52 (m, 1H), 7,34-7,40 (m, 2H), 4,27 (m, 2H), 2,16-2,46 (m, 1H), 1,10-1,90 (m, 16H), 0,75-1,03 (m, 6H)

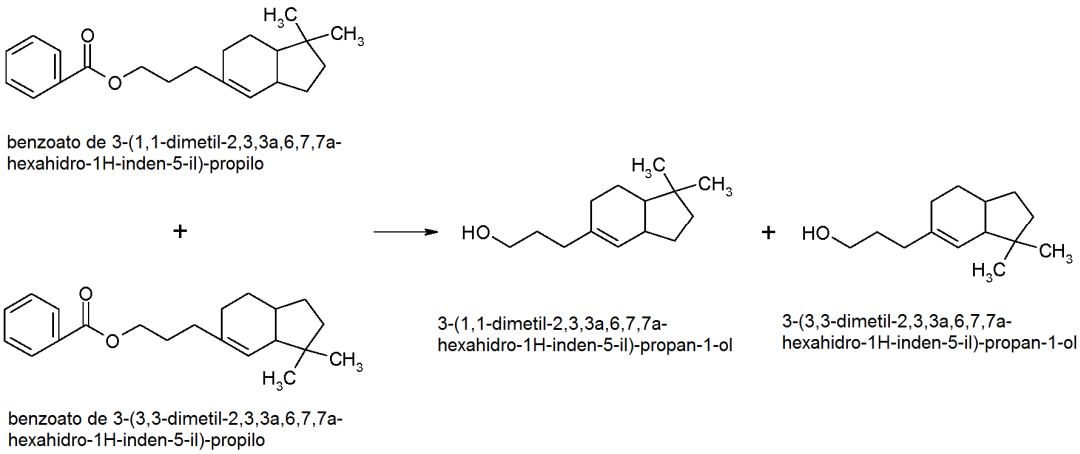
Ejemplo de referencia XI



Preparación de benzoato de 3-(1,1-dimetil-2,3,3a,6,7,7a-hexahidro-1H inden-5-il)-propilo y benzoato de 3-(3,3-dimetil-2,3,3a,6,7,7a-hexahidro-1H-inden-5-il)-propilo: La mezcla de benzoato de 3-(5-hidroxi-1,1-dimetil-octahidro-inden-5-il)-propilo y benzoato de 3-(5-hidroxi-3,3-dimetil-octahidro-inden-5-il)-propilo (obtenida como se indicó anteriormente en el EJEMPLO X) (2,4 g, 7,7 mmol) y ácido *para*-toluenosulfónico (*p*TSA) (200 mg) en tolueno (15 mL) se calentó a reflujo durante 1 hora. La reacción se enfrió y se neutralizó mediante lavado con bicarbonato de sodio acuoso saturado (25 mL). La cromatografía en gel de sílice (acetato de etilo:hexanos = 1:1) proporcionó la mezcla de benzoato de 3-(1,1-dimetil-2,3,3a,6,7,7a-hexahidro-1H-inden-5-il)-propilo y benzoato de 3-(3,3-dimetil-2,3,3a,6,7,7a-hexahidro-1H-inden-5-il)-propilo en una relación ponderal de 40:60 (2,3 g).

La mezcla de benzoato de 3-(1,1-dimetil-2,3,3a,6,7,7a-hexahidro-1H-inden-5-il)-propilo y benzoato de 3-(3,3-dimetil-2,3,3a,6,7,7a-hexahidro-1H-inden-5-il)-propilo poseía las características espectrales de RMN de:
^{1}H RMN ($CDCl_3$, 400 MHz): 7,97-8,17 (m, 2H), 7,52-7,64 (m, 1H), 7,42-7,49 (m, 2H), 5,37-5,57 (m, 1H), 4,26-4,43 (m, 2H), 1,10-2,77 (m, 14H), 0,72-1,10 (m, 6H)

Ejemplo de referencia XII



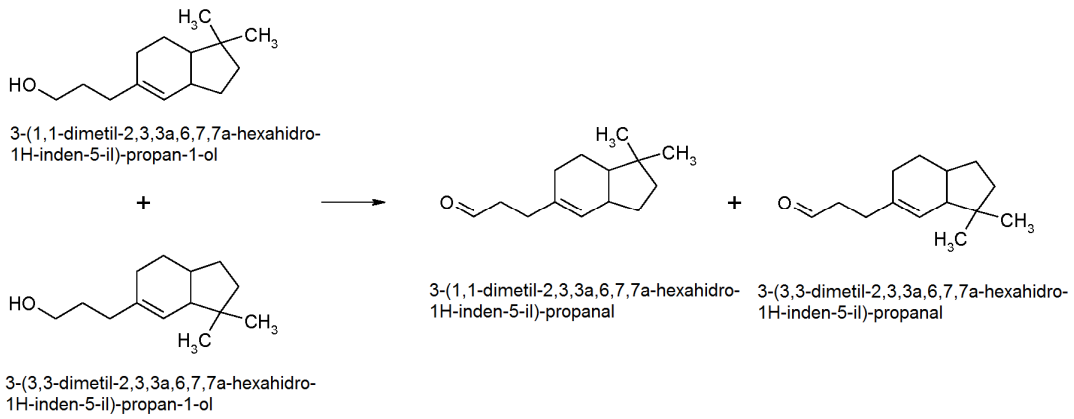
Preparación de 3-(1,1-dimetil-2,3,3a,6,7,7a-hexahidro-1H-inden-5-il)-propan-1-ol (Fórmula VIIa) y 3-(3,3-dimetil-2,3,3a,6,7,7a-hexahidro-1H-inden-5-il)-propan-1-ol (Fórmula VIIb): La mezcla de 3-(1,1-dimetil-2,3,3a,6,7,7a-hexahidro-1H-inden-5-il)-propan-1-ol (Fórmula VIIa) y 3-(3,3-dimetil-2,3,3a,6,7,7a-hexahidro-1H-inden-5-il)-propan-1-ol (Fórmula VIIb) en una relación ponderal de 40:60 (2,6 g) se preparó de manera similar de acuerdo con el EJEMPLO VII utilizando la mezcla de benzoato de 3-(1,1-dimetil-2,3,3a,6,7,7a-hexahidro-1H-inden-5-il)-propilo y benzoato de 3-

(3,3-dimetil-2,3,3a,6,7,7a-hexahidro-1H-inden-5-il)-propilo (obtenida como se indicó anteriormente en el EJEMPLO XI) (4,0 g, 13 mmol).

La mezcla de Fórmulas VIIa y VIIb fue descrita como que tenía débiles notas florales y de muguet con carácter sucio. Aspecto de gasolina y muy áspera.

La mezcla de Fórmulas VIIa y VIIb poseía características del RMN espectral de:
^{1}H RMN ($CDCl_3$, 500 MHz): 5,35-5,56 (m, 1H), 3,66 (t, J = 6,5 Hz, 2H), 1,21 -2,95 (m, 15H), 0,76-1,09 (m, 6H)

Ejemplo de referencia XIII

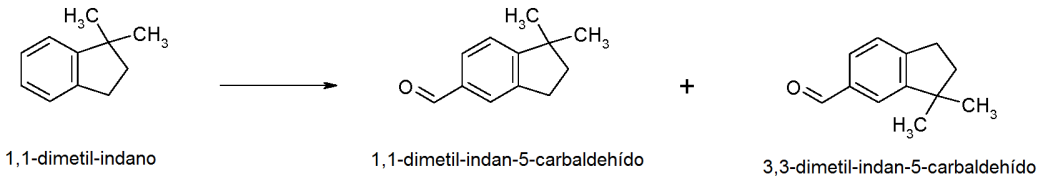


Preparación de 3-(1,1-dimetil-2,3,3a,6,7,7a-hexahidro-1H-inden-5-il)-propanal (Fórmula VIIIa) y 3-(3,3-dimetil-2,3,3a,6,7,7a-hexahidro-1H-inden-5-il)- propanal (Fórmula VIIIb): La mezcla de 3-(1,1-dimetil-2,3,3a,6,7,7a-hexahidro-1H-inden-5-il)-propan-1-ol y 3-(3,3-dimetil-2,3,3a,6,7,7a-hexahidro-1H-inden-5-il)-propan-1-ol (obtenida como se indicó anteriormente en el EJEMPLO XII) (1 g, 4,8 mmol) se disolvió en diclorometano (100 mL) y se trató con clorocromato de piridinio ($C_5H_5NH[CrO_3Cl]$) (1,5 g, 7,2 mmol). La mezcla de reacción se agitó a temperatura ambiente durante 2 horas y se vertió en éter (200 mL). La mezcla resultante se filtró a través de Celite® y se evaporó a sequedad. La cromatografía en gel de sílice (acetato de etilo:hexanos = 1:100) proporcionó la mezcla de 3-(1,1-dimetil-2,3,3a,6,7,7a-hexahidro-1H-inden-5-il)-propanal (Fórmula VIIIa) y 3-(3,3-dimetil-2,3,3a,6,7,7a-hexahidro-1H-inden-5-il)- propanal (Fórmula VIIIb) en una relación ponderal de 30:60 (0,3 g).

La mezcla de Fórmulas VIIIa y VIIIb fue descrita como que tenía notas florales y de muguet con caracteres solventes y amargos. Aspecto débil y simple.

3-(1,1-dimetil-2,3,3a,6,7,7a-hexahidro-1H-inden-5-il)propanal:
^{1}H RMN ($CDCl_3$, 500 MHz): 9,73 (t, J = 2,2 Hz, 1H), 5,42-5,46 (m, 1H), 1,15-2,72 (m, 14H), 0,97 (s, 3H), 0,95 (s, 3H)
3-(3,3-dimetil-2,3,3a,6,7,7a-hexahidro-1H-inden-5-il)propanal:
^{1}H RMN ($CDCl_3$, 500 MHz): 9,74 (t, J = 2,2 Hz, 1H), 5,32-5,40 (m, 1H), 1,15-2,72 (m, 14H), 1,00 (s, 3H), 0,79 (s, 3H)

Ejemplo de referencia XIV



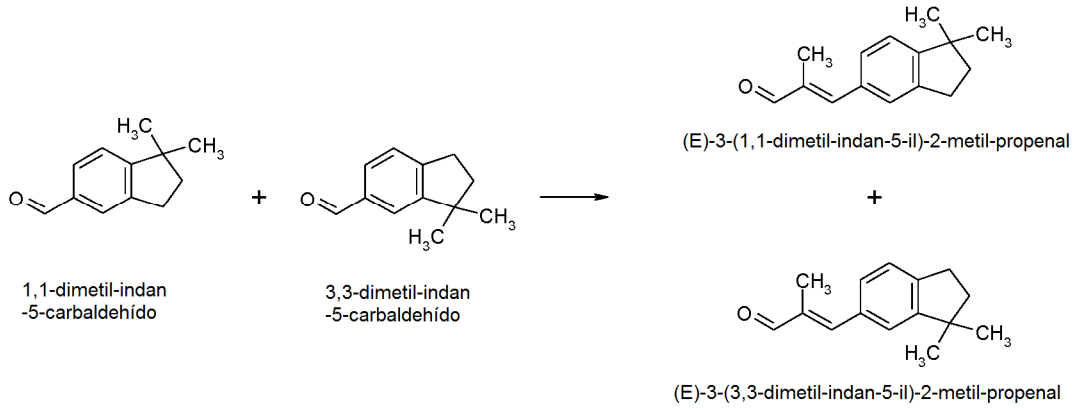
Preparación de 1,1 -dimetil-indan-5-carbaldehído y 3,3-dimetil-indan-5-carbaldehído: 1,1-dimetil-indano (641 g, 4,4 mol) se trató con 1,3,5,7-tetra-azaadamantae ($(CH_2)_6N_4$) (615 g, 4,4 mol) en ácido trifluoroacético (CF_3CO_2H) (5 L), se calentó a 80 °C durante 8 horas y se enfrió a temperatura ambiente. Se añadieron agua (1 L) y tolueno (1 L) y la mezcla de reacción se agitó durante 3 horas. La mezcla de reacción se calentó posteriormente a 130 ºC para separar el disolvente y se enfrió nuevamente a temperatura ambiente. Se añadieron agua (2 L) y tolueno (1 L). La capa

orgánica se separó. La destilación de trayectoria corta adicional proporcionó la mezcla de 1,1-dimetil-indan-5-carbaldehído y 3,3-dimetil-indan-5-carbaldehído en una relación ponderal de 1:1 (120 g).

1,1 -dimetil-indan-5-carbaldehído:
^{1}H RMN ($CDCl_3$, 500 MHz): 9,92 (s, 1H), 7,59-7,71 (m, 2H), 7,22-7,31 (m, 1H), 2,89-2,95 (m, 2H), 1,92-1,98 (m, 2H), 1,26 (s, 6H)

3,3 -dimetil-indan-5-carbaldehído:
^{1}H RMN ($CDCl_3$, 500 MHz): 9,94 (s, 1H), 7,59-7,71 (m, 2H), 7,22-7,31 (m, 1H), 2,89-2,95 (m, 2H), 1,92-1,98 (m, 2H), 1,27 (s, 6H)

Ejemplo de referencia XV

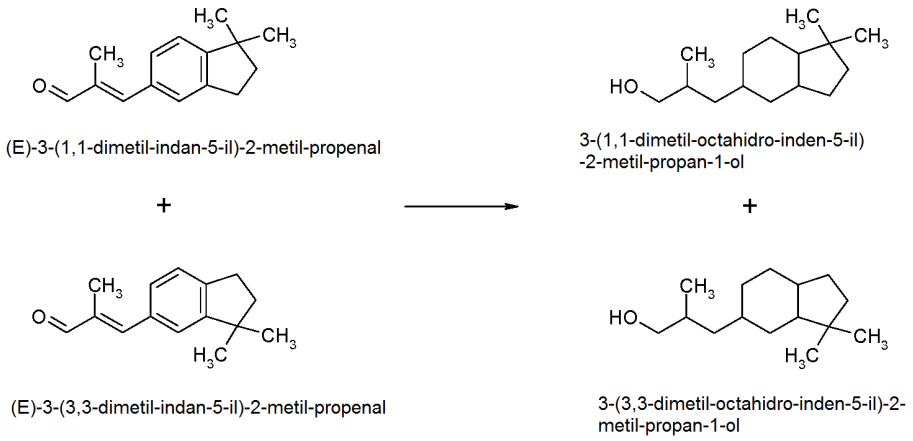


Preparación de (E)-3-(1,1-dimetil-indan-5-il)-2-metil-propenal (Fórmula IXa) y (E)-3-(3,3-dimetil-indan-5-il)-2-metil-propenal (Fórmula IXb): La mezcla de 1,1-dimetil-indan-5-carbaldehído y 3,3-dimetil-indan-5-carbaldehído (obtenida como se indicó anteriormente en el EJEMPLO XIV) (171 g, 0,98 mol) se trató con hidróxido de potasio (5,51 g, 98 mmol) en metanol (400 mL). Se alimentó propionaldehído (C_2H_5CHO) (80 g, 1,4 mol) a lo largo de 4 horas mientras la temperatura se mantuvo entre 25-35 °C. Una vez completada la alimentación, se añadieron agua (1 L), ácido acético (10 mL) y tolueno (1 L). La capa acuosa resultante se desechó. La capa orgánica se volvió a colocar en el recipiente de reacción con ácido *p*-toluenosulfónico (1 g) y se calentó a reflujo durante 1 hora para separar el agua. La reacción se enfrió después, se lavó con agua y se destiló para proporcionar la mezcla de (E)-3-(1,1-dimetil-indan-5-il)-2-metil-propenal (Fórmula IXa) y (E)-3-(3,3-dimetil-indan-5-il)-2-metil-propenal (Fórmula IXb) en una relación ponderal de 1:1 (52 g).

La mezcla de Fórmulas IXa y IXb fue descrita como que tenía fuertes notas florales, verdes y especiadas con un carácter ligeramente químico.

La mezcla de Fórmulas IXa y IXb poseía características del RMN espectral de:
^{1}H RMN ($CDCl_3$, 400 MHz): 9,57-9,62 (m, 1H), 7,06-7,49 (m, 4H), 2,93-3,00 (m, 2H), 2,12 (s, 3H), 1,95-2,04 (m, 2H), 1,32 (s, 6H)

Ejemplo de referencia XVI

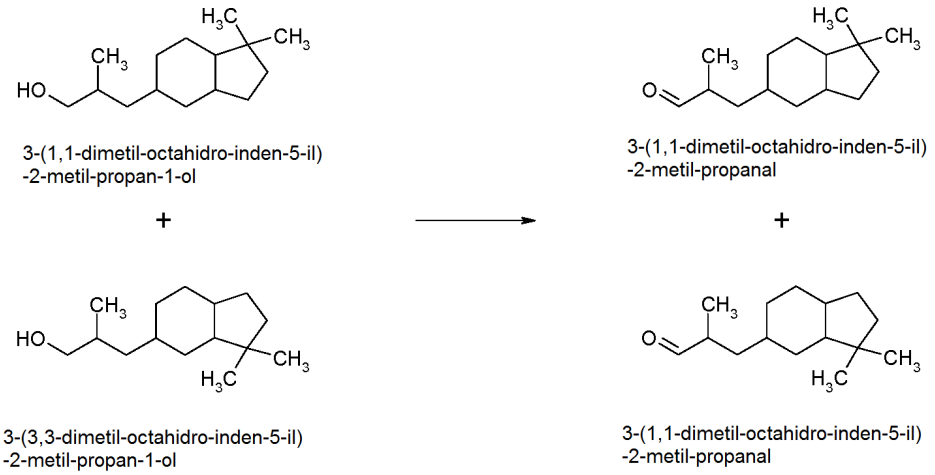


Preparación de 3-(1,1-dimetil-octahidro-inden-5-il)-2-metil-propan-1-ol (Fórmula Xa) y 3-(3,3-dimetil-octahidro-inden-5-il)-2-metil-propan-1-ol (Fórmula Xb): La mezcla de 3-(1,1-dimetil-octahidro-inden-5-il)-2-metil-propan-1-ol (Fórmula Xa) y 3-(3,3-dimetil-octahidro-inden-5-il)-2-metil-propan-1-ol (Fórmula Xb) en una relación ponderal de 1:1 (35 g) se preparó de manera similar de acuerdo con el EJEMPLO IV utilizando la mezcla de (E)-3-(1,1-dimetil-indan-5-il)-2-metil-propenal y (E)-3-(3,3-dimetil-indan-5-il)-2-metil-propenal (obtenida como se indicó anteriormente en el EJEMPLO XV) (55 g, 0,22 mol).

La mezcla de Fórmulas Xa y Xb fue descrita como que tenía notas gaseosas, aceitosas y sucias. Las notas florales y afrutadas aparecían débiles y suprimidas.

La mezcla de Fórmulas Xa y Xb poseía características del RMN espectral de:
^{1}H RMN ($CDCl_3$, 400 MHz): 3,35-3,61 (m, 2H), 0,50-2,50 (m, 26H)

Ejemplo de referencia XVII

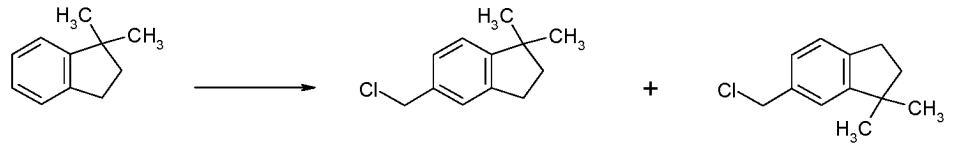


Preparación de 3-(1,1-dimetil-octahidro-inden-5-il)-2-metil-propanal (Fórmula XIa) y 3-(3,3-dimetil-octahidro-inden-5-il)-2-metil-propanal (Fórmula XIb): La mezcla de 3-(1,1-dimetil-octahidro-inden-5-il)-2-metil-propanal (XIa) y 3-(3,3-dimetil-octahidro-inden-5-il)-2-metil-propanal (XIb) en una relación ponderal de 1:1 (0,3 g) se preparó de manera similar de acuerdo con el EJEMPLO XIII utilizando la mezcla de 3-(3,3-dimetil-octahidro-inden-5-il)-2-metil-propan-1-ol y 3-(3,3-dimetil-octahidro-inden-5-il)-2-metil-propan-1-ol (obtenida como se indicó anteriormente en el EJEMPLO XVI) (1,0 g, 4,5 mmol).

La mezcla de Fórmulas XIa y XIb fue descrita como que tenía notas florales, de muguet y grasas. Aspecto débil y simple.

La mezcla de Fórmulas XIa y XIb poseía características del RMN espectral de:
^{1}H RMN ($CDCl_3$, 400 MHz): 9,49 (s, 1H), 0,60-2,40 (m, 27H)

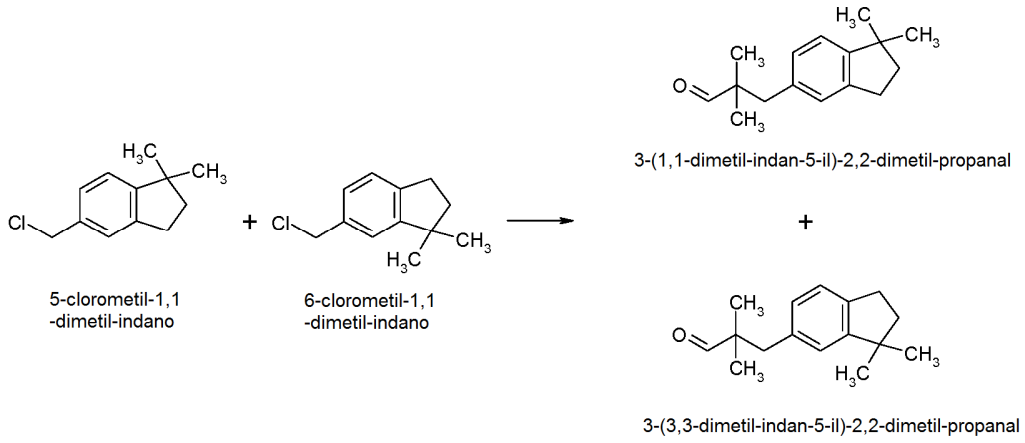
Ejemplo de referencia XVIII



Preparación de 5-clorometil-1,1-dimetil-indano y 6-clorometil-1,1-dimetil-indano: 1,1-dimetil-indano (146 g, 1 mol), formaldehído (HCHO) (37%) (122 g, 1,5 mol) y HCl (12 M, 500 mL) se combinaron, se calentaron a 60 °C durante 8 horas y se enfriaron. El material bruto que no ha reaccionado se separó por destilación fraccionada para proporcionar un aceite transparente que comprendía la mezcla de 5-clorometil-1,1-dimetil-indano y 6-clorometil-1,1-dimetil-indano en una relación ponderal de 1:1 (60 g).

La mezcla de 5-clorometil-1,1-dimetil-indano y 6-clorometil-1,1-dimetil-indano poseía las características del RMN espectral de:
^{1}H RMN ($CDCl_3$, 400 MHz): 7,18-7,41 (m, 3H), 4,64-4,74 (m, 2H), 2,95-3,05 (m, 2H), 2,04 (m, 2H), 1,38 (s, 6H)

Ejemplo de referencia XIX



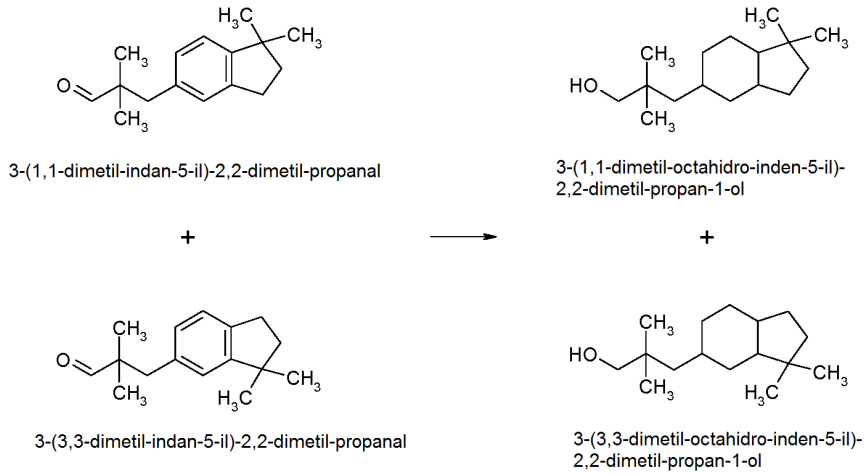
Preparación de 3-(1,1-dimetil-indan-5-il)-2,2-dimetil-propanal (Fórmula XIIa) y 3-(3,3-dimetil-indan-5-il)-2,2-dimetilpropanal (Fórmula XIIb): Hidróxido de sodio acuoso (50%) (17,56 g, 220 mmol), trietilamina (889 mg, 8,8 mmol), yoduro de sodio (NaI) (1,32 g, 889 mmol) y agua (5,5 mL) se combinaron con tolueno (100 mL) y se calentaron a 70 °C. La mezcla de 5-clorometil-1,1-dimetil-indano y 6-clorometil-1,1-dimetil-indano (obtenida como se indicó anteriormente en el EJEMPLO XVIII) (42 g, 220 mmol) e isobuteraldehído ($(CH_3)_2CHCHO$) (15,8 g, 220 mmol) se alimentaron a lo largo de 7 horas. La reacción se envejeció después durante 1 hora y posteriormente se enfrió a temperatura ambiente. La capa orgánica se lavó con agua y se destiló fraccionadamente para proporcionar la mezcla de 3-(1,1-dimetil-indan-5-il)-2,2-dimetilpropanal (Fórmula XIIa) y 3-(3,3-dimetil-indan-5-il)-2,2-dimetil-propanal (Fórmula XIIb) en una relación ponderal de 1:1 (40 g).

La mezcla de Fórmulas XIIa y XIIb fue descrita como que tenía notas verdes y ozónicas. Aspecto débil, simple y químico.

La mezcla de Fórmulas XIIa y XIIb poseía las características del RMN espectral de:

^{1}H RMN ($CDCl_3$, 500 MHz): 9,63 (s, 1H), 6,83-7,22 (m, 3H), 2,84-3,00 (m, 2H), 2,72-2,84 (m, 2H), 1,87-2,03 (m, 2H), 1,28 (s, 6H), 1,07-1,10 (m, 6H)

Ejemplo de referencia XX

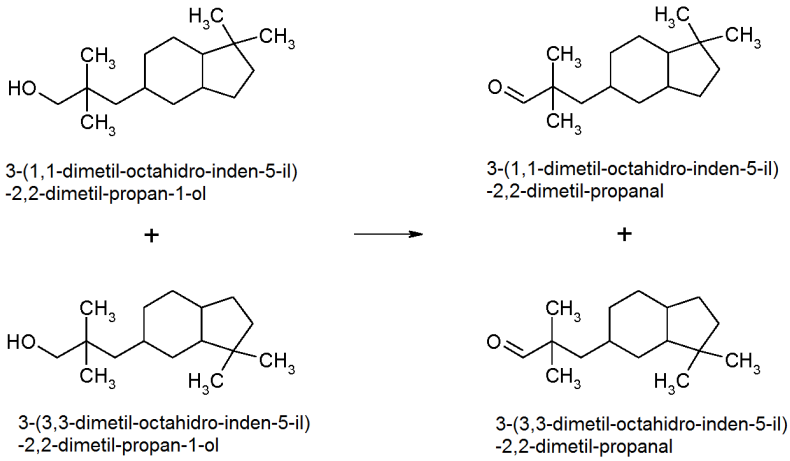


Preparación de 3-(1,1-dimetil-octahidro-inden-5-il)-2,2-dimetil-propan-1-ol (Fórmula XIIIa) y 3-(3,3-dimetil-octahidro-inden-5-il)-2,2-dimetil-propan-1-ol (Fórmula XIIIb): La mezcla de 3-(1,1-dimetil-octahidro-inden-5-il)-2,2-dimetil-propan-1-ol (Fórmula XIIIa) y 3-(3,3-dimetil-octahidro-inden-5-il)-2,2-dimetil-propan-1-ol (Fórmula XIIIb) en una relación ponderal de 1:1 (30 g) se preparó de manera similar de acuerdo con el EJEMPLO IV utilizando la mezcla de 3-(1,1-dimetil-indan-5-il)-2,2-dimetil-propanal y 3-(3,3-dimetil-indan-5-il)-2,2-dimetil-propanal (obtenida como se indicó anteriormente en el EJEMPLO XIX) (40 g, 0,18 mol).

La mezcla de Fórmulas XIIIa y XIIIb fue descrita como que tenía notas frutales y de fresa, pero era volátil y no de larga duración. Aspecto simple y delgado.

La mezcla de Fórmulas XIIIa y XIIIb poseía las características del RMN espectral de:
^{1}H RMN ($CDCl_3$, 500 MHz): 3,27-3,33 (m, 2H), 0,58-2,45 (m, 28H)

Ejemplo de referencia XXI



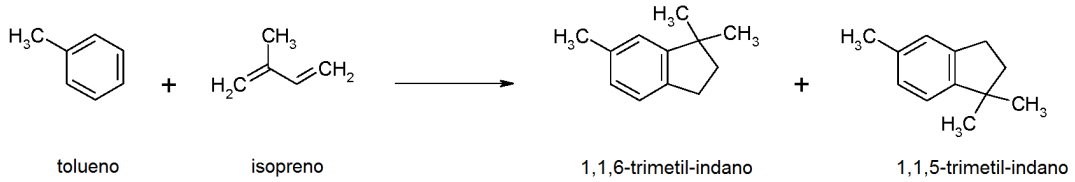
Preparación de 3-(1,1-dimetil-octahidro-inden-5-il)-2,2-dimetil-propanal (Fórmula XIVa) y 3-(3,3-dimetil-octahidro-inden-5-il)-2,2-dimetilpropanal (Fórmula XIVb): La mezcla de 3-(1,1-dimetil-octahidro-inden-5-il)-2,2-dimetil-propanal

(Fórmula XIVa) y 3-(3,3-dimetil-octahidro-inden-5-il)-2,2-dimetil-propanal (Fórmula XIVb) en una relación ponderal de 1:1 (0,45 g) se preparó de manera similar de acuerdo con el EJEMPLO XIII utilizando la mezcla de 3-(1,1-dimetil-octahidro-inden-5-il)-2,2-dimetil-propan-1-ol y 3-(3,3-dimetil-octahidro-inden-5-il)-2,2-dimetil-propan-1-ol (obtenida como se indicó anteriormente en el EJEMPLO XX) (1,0 g, 4,19 mmol).

La mezcla de Fórmulas XIVa y XIVb fue descrita como que tenía notas florales y de muguete con caracteres grasos y sudorosos.

La mezcla de Fórmulas XIVa y XIVb poseía las características del RMN espectral de:
^{1}H RMN ($CDCl_3$, 400 MHz): 9,49 (s, 1H), 0,60-2,40 (m, 27H)

Ejemplo de referencia XXII



Preparación de 1,1,6 trimetil-indano y 1,1,5-trimetil-indano: Tolueno (3,2 kg, 35 mol) se combinó con ácido sulfúrico (H_2SO_4) (450 g, 4,2 mol) y agua (100 mL). La mezcla se enfrió a 0 ºC. Se añadió isopreno (823 g, 12,2 mol) a la mezcla de reacción a lo largo de 6 horas. La mezcla de reacción se agitó durante 2 horas adicionales y se vertió en un embudo separador. La capa acuosa se desechó. La capa orgánica se lavó con hidróxido de sodio acuoso (500 mL, 30%). La destilación adicional proporcionó la mezcla de 1,1,6 -trimetil-indano y 1,1,5-trimetil-indano en una relación ponderal de 30:70 (740 g).

^{1}H RMN ($CDCl_3$, 400 MHz): 6,76-7,40 (m, 3H), 2,77-2,92 (m, 2H), 2,38 (s, 68% de 3H), 2,29 (s, 32% de 3H), 1,90-2,02 (m, 2H), 1,29 (s, 32% de 6H), 1,28 (s, 68% de 6H)

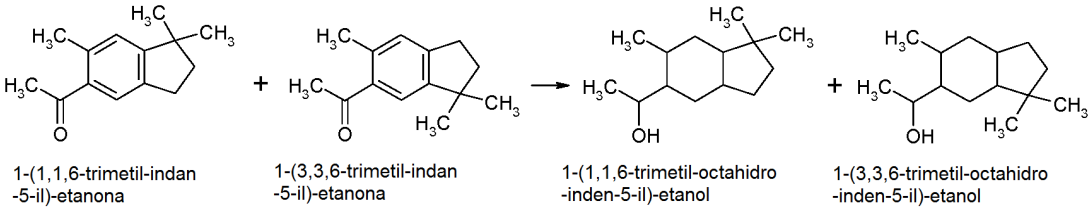
Ejemplo de referencia XXIII

Preparación de 1-(1,1,6-trimetil-indan-5-il)-etanona y 1-(3,3,6-trimetil-indan-5-il)-etanona: La mezcla de 1-(1,1,6-trimetil-indan-5-il)-etanona y 1-(3,3,6-trimetil-indan-5-il)-etanona en una relación ponderal de 20:80 (337 g) se preparó de manera similar de acuerdo con el EJEMPLO III utilizando la mezcla de 1,1,6-trimetil-indano y 1,1,5-trimetil-indano (obtenida como se indicó anteriormente en el EJEMPLO XXII) (300 g, 1,87 mol).

La mezcla de 1-(1,1,6 trimetil-indan-5-il)-etanona y 1-(3,3,6-trimetil-indan-5-il)-etanona fue descrita como que tenía caracteres de disolvente y similares al queroseno.

^{1}H RMN ($CDCl_3$, 400 MHz): 7,58 (s, 1H), 7,02 (s, 1H), 2,92 (t, J = 7,2 Hz, 79% de 1H), 2,89 (t, J = 7,2 Hz, 21% de 1H), 2,58 (s, 3H), 2,56 (s, 79% de 3H), 2,45 (s, 21% de 3H), 1,97 (t, J = 7,1 Hz, 2H), 1,29 (s , 3H)

Ejemplo XXIV

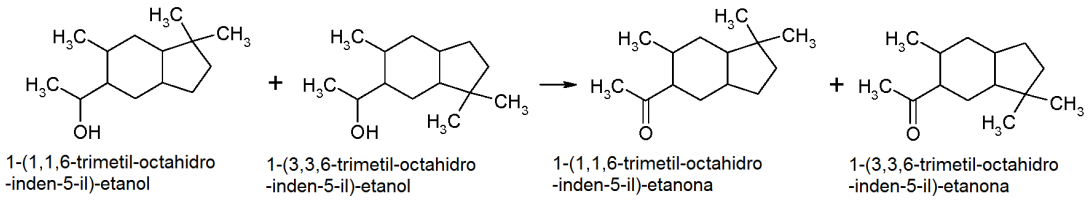


Preparación de 1-(1,1,6-trimetil-octahidro-inden-5-il)-etanol (Fórmula XVa) y 1-(3,3,6-trimetil-octahidro-inden-5-il)-etanol (Fórmula XVb): La mezcla de 1-(1,1,6-trimetil-octahidro-inden-5-il)-etanol (Fórmula XVa) y 1-(3,3,6-trimetil-octahidro-inden-5-il)-etanol (Fórmula XVb) en una relación ponderal de 20:80 (450 g) se preparó de manera similar de acuerdo con el EJEMPLO IV utilizando la mezcla de 1-(1,1,6-trimetil-indan-5-il)-etanona y 1-(3,3,6-trimetil-indan-5-il)-etanona (obtenida como se indicó anteriormente en el EJEMPLO XXIII) (505 g, 2,5 mol).

La mezcla de Fórmulas XVa y XVb fue descrita como que tenía notas leñosas y terrosas con un carácter particularmente tipo cedro.

^{1}H RMN ($CDCl_3$, 500 MHz): 3,40-4,17 (m, 1H), 2,16-2,51 (m, 1H), 1,79-2,03 (m, 1H), 1,28-1,79 (m, 8H), 1,08-1,28 (m, 4H), 0,41-1,08 (m, 11H)

Ejemplo de referencia XXV



Preparación de 1-(1,1,6-trimetil-octahidro-inden-5-il)-etanona (Fórmula XVIa) y 1-(1,1,6-trimetil-octahidro-inden-5-il)-etanona (Fórmula XVIb): Una mezcla de 1-(1,1,6-trimetil-octahidro-inden-5-il)-etanol y 1-(3,3,6-trimetil-octahidro-inden-5-il)-etanol (obtenida como se indicó anteriormente en el EJEMPLO) anterior (20 g, 95 mmol) se disolvió en tolueno (300 mL) y se enfrió a 0 ºC. A esto se añadió una solución de ácido crómico (H_2CrO_4), preparada combinando dricromato de sodio ($Na_2Cr_2O_7$) (17 g, 57 mmol), agua (9 mL) y ácido sulfúrico (1,71 g, 95 mmol). La mezcla de reacción se agitó a 0 °C durante 2 horas y se añadió tolueno (50 mL). La capa orgánica resultante se separó y se evaporó a sequedad. La cromatografía en gel de sílice (acetato de etilo:hexanos = 9:1) proporcionó la mezcla de 1-(1,1,6-trimetil-octahidro-inden-5-il)-etanona (Fórmula XVIa) y 1-(1,1,6-trimetil-octahidro-inden-5-il)-etanona (Fórmula XVIb) en forma de un aceite pálido en una relación ponderal de 30:70 (14 g).

La mezcla de Fórmulas XVIa y XVIb fue descrito como que tenía notas de hierbas, leñosas, frescas y de pino con carácter balsámico.

^{1}H RMN ($CDCl_3$, 400 MHz): 2,42-2,74 (m, 1H), 2,12-2,33 (m, 1H), 2,09 (s, 27% de 3H), 2,07 (s, 73% de 3H), 1,63-2,04 (m, 3H), 1,10-1,62 (m, 7H), 0,69-1,08 (m, 9H)

Ejemplo XXVI

Los perfiles de olor de los compuestos anteriores se evaluaron utilizando (i) intensidad de olor de 0 a 10, en que 0 = ninguno, 1 = muy débil, 5 = moderado, 10 = extremadamente fuerte; y (ii) nivel de complejidad, en que 0 = ninguno, 1 = muy bajo, 5 = moderado, 10 = extremadamente alto. Los resultados se enumeran a continuación:

Compuesto	Perfil de olores	Intensidad	Complejidad
Fórmula Ia/Ib	Floral, muguet, ozónico, orris y ceroso; químico y duro	4	4
Fórmula IIa/IIb	Floral, especiado y leñoso; afrutado, cítrico, verde y herbáceo; particularmente fresco y acuoso	8	8
Fórmula IIIa/IIIb	Almizclado, leñoso, polvoriento y dulce	8	9
Fórmula Va/Vb	Animal y coriáceo; limpio y herbáceo	7	8
Fórmula VIa/VIb	Leñoso, coriáceo fuerte y herbáceo	8	8
Fórmula VIIa/VIIb	Débil floral, muguet y sucio; parecido a la gasolina y áspero	6	2
Fórmula VIIIa/VIIIb	Floral, muguet, disolvente y agrio; débil y simple	3	2
Fórmula Xa/Xb	Descarado, grasiento y sucio; débil floral y afrutado	3	3
Fórmula XIa/XIb	Floral, muguet y graso; débil y simple	2	3
Fórmula XIIa/XIIb	Verde y ozónico; débil, simple y químico	4	3
Fórmula XIIIa/XIIIb	Afrutado y con sabor a fresa; volátil y no duradero; simple y delgado	6	4
Fórmula XVa/XVb	Leñoso, terroso y tipo cedro	7	9

Compuesto	Perfil de olores	Intensidad	Complejidad
Fórmula XVIa/XVIb	Herbal, leñoso, fresco, pino y balsámico	7	7
3-(1,1-dimetil-indan-5-il)-propanal y 3-(3,3-dimetil-indan-5-il)-propanal	Aldehídico, muguet, floral, fresco y agresivo.	9	6

La evaluación anterior demostró que las mezclas de Fórmulas IIa y IIb, Fórmulas IIIa y IIIb, Fórmulas Va y Vb, Fórmulas VIa y VIb y Fórmulas XVa y XVb mostraron propiedades altamente deseables sin notas desagradables. Por lo tanto, estos compuestos son superiores a sus análogos cercanos. Las propiedades ventajosas y distintivas de estas mezclas son inesperadas y no se habrían predicho. Compuestos representados por las Fórmulas Ia, Ib Iva, IVb, VIIa, VIIb, VIIIa, VIIIb, IXa, IXb, Xa, Xb, XIa, XIb, XIIa, XIIb, XIIIa, XIIIb, XIVa, XIVb, XVIa y XVIb son de referencia solamente.

Ejemplo XXVII

Se descubrió además, inesperadamente, que los compuestos anteriores son particularmente adecuados para ser utilizados en combinación con ingredientes de fragancia adicionales. Dichas combinaciones se ejemplifican a continuación:

Compuesto	Perfil de olores
Fórmula IIa/IIb	Cuando se utiliza en combinación con un compuesto de fragancia adicional tal como 3(*o* 4)- (4-hidroxi-4-metilpentil)-3-ciclohexeno-1-carboxaldehído, 3-(4-*terc.*-butilfenil)-2-metilpropanal, 2 (3-oxo-2-pentilciclopentil)acetato de metilo, 3-metil-4-fenil-2-butanol, 4-isobutil ciclohexanopropanal, 1-etoxi-4-(terc.-pentil)ciclohexano o 2-isobutil-4-metiltetrahidro-2H-piran-4-ol, la Fórmula IIa/IIb proporcionó un carácter acuoso muy agradable y deseable, agregó sustancialidad y aumentó la frescura de la floración sin interferencia o intrusión alguna. Por lo tanto, la Fórmula IIa/IIb ofrece el uso ventajoso en un intervalo de concentraciones en tales combinaciones.
Fórmula IIIa/IIIb	Cuando se utiliza en combinación con un ingrediente almizclado tal como 3-metilciclopentadecanona, 3-metilciclopentadec-5-en-1-ona, 3-metilciclopentadec-2-en-1-ona o 4,6,6,7,8,8-hexametil-1,3,4,6,7,8-hexahidrociclopenta[*g*]isocromeno, la Fórmula IIIa/IIIb fortaleció los olores de la combinación, a la vez que proporcionó un carácter suave y pulverulento que representa el aspecto "femenino" que es atractivo y deseable. Las combinaciones exhibieron más dimensiones y mayor complejidad.
Fórmula Va/Vb	Cuando se utiliza en combinación con un compuesto de fragancia adicional tal como metil cedril cetona o acetato de 1,2,3,3a,4,5,6,8a-octahidro-2-isopropilideno-4,8-dimetil-6-azulenol, la nota coriácea de Fórmula Va/Vb se volvió más limpia, menos animal, menos artificial y más genuina, mientras que el carácter leñoso aparecía potenciado.
Fórmula VIa/VIb	Cuando se utiliza en combinación con un determinado ingrediente leñoso, tal como 1-(1,2,3,4,5,6,7,8-octahidro-2,3,8,8-tetrametil-2-naftalenil)etanona, 1-[(1*R*,2*R*,8a*S*)-1,2,3,5,6,7,8,8a-octahidro-1,2,8,8-tetrametil-2-naftalenil]-etanona, 5,6,6-trimetil-3-hepten-2-ona, 3,4,5,6,6-pentametil-4-hepten-2-ona, 3,5,6,6-tetrametil-4-metilen-2-heptanona o aceite de madera de cedro, la nota coriácea era más limpia y agradable y la nota leñosa se había potenciado. Las propiedades de fragancia de cada uno de los ingredientes en la combinación se volvieron más difusivas y notables.
Fórmula XVa/XVb	Cuando se utiliza en combinación con un determinado ingrediente floral, tal como 4-isopropilciclohexilmetanol, acetato de 2-(3-oxo-2-pentilciclopentil)metilo o 3-metil-4-fenil-2-butanol, el carácter leñoso mejoró y el carácter floral se mantuvo claro. La Fórmula XVa/XVb proporcionó cremosidad y calidad balsámica. La combinación exhibió calidez, sensualidad y belleza.

Como se muestra, los ingredientes en las combinaciones anteriores eran compatibles y las combinaciones poseían olores particularmente deseables, fuertes y complejos. Estas propiedades ventajosas son inesperadas.

REIVINDICACIONES

1. Un compuesto seleccionado del grupo que consiste en:
1-(1,1-dimetil-octahidro-inden-5-il)-etanol;
1-(3,3-dimetil-octahidro-inden-5-il)-etanol;
1-(1,1-dimetil-octahidro-inden-5-il)-etanona;
1-(3,3-dimetil-octahidro-inden-5-il)-etanona;
1,1-dimetil-octahidro-inden-5-ol;
3,3-dimetil-octahidro-inden-5-ol;
1,1-dimetil-octahidro-inden-5-ona;
3,3-dimetil-octahidro-inden-5-ona;
1-(1,1,6-trimetil-octahidro-inden-5-il)-etanol;
1-(3,3,6-trimetil-octahidro-inden-5-il)-etanol; y
una mezcla de los mismos.

2. Una formulación de fragancia que contiene una cantidad olfatoria aceptable de un compuesto seleccionado del grupo que consiste en:
1-(1,1-dimetil-octahidro-inden-5-il)-etanol;
1-(3,3-dimetil-octahidro-inden-5-il)-etanol;
1-(1,1-dimetil-octahidro-inden-5-il)-etanona;
1-(3,3-dimetil-octahidro-inden-5-il)-etanona;
1,1-dimetil-octahidro-inden-5-ol;
3,3-dimetil-octahidro-inden-5-ol;
1,1-dimetil-octahidro-inden-5-ona;
3,3-dimetil-octahidro-inden-5-ona;
1-(1,1,6-trimetil-octahidro-inden-5-il)-etanol;
1-(3,3,6-trimetil-octahidro-inden-5-il)-etanol; y
una mezcla de los mismos.

3. La formulación de fragancia de la reivindicación 2, en donde la cantidad olfatoria aceptable es de 0,005 a 50 por ciento en peso de la formulación de fragancia.

4. La formulación de fragancia de la reivindicación 2, en donde la cantidad olfatoria aceptable es de 0,5 a 25 por ciento en peso de la formulación de fragancia.

5. La formulación de fragancia de la reivindicación 2, en donde la cantidad olfatoria aceptable es de 1 a 10 por ciento en peso de la formulación de fragancia.

6. La formulación de fragancia de la reivindicación 2, que comprende, además, un material seleccionado del grupo que consiste en un polímero, un oligómero y un no polímero.

7. La formulación de fragancia de la reivindicación 6, en donde 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.

8. La formulación de fragancia de la reivindicación 7, en donde el material de superficie sólida se selecciona del grupo que consiste en zeolita y sílice.

9. Un método para mejorar, potenciar o modificar una formulación de fragancia mediante la adición de una cantidad olfatoria aceptable de un compuesto seleccionado del grupo que consiste en:
1-(1,1-dimetil-octahidro-inden-5-il)-etanol;
1-(3,3-dimetil-octahidro-inden-5-il)-etanol;
1-(1,1-dimetil-octahidro-inden-5-il)-etanona;
1-(3,3-dimetil-octahidro-inden-5-il)-etanona;
1,1-dimetil-octahidro-inden-5-ol;
3,3-dimetil-octahidro-inden-5-ol;
1,1-dimetil-octahidro-inden-5-ona;
3,3-dimetil-octahidro-inden-5-ona;
1-(1,1,6-trimetil-octahidro-inden-5-il)-etanol;
1-(3,3,6-trimetil-octahidro-inden-5-il)-etanol; y una mezcla de los mismos.

10. El método de la reivindicación 9, en el que la cantidad olfatoria aceptable es de 0,005 a 50 por ciento en peso de la formulación de fragancia.

11. El método de la reivindicación 9, en el que la cantidad olfatoria aceptable es de 0,5 a 25 por ciento en peso de la formulación de fragancia.

12. El método de la reivindicación 9, en el que la cantidad olfatoria aceptable es de 1 a 10 por ciento en peso de la formulación de fragancia.

13. Un producto de fragancia que contiene una cantidad olfatoria aceptable del compuesto de la reivindicación 1.

14. El producto de fragancia de la reivindicación 13, en donde el producto de fragancia se selecciona 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 tejidos, un producto de limpieza, un ambientador, una pastilla de jabón, un jabón líquido, un gel de ducha, un baño de espuma, un producto para el cuidado de la piel, un producto para el cuidado del cabello, un desodorante, un antitranspirante, un producto para el cuidado femenino, un producto para el cuidado del bebé, un producto para el cuidado de la familia, un producto para el cuidado del aire, un sistema de suministro de fragancia, un desinfectante, un agente de lavado, un producto para la higiene dental y oral, un producto para el cuidado de la salud y un producto nutricional y un producto alimenticio.

15. El producto de fragancia de la reivindicación 14, en donde el producto de limpieza se selecciona del grupo que consiste en un detergente, un material para lavar la vajilla, una composición para fregar, un limpiacristales, un limpiador de metales, un limpiador de encimera, un limpiador de suelos, un limpiador de alfombras, un limpiador de inodoros y un aditivo blanqueador.

16. Un método para contrarrestar el mal olor en un espacio de aire o un sustrato, que comprende la etapa de introducir una cantidad eficaz para contrarrestar el mal olor del compuesto de la reivindicación 1.