

19



OFICINA ESPAÑOLA DE
PATENTES Y MARCAS

ESPAÑA



11 Número de publicación: **2 960 292**

51 Int. Cl.:

C07C 43/164 (2006.01) **A61Q 13/00** (2006.01)
C11D 3/20 (2006.01)
C07C 69/22 (2006.01)
C07C 69/157 (2006.01)
A61Q 19/00 (2006.01)
A61K 8/33 (2006.01)
C11D 3/50 (2006.01)
C07C 49/76 (2006.01)
C07C 69/24 (2006.01)
C07C 69/74 (2006.01)

12

TRADUCCIÓN DE PATENTE EUROPEA

T3

96 Fecha de presentación y número de la solicitud europea: **05.10.2020** **E 20200020 (4)**

97 Fecha y número de publicación de la concesión europea: **26.07.2023** **EP 3978469**

54 Título: **1-alkoxietil-3-isobutilbenceno y 1-carboxietil-3-isobutilbenceno como ingredientes aromáticos**

45 Fecha de publicación y mención en BOPI de la traducción de la patente:
04.03.2024

73 Titular/es:
BASF SE (100.0%)
Carl-Bosch-Strasse 38
67056 Ludwigshafen am Rhein, DE

72 Inventor/es:
WEINGARTEN, MELANIE;
SIEGEL, WOLFGANG;
PELZER, RALF y
BRU ROIG, MIRIAM

74 Agente/Representante:
GONZÁLEZ PECES, Gustavo Adolfo

ES 2 960 292 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

1-alkoxietil-3-isobutilbenceno y 1-carboxietil-3-isobutilbenceno como ingredientes aromáticos

Campo de la invención

La presente invención reivindicada se dirige al uso del compuesto de la fórmula (I) para impartir una impresión de aroma a una composición. La presente invención reivindicada también se refiere a un procedimiento de impartir tal impresión de aroma. La presente invención se dirige además a composiciones que comprenden el compuesto de la fórmula (I) y al menos un producto químico aromatizante, así como a composiciones que comprenden el compuesto de la fórmula (I) y al menos un componente adicional seleccionado del grupo que consiste en productos químicos aromatizantes, tensioactivos, componentes oleosos, antioxidantes, agentes activos desodorantes y disolventes. La presente invención también se refiere a un compuesto de la fórmula (I').

Antecedentes de la invención

Los productos químicos aromáticos, especialmente las fragancias, son de gran interés sobre todo en el campo de los cosméticos y las composiciones de limpieza y lavado. Las fragancias de origen natural son, en su mayoría, costosas, suelen estar limitadas en su cantidad disponible y, debido a las fluctuaciones de las condiciones ambientales, también están sujetas a variaciones en su contenido, pureza, etc. Por lo tanto, para evitar estos factores indeseables, es de gran interés crear sustancias sintéticas que tengan propiedades organolépticas que se asemejen a las fragancias naturales más costosas o que tengan perfiles organolépticos novedosos e interesantes.

A pesar del gran número de productos químicos aromáticos sintéticos ya existentes (fragancias y aromatizantes), existe una necesidad constante de nuevos componentes a fin de poder satisfacer la multitud de propiedades deseadas para ámbitos de aplicación extremadamente diversos. Entre ellas se encuentran, en primer lugar, las propiedades organolépticas, es decir, los compuestos deben tener propiedades odoríferas (olfativas) o gustativas ventajosas. Además, los productos químicos aromáticos deben tener propiedades secundarias positivas, tales como, por ejemplo, un procedimiento de preparación eficaz, la posibilidad de proporcionar mejores perfiles sensoriales como resultado de los efectos sinérgicos con otros químicos aromáticos, una mayor estabilidad en una amplia gama de composiciones así como bajo ciertas condiciones de aplicación, una mayor extensibilidad y/o un mejor poder de permanencia.

Existe una necesidad creciente de productos químicos aromatizantes que puedan impartir una impresión aromática, especialmente floral y/o marina y/o verde a una composición. Tales propiedades son de especial interés para composiciones tales como, por ejemplo, composiciones para el cuidado corporal, artículos de higiene, composiciones limpiadoras, composiciones detergentes textiles y composiciones para dispensadores de aromas. De especial interés son las sustancias químicas aromáticas, que pueden impartir una o más impresiones aromáticas diferentes a una composición, para de ese modo contribuir a un perfil sensorial rico e interesante, especialmente un perfil olfativo de la composición. Además, especialmente en lo que respecta a los productos químicos aromáticos que pueden impartir una impresión de aroma, la sustantividad así como la tenacidad son de especial interés para obtener una impresión odorífera duradera en la composición así como en la superficie con la que se trata la composición.

Sin embargo, dado que incluso pequeños cambios en la estructura química provocan cambios masivos en las propiedades sensoriales tales como el olor y también el sabor, la búsqueda dirigida de sustancias con determinadas propiedades sensoriales, tales como un determinado olor, es extremadamente difícil. Por lo tanto, la búsqueda de nuevas fragancias y aromatizantes es, en la mayoría de los casos, difícil y laboriosa, sin saber si realmente se encontrará una sustancia con el olor y/o el sabor deseados.

Un objeto de la presente invención reivindicada es proporcionar nuevos productos químicos aromáticos. Preferentemente, estos deben tener propiedades organolépticas agradables.

Es un objeto de la presente invención proporcionar un producto químico aromático, que pueda impartir una impresión de aroma, preferentemente una nota de zanahoria, o una nota de chocolate, o una nota de hierbas, o una nota cerosa, o una nota leñosa, o una nota agrícola, o una nota de lirio de los valles, o una nota acuosa, o una nota jabonosa, o una nota floral, o una nota parecida al pomelo, o una nota dulce, o una nota de moho, o cualquier combinación de dos o más de las notas mencionadas a una composición.

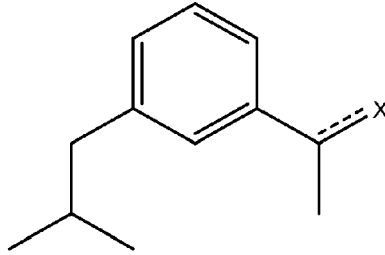
Es además un objeto de la presente invención proporcionar un producto químico aromático, que pueda impartir una impresión de aroma duradera, preferentemente una nota de zanahoria, o una nota de chocolate, o una nota de hierbas, o una nota cerosa, o una nota leñosa, o una nota agrícola, o una nota de lirio de los valles, o una nota acuosa, o una nota jabonosa, o una nota floral, o una nota parecida al pomelo, o una nota dulce, o una impresión odorífera de nota de moho, o cualquier combinación de dos o más de las notas mencionadas a una composición, así como a las superficies tratadas con dichas composiciones, tales como por ejemplo la piel y/o los textiles, y es estable en una amplia variedad de composiciones. Los Documentos 1) *Common Fragrance and Flavor Materials and Uses*, 2001, páginas 7 a 165 y 2) WO 2018/077947 desvelan compuestos para ser usados como productos químicos de aroma.

Sumario de la invención

Se encontró sorprendentemente que un compuesto de la fórmula (I) imparte una impresión de aroma, especialmente una nota de zanahoria, o una nota de chocolate, o una nota de hierbas, o una nota cerosa, o una nota leñosa, o una nota agrícola, o una nota de lirio de los valles, o una nota acuosa, o una nota jabonosa, o una nota floral, o una nota parecida al pomelo, o una nota dulce, o una impresión odorífera de nota de moho, a una composición. Tal impresión aromática es estable en la amplia gama de composiciones y, por lo tanto, contribuye a un perfil aromático rico e interesante de la composición.

5

Por lo tanto, en un aspecto, la presente invención está dirigida al uso de al menos un compuesto de la fórmula (I),

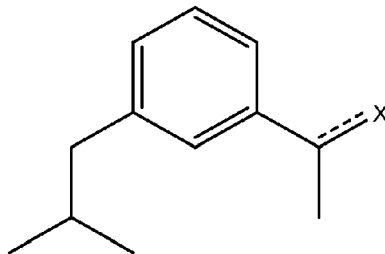


fórmula (I),

en la que

- 10 X se selecciona del grupo que consiste en -O-R, -O(C=O)-R y =O;
 R se selecciona del grupo que consiste en -H, alquilo C₁-C₅ lineal o ramificado, no sustituido y cicloalquilo C₃-C₅ no sustituido;
 o su sal o un estereoisómero del mismo,
 para impartir una impresión de aroma a una composición.

- 15 En otro aspecto, la presente invención proporciona un procedimiento para impartir una impresión de aroma a una composición que comprende al menos la etapa de añadir al menos un compuesto de la fórmula (I),

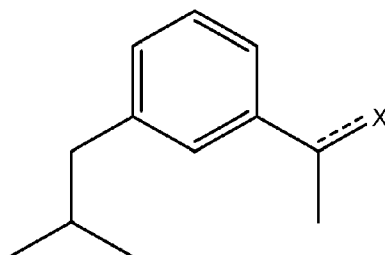


fórmula (I),

en la que

- 20 X se selecciona del grupo que consiste en -O-R, -O(C=O)-R y =O;
 R se selecciona del grupo que consiste en -H, alquilo C₁-C₅ lineal o ramificado, no sustituido y cicloalquilo C₃-C₅ no sustituido;
 o su sal o un estereoisómero del mismo,
 a la composición.

- 25 En otro aspecto más, la presente invención proporciona una composición que comprende al menos un compuesto de la fórmula (I),



fórmula (I),

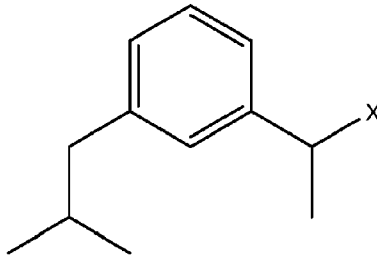
en la que

X se selecciona del grupo que consiste en $-O-R$, $-O(C=O)-R$ y $=O$;
 R se selecciona del grupo que consiste en $-H$, alquilo C_1-C_5 lineal o ramificado, no sustituido y cicloalquilo C_3-C_5 no sustituido;

5 o su sal o un estereoisómero del mismo y

- (i) al menos una sustancia química aromática diferente de la fórmula (I), o
- (ii) al menos un portador químico no aromático, o
- (iii) ambos de (i) y (ii).

En otro aspecto más, la presente invención proporciona un compuesto de la fórmula (I'),



fórmula (I'),

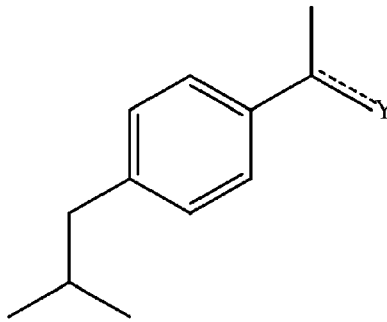
10

en la que

X se selecciona del grupo que consiste en $-O-R_a$, y $-O(C=O)-R_b$;
 R_a se selecciona del grupo que consiste en alquilo C_2-C_5 lineal o ramificado, no sustituido y cicloalquilo C_3-C_5 no sustituido;

15 R_b se selecciona del grupo que consiste en alquilo C_1-C_5 lineal o ramificado, no sustituido y cicloalquilo C_3-C_5 no sustituido
 o su sal o un estereoisómero del mismo.

En otro aspecto, la presente invención se refiere a una mezcla que comprende al menos un compuesto de la fórmula (II),



fórmula (II),

20

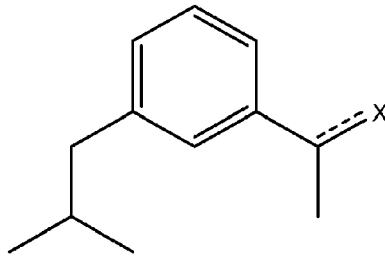
en la que

Y se selecciona del grupo que consiste en $-O-R_1$, $-O(C=O)-R_1$ y $=O$;

R_1 se selecciona del grupo que consiste en alquilo C_1-C_5 lineal o ramificado, no sustituido y cicloalquilo C_3-C_5 no sustituido;

25 o su sal o un estereoisómero del mismo;
 y

al menos un compuesto de la fórmula (I)



fórmula (I),

en la que

X se selecciona del grupo que consiste en -O-R, -O(C=O)-R y =O;

5 R se selecciona del grupo que consiste en -H, alquilo C₁-C₅ lineal o ramificado, no sustituido y cicloalquilo C₃-C₅ no sustituido;

o su sal o un estereoisómero del mismo.

En otro aspecto la presente invención, se refiere al uso de la mezcla que comprende al menos un compuesto de la fórmula (I) y al menos un compuesto de la fórmula (II) para impartir una impresión de aroma.

10 En otro aspecto, la presente invención se refiere a una composición que comprende la mezcla de al menos un compuesto de la fórmula (I) y al menos un compuesto de la fórmula (II) y su uso para impartir una impresión de aroma.

Descripción detallada de la invención

15 La siguiente descripción detallada es de naturaleza meramente ejemplar y no pretende limitar la presente invención reivindicada o la aplicación y usos de la presente invención reivindicada. Además, no se pretende quedar vinculado por ninguna teoría presentada en el campo técnico precedente, los antecedentes, el sumario o la siguiente descripción detallada.

20 Los términos “que comprende”, “comprende” y “compuesto por”, como se usan en la presente memoria, son sinónimos de “que incluye”, “incluye” o “que contiene”, “contiene”, y son inclusivos o abiertos y no excluyen miembros, elementos o etapas de procedimiento adicionales no repetidas. Se apreciará que los términos “que comprende”, “comprende” y “compuesto por” en la presente memoria usados comprenden los términos “que consiste en”, “consiste” y “consiste en”.

25 Además, los términos “primero”, “segundo”, “tercero” o “(a)”, “(b)”, “(c)”, “(d)” etc. y similares en la descripción y en las reivindicaciones se usan para distinguir entre elementos similares y no necesariamente para describir un orden secuencial o cronológico. Se debe entender que los términos usados de este modo son intercambiables en circunstancias apropiadas y que las realizaciones de la invención en la presente memoria descritas son capaces de funcionar en otras secuencias que las descritas o ilustradas en la presente memoria. En caso de que los términos “primero”, “segundo”, “tercero” o “(a)”, “(b)”, “(c)”, “(d)”, “i”, “ii”, etc. se refieran a etapas de un procedimiento o uso o ensayo, no existe coherencia temporal o de intervalos de tiempo entre las etapas, es decir, las etapas se pueden llevar a cabo simultáneamente o puede haber intervalos de tiempo de segundos, minutos, horas, días, semanas, meses o incluso años entre dichos etapas, a menos que se indique lo contrario en la solicitud como se establece en la presente memoria anteriormente o a continuación.

30 En los siguientes pasajes, se definen con más detalle diferentes aspectos de la técnica. Cada aspecto definido de este modo se podrá combinar con cualquier otro aspecto o aspectos, salvo que se indique claramente lo contrario. En particular, cualquier característica indicada como preferente o ventajosa se puede combinar con cualquier otra característica o características indicadas como preferentes o ventajosas.

35 La referencia a lo largo de esta memoria descriptiva a “una realización” o “una realización” o “realización preferente” significa que un rasgo, estructura o característica particular descrita en relación con la realización está incluida en al menos una realización de la presente invención reivindicada. Por lo tanto, las apariciones de las frases “en una realización” o “en una realización preferente” o “en una realización preferente” en varios lugares a lo largo de esta memoria descriptiva no se refieren necesariamente a la misma realización, pero se pueden referir. Además, los rasgos, 40 estructuras o características se pueden combinar de cualquier manera adecuada, como sería evidente para los expertos en la técnica a partir de esta divulgación, en una o más realizaciones. Además, mientras que algunas realizaciones descritas en la presente memoria incluyen algunas características, pero no otras incluidas en otras realizaciones, las combinaciones de características de diferentes realizaciones se entienden dentro del alcance de la técnica, y forman diferentes realizaciones, como sería entendido por aquellos en la técnica. Por ejemplo, en las 45 reivindicaciones anexas, cualquiera de las realizaciones reivindicadas se usa en cualquier combinación.

Además, los intervalos definidos a lo largo de la memoria descriptiva incluyen también los valores finales, es decir, un

intervalo de 1 a 10 implica que tanto 1 como 10 están incluidos en el intervalo. Para evitar cualquier duda, el solicitante tendrá derecho a cualquier equivalente de acuerdo con la legislación aplicable.

Definiciones

5 En el contexto de la presente invención, el término "aromático" se refiere a una propiedad sensorial y comprende un olor y/o un sabor.

10 El término "producto químico aromático" designa una sustancia que se usa para obtener una impresión sensorial u organoléptica (usadas indistintamente en la presente memoria) y comprende su uso para obtener una impresión olfativa y/o de sabor. El término "impresión olfativa" indica una impresión de olor sin ningún juicio positivo o negativo, mientras que los términos "impresión de aroma", "impresión de fragancia" y "impresión de olor" (usados indistintamente en la presente memoria), como se usan en la presente memoria, están relacionados con una impresión de olor que generalmente se percibe como agradable. De este modo, una "fragancia" o "aroma" denota un producto químico aromático que induce predominantemente una impresión de olor agradable. Un sabor induce una impresión gustativa.

15 El término "composición aromática", como se usa en la presente memoria, se refiere a una composición que induce un aroma. El término composición aromática comprende "composición de olor" y/o "composición de sabor". Una composición de olor es una composición que induce predominantemente una impresión de olor, y una composición de sabor es una composición que induce predominantemente una impresión de sabor.

El término composición olorosa comprende la "composición de fragancia" o la "composición de aroma" (usadas indistintamente en la presente memoria), que inducen predominantemente una impresión de olor que generalmente se percibe como agradable.

20 Las expresiones hedonistas más generales "propiedades sensoriales ventajosas" o "propiedades organolépticas ventajosas" describen la bondad y la concisión de una impresión organoléptica transmitida por un producto químico aromático. La "bondad" y la "concisión" son términos que resultan familiares para los expertos en la técnica, tales como los perfumistas. Por lo general, la bondad se refiere a una impresión sensorial agradable, espontánea y percibida positivamente. Sin embargo, "bondadoso" no tiene por qué ser sinónimo de "dulce". "Bondadoso" también puede ser el olor del almizcle o del sándalo. La "concisión" se refiere generalmente a una impresión sensorial espontánea que, para el mismo panel de ensayo, provoca un recuerdo reproduciblemente idéntico de algo específico. Por ejemplo, una sustancia puede tener un olor que recuerde espontáneamente al de una "manzana"; el olor sería entonces concisamente de "manzanas". Si este olor a manzana fuera muy agradable porque el olor recuerda, por ejemplo, a una manzana dulce y completamente madura, el olor se denominaría "bondadoso". Sin embargo, el olor de una manzana típicamente ácida también puede ser conciso. Si ambas reacciones surgen al oler la sustancia, en el ejemplo, un bondadoso y conciso olor a manzana, entonces esta sustancia tiene propiedades sensoriales especialmente ventajosas.

35 Las expresiones "combinación de", "en combinación con" o "combinado con", cuando se usan en la presente memoria para referirse a las composiciones, los procedimientos o el uso de dos compuestos, tienen en cuenta el hecho de que no es necesario usar los dos compuestos en forma de una mezcla física de dichos compuestos, sino que se pueden usar (por ejemplo, añadirse) por separado. Cuando los compuestos se usan por separado, se pueden usar (por ejemplo, añadirse) secuencialmente (es decir, uno tras otro) en cualquier orden, o concurrentemente (es decir, básicamente al mismo tiempo).

40 El término "potenciación" o "potenciar" se usa en la presente memoria para describir el efecto de realzar y/o modificar el aroma de un producto químico aromatizante o de una composición. El término "realzar" comprende una mejora de la amabilidad y/o concisión de un aroma y/o una mejora de la intensidad. El término "modificar" comprende el cambio de un perfil aromático.

45 La intensidad se puede determinar a través de la determinación del valor de umbral. Un valor de umbral es la concentración de una sustancia en el espacio colector de gas correspondiente a partir de la cual un panel de pruebas representativo puede seguir percibiendo una impresión de olor, aunque ya no deba ser definido.

Los efectos potenciadores son especialmente deseados cuando se requieren aplicaciones caracterizadas por la nota de salida, en las que la impresión de olor se debe transmitir de forma especialmente rápida e intensa, por ejemplo, en desodorantes, ambientadores o en el sector del sabor en los chicles.

Los términos "la invención se refiere a" y "la invención se dirige a" se usan como sinónimos en toda la invención.

50 Los términos "compuesto" y "sustancia" se usan como sinónimos en toda la invención.

55 El término "tenacidad" describe el comportamiento de evaporación en el tiempo de un producto químico aromático. La tenacidad se puede determinar, por ejemplo, por medio de la aplicación del producto químico aromatizante a una tira de prueba, y por medio de la posterior evaluación olfativa de la impresión de olor de la tira de prueba. En el caso de las sustancias químicas aromáticas de alta tenacidad, el intervalo de tiempo tras el cual el panel puede seguir identificando una impresión aromática es largo.

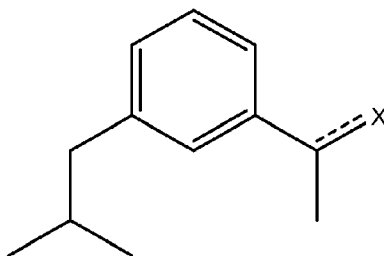
5 El término "sustantividad" describe la interacción de un producto químico aromático con una superficie, tal como por ejemplo la piel o un tejido, especialmente tras un tratamiento posterior de la superficie, tal como por ejemplo el lavado. La sustantividad se puede determinar, por ejemplo, por medio del lavado de un textil con una composición detergente textil que contenga el producto químico aromatizante y la evaluación olfativa del textil directamente después del lavado (textil húmedo), así como la evaluación del textil seco después de un almacenamiento prolongado.

El término "estabilidad" describe el comportamiento de un producto químico aromático en contacto con el oxígeno, la luz y/u otras sustancias. Un producto químico aromático de gran estabilidad mantiene su perfil aromático durante un largo período de tiempo, preferentemente en una gran variedad de composiciones y bajo diversas condiciones de almacenamiento.

10 Para conferir una impresión de aroma duradera a una composición o a una superficie tratada con una composición, la tenacidad, la sustantividad así como la estabilidad del producto químico aromático en las composiciones deben ser preferentemente altas.

Uso y procedimiento

Una realización de la invención se dirige a un uso de al menos un compuesto de la fórmula (I),



fórmula (I),

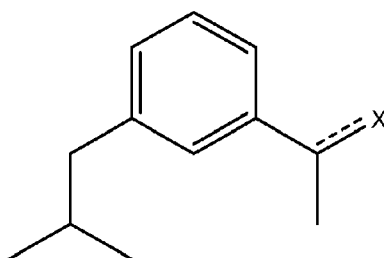
15 en la que

X se selecciona del grupo que consiste en -O-R, -O(C=O)-R y =O;

R se selecciona del grupo que consiste en -H, alquilo C₁-C₅ lineal o ramificado, no sustituido y cicloalquilo C₃-C₅ no sustituido;

20 o su sal o un estereoisómero del mismo,
para impartir una impresión de aroma a una composición.

Una realización de la invención está dirigida a un procedimiento para impartir una impresión de aroma a una composición que comprende al menos la etapa de añadir al menos un compuesto de la fórmula (I),



fórmula (I),

25 en la que

X se selecciona del grupo que consiste en -O-R, -O(C=O)-R y =O;

R se selecciona del grupo que consiste en -H, alquilo C₁-C₅ lineal o ramificado, no sustituido y cicloalquilo C₃-C₅ no sustituido;

30 o su sal o un estereoisómero del mismo,
a la composición.

En una realización, X se selecciona del grupo que consiste en -O-R, -O(C=O)-R y =O;

En una realización preferente, X es O-R.

En otra realización preferente, X es -O(C=O)-R.

5 En una realización preferente, R se selecciona del grupo que consiste en -H -CH₃, -CH₂CH₃, -CH₂CH₂CH₃, -CH(CH₃)₂, -CH(CH₃)(C₂H₅), -CH₂CH(CH₃)₂, -CH₂CH₂CH₂CH₃, -CH(CH₃)₂, -CH₂CH(CH₃)₂, -CH(CH₃)CH₂CH₃, -CH(CH₃)CH₂CH₃, ciclopropilo y ciclobutilo.

En una realización más preferente, R es -CH₂CH₃.

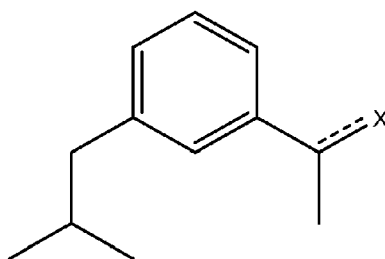
10 En otra realización preferente más, la composición se selecciona de composiciones de perfume, composiciones para el cuidado del cuerpo, artículos de higiene, composiciones de limpieza, composiciones de detergentes textiles, composiciones para dispensadores de aromas, alimentos, complementos alimentarios, composiciones farmacéuticas y composiciones para la protección de cultivos.

15 En una realización, la impresión es una nota de zanahoria. En una realización, la impresión es una nota de chocolate. En una realización, la impresión es una nota de hierbas. En una realización, la impresión es una nota cerosa. En una realización, la impresión es una nota amaderada. En una realización, la impresión es una nota agrícola. En una realización, la impresión es una nota acuosa. En una realización, la impresión es una nota de moho. En una realización, la impresión es una nota jabonosa. En una realización, la impresión es una nota floral. En una realización, la impresión es una nota de lirio de los valles. En una realización, la impresión es una nota parecida al pomelo. En una realización, la impresión es una nota dulce. En una realización, el compuesto puede tener más de una impresión aromática.

20 En una realización preferente, el total de compuesto de la fórmula (I) o sus sales o estereoisómero está presente en una cantidad en el intervalo de $\geq 0,01\%$ en peso a $\leq 70,0\%$ en peso, más preferentemente en el intervalo de $\geq 0,05\%$ en peso a $\leq 60,0\%$ en peso, particularmente en el intervalo de $\geq 0,1\%$ en peso a $\leq 50,0\%$ en peso, en base al peso total de la composición. En otra realización preferente, el total del compuesto de la fórmula (I) o sus sales o estereoisómeros está presente en una cantidad en el intervalo de 0,05% en peso a 10% en peso, más preferentemente de 0,1% en peso a 5% en peso, aún más preferentemente de 0,2% en peso a 3% en peso, más preferentemente de 20% en peso a 70% en peso, particularmente de 25% en peso a 50% en peso, en base al peso total de la composición.

25 Composición

Una realización de la presente invención reivindicada se dirige a una composición que comprende al menos un compuesto de la fórmula (I),



fórmula (I),

en la que

30 X se selecciona del grupo que consiste en -O-R, -O(C=O)-R y =O;

R se selecciona del grupo que consiste en -H, alquilo C₁-C₅ lineal o ramificado, no sustituido y cicloalquilo C₃-C₅ no sustituido;

o su sal o un estereoisómero del mismo y

35 (i) al menos una sustancia química aromática diferente de la fórmula (I), o
(ii) al menos un portador químico no aromático, o
(iii) ambos de (i) y (ii).

En una realización, X se selecciona del grupo que consiste en -O-R, -O(C=O)-R y =O. En una realización preferente, X es O-R.

En otra realización preferente, X es -O(C=O)-R.

40 En una realización preferente, R se selecciona del grupo que consiste en -H -CH₃, -CH₂CH₃, -CH₂CH₂CH₃, -CH(CH₃)₂, -CH(CH₃)(C₂H₅), -CH₂CH(CH₃)₂, -CH₂CH₂CH₂CH₃, -CH(CH₃)₂, -CH₂CH(CH₃)₂, -CH(CH₃)CH₂CH₃, -CH(CH₃)CH₂CH₃, ciclopropilo y ciclobutilo.

En aún otra realización preferente, el al menos un aroma químico (i) se selecciona del grupo que consiste en acetato de geranilo, alfa-hexilcinamaldehído, isobutirato de 2-fenoxietilo, dihidromircenol, dihidrojasmonato de metilo, 4,6,6,7,8,8-hexametil-1,3,4,6,7,8-hexahidrociclopenta[g]benzopirano, tetrahidrolinalol, etilinalol, salicilato de bencilo, 2-metil-3-(4-terc-butilfenil)propanal, alcohol cinámico, acetato de 4,7-metano-3a,4,5,6,7,7a-hexahidro-5-indenilo y/o acetato de 4,7-metano-3a,4,5,6,7,7a-hexahidro-6-indenilo, citronelol, acetato de citronelilo, tetrahidrogeraniol, vianillina, acetato de linalilo, acetato de estirolo, octahidro-2,3,8,8-tetrametil-2-acetonafona y/o 2-acetil-1,2,3,4,6,7,8-octahidro-2,3,8,8-tetrametilnaftaleno, salicilato de hexilo, acetato de 4-terc-butilciclohexilo, acetato de 2-terc-butilciclohexilo, alfa-ionona, n-alfa-metilionona, alfa-isometilionona, cumarina, acetato de terpinilo, alcohol 2-feniletílico, 4-(4-hidroxi-4-metilpentil)-3-ciclohexenocarboxaldehído, alfa-amilcinamaldehído, brasilato de etileno, (E)-y/o (Z)-3-metilciclopentadec-5-enona, 15-pentadec-11-enolida y/o 15-pentadec-12-enolida, 15-ciclopentadecanolida, 1-(5,6,7,8-tetrahidro-3,5,5,6,8,8-hexametil-2-naftalenil)etanona, 2-isobutil-4-metiltetrahidro-2H-pirano-4-ol, 2-etil-4-(2,3-trimetil-3-ciclopenten-1-il)-2-buten-1-ol, acetato de cis-3-hexenilo, acetato de trans-3-hexenilo, trans-2/cis-6-nonadienol, 2,4-dimetil-3-ciclohexenocarboxaldehído, 2,4,4,7-tetrametiloct-6-en-3-ona, 2,6-dimetil-5-hepten-1-al, borneol, 3-(3-isopropilfenil)butanal, 2-metil-3-(3,4-metilendioxfenil)propanal, 3-(4-etilfenil)-2,2-dimetilpropanal, 7-metil-2H-1,5-benzodioxepin-3(4H)-ona, acetato de 3,3,5-trimetilciclohexilo, 2,5,5-trimetil-1,2,3,4,4a,5,6,7-octahidronaftalen-2-ol, 3-(4-terc-butilfenil)-propanal, 2-metilpentanoato de etilo, etoximetoxiciclododecano, 2,4-dimetil-4,4a,5,9b-tetrahidroin-deno[1,2-d][1,3]dioxina, acetato de (2-terc-butilciclohexilo) y 3-[5,5,6-trimetilbiciclo[2.2.1]hept-2-il]ciclohexan-1-ol.

En otra realización preferente, el al menos un aroma químico (i) se selecciona del grupo que consiste en benzoato de metilo, acetato de bencilo, acetato de geranilo, 2-isobutil-4-metiltetrahidro-2H-pirano-4-ol, linalol, 2-isobutil-4-metiltetrahidro-2H-pirano-4-ol y benzoato de metilo.

En otra realización preferente, el al menos un aroma químico (i) se selecciona del grupo que consiste en etilvanillina, vainillina, 2,5-dimetil-4-hidroxi-2H-furan-3-ona (furanol) o 3-hidroxi-2-metil-4H-pirano-4-ona (maltol).

Otros productos químicos aromáticos con los que el compuesto de la fórmula (I) , se puede combinar, para dar una composición de acuerdo con la presente invención reivindicada, se pueden encontrar, por ejemplo, en S. Arctander, *Perfume and Flavor Chemicals*, Vol. I y II, Montclair, N. J., 1969, autopublicado o en K. Bauer, D. Garbe y H. Surburg, *Common Fragrance and Flavor Materials*, 4ta edición, Wiley- VCH, Weinheim, 2001. En concreto, cabe mencionar:

extractos de materias primas naturales, tales como aceites esenciales, concretos, absolutos, resinas, resinoides, bálsamos, tinturas, tales como, por ejemplo,

tintura de ámbar gris; aceite de amyris; aceite de semillas de angélica; aceite de raíz de angélica; aceite de anís; aceite de valeriana; aceite de albahaca; absoluto de musgo de árbol; aceite de laurel; aceite de artemisa; resina de benjuí; aceite de bergamota; absoluto de cera de abejas; aceite de alquitrán de abedul; aceite de almendra amarga; aceite de ajedrea; aceite de buchu; aceite de cabreuva; aceite de cade; aceite de calmus; aceite de alcanfor; aceite de cananga; aceite de cardamomo; aceite de cascarilla; aceite de casia; absoluto de casia; absoluto de castóreo; aceite de hojas de cedro; aceite de madera de cedro; aceite de cistus; aceite de citronela; aceite de limón; aceite de bálsamo de copaiba; aceite de cilantro; aceite de raíz de costus; aceite de comino; aceite de ciprés; aceite de davana; aceite de hierba de eneldo; aceite de semillas de eneldo; absoluto de Eau de brouts; absoluto de musgo de roble; aceite de elemí; aceite de estragón; aceite de eucalipto citriodora; aceite de eucalipto; aceite de hinojo; aceite de agujas de pino; aceite de gálbano; resina de gálbano; aceite de geranio; aceite de pomelo; aceite de guayaco; bálsamo de gurjun; aceite de bálsamo de gurjun; absoluto de helicriso; aceite de helicriso; aceite de jengibre; absoluto de raíz de iris; aceite de raíz de iris; absoluto de jazmín; aceite de calmus; aceite de manzanilla azul; aceite de manzanilla romana; aceite de semillas de zanahoria; aceite de cascarilla; aceite de agujas de pino; aceite de menta verde; aceite de alcaravea; aceite de ládano; absoluto de ládano; resina de ládano; absoluto de lavandín; aceite de lavandín; absoluto de lavanda; aceite de lavanda; aceite de hierba limón; aceite de levístico; aceite de lima destilado; aceite de lima prensado; aceite de linalol; aceite de *Litsea cubeba*; aceite de hojas de laurel; aceite de macis; aceite de mejorana; aceite de mandarina; aceite de corteza de massaia; absoluto de mimosa; aceite de semillas de almizcle; tintura de almizcle; aceite de *Salvia sclarea*; aceite de nuez moscada; absoluto de mirra; aceite de mirra; aceite de mirto; aceite de hojas de clavo; aceite de flores de clavo; aceite de neroli; aceite de olíbano; aceite de opopanax; aceite de azahar; aceite de naranja; aceite de orégano; aceite de palmarosa; aceite de pachulí; aceite de perilla; aceite de bálsamo del Perú; aceite de hojas de perejil; aceite de semillas de perejil; aceite de petitgrain; aceite de menta; aceite de pimienta; aceite de pimiento; aceite de pino; aceite de poleo; absoluto de rosa; aceite de palo de rosa; aceite de rosa; aceite de romero; aceite de salvia dalmata; aceite de salvia española; aceite de sándalo; aceite de semillas de apio; aceite de anís estrellado; aceite de styrax; aceite de tagetes; aceite de agujas de abeto; aceite de árbol de té; aceite de trementina; aceite de tomillo; bálsamo de tolú; absoluto de tonka; absoluto de nardo; extracto de vainilla; absoluto de hojas de violeta; aceite de verbena; aceite de vetiver; aceite de bayas de enebro; aceite de lías de vino; aceite de ajenjo; aceite de verde de invierno; aceite de hisopo; absoluto de civeta; aceite de hojas de canela; aceite de corteza de canela, y fracciones de los mismos o ingredientes aislados de los mismos;

fragancias individuales del grupo de los hidrocarburos, tales como, por ejemplo, 3-careno; alfa-pineno; beta-pineno; alfa-terpineno; gamma-terpineno; p-cimeno; bisaboleno; canfeno; cariofileno; cedreno; farneseno; limoneno; longifoleno; mirceno; ocimeno; valenceno; (E,Z)-1,3,5-undecatrieno; estireno; difenilmetano;

- los alcoholes alifáticos tales como, por ejemplo, hexanol; octanol; 3-octanol; 2,6-dimetilheptanol; 2-metil-2-heptanol; 2-metil-2-octanol; (E)-2-hexenol; (E)- y (Z)-3-hexenol; 1-octen-3-ol; mezcla de 3,4,5,6,6-pentametil-3/4-hepten-2-ol y 3,5,6,6-tetrametil-4-metilenoheptan-2-ol; (E,Z)-2,6-nonadienol; 3,7-dimetil-7-metoxioctan-2-ol; 9-decenol; 10-undecenol; 4-metil-3-decen-5-ol;
- 5 los aldehídos alifáticos y sus acetales tales como, por ejemplo, hexanal; heptanal; octanal; nonanal; decanal; undecanal; dodecanal; tridecanal; 2-metiloctanal; 2-metilnonanal; (E)-2-hexenal; (Z)-4-heptenal; 2,6-dimetil-5-heptenal; 10-undecenal; (E)-4-decenal; 2-dodecenal; 2,6,10-trimetil-9-undecenal 2,6,10-trimetil-5,9-undecadienal; heptanal dietilacetil; 1,1-dimetoxi-2,2,5-trimetil-4-hexeno; citroneliloxiacetaldehído; (E/Z)-1-(1-metoxipropoxi)-hex-3-eno; las cetonas alifáticas y sus oximas tales como, por ejemplo, 2-heptanona; 2-octanona; 3-octanona; 2-nonanona; 5-metil-3-heptanona; oxima de 5-metil-3-heptanona; 2,4,4,7-tetrametil-6-octen-3-ona; 6-metil-5-hepten-2-ona;
- 10 los compuestos alifáticos que contienen azufre tales como, por ejemplo, 3-metilhexanol; acetato de 3-metilhexilo; 3-mercaptohexanol; acetato de 3-mercaptohexilo; butirato de 3-mercaptohexilo; acetato de 3-acetilhexilo; 1-menteno-8-tiol;
- 15 los nitrilos alifáticos tales como, por ejemplo, 2-nonenonitrilo; 2-undecenonitrilo; 2-tridecenonitrilo; 3,12-tridecadienonitrilo; 3,7-dimetil-2,6-octadienonitrilo; 3,7-dimetil-6-octenonitrilo;
- los ésteres de ácidos carboxílicos alifáticos tales como, por ejemplo, formiato de (E)- y (Z)-3-hexenilo; acetoacetato de etilo; acetato de isoamilo; acetato de hexilo; acetato de 3,5,5-trimetilhexilo; acetato de 3-metil-2-butenilo; acetato de (E)-2-hexenilo; acetato de (E)- y (Z)-3-hexenilo; acetato de octilo; acetato de 3-octilo; acetato de 1-octen-3-ilo; butirato de etilo; butirato de butilo; butirato de isoamilo; butirato de hexilo; isobutirato de (E)- y (Z)-3-hexenilo; crotonato de hexilo; isovalerato de etilo; 2-metilpentanoato de etilo; hexanoato de alilo; heptanoato de etilo; heptanoato de alilo; octanoato de etilo; (E,Z)-2,4-decadienoato de etilo; 2-octinato de metilo; 2-noninato de metilo; 2-isoamiloxiacetato de alilo; 3,7-dimetil-2,6-octadienoato de metilo; crotonato de 4-metilo-2-pentilo;
- 20 los alcoholes terpénicos acíclicos tales como, por ejemplo, geraniol; nerol; linalol; lavandulol; nerolidol; farnesol; tetrahidrolinalol; 2,6-dimetil-7-octen-2-ol; 2,6-dimetiloctan-2-ol 2-metil-6-metilen-7-octen-2-ol; 2,6-dimetil-5,7-octadien-2-ol; 2,6-dimetil-3,5-octadien-2-ol; 3,7-dimetil-4,6-octadien-3-ol; 3,7-dimetil-1,5,7-octatrien-3-ol; 2,6-dimetil-2,5,7-octatrien-1-ol; y los formiatos, acetatos, propionatos, isobutiratos, butiratos, isovaleratos, pentanoatos, hexanoatos, crotonatos, tiglinatos y 3-metil-2-butenos de los mismos;
- 25 los aldehídos y cetonas terpénicas acíclicas tales como, por ejemplo, geranial; neral; citronelal; 7-hidroxi-3,7-dimetiloctanal; 7-metoxi-3,7-dimetiloctanal; 2,6,10-trimetil-9-undecenal; acetona de geraniol; así como los dimetil- y dietilacetales de geranial, neral, 7-hidroxi-3,7-dimetiloctanal; los alcoholes terpénicos cíclicos tales como, por ejemplo, mentol; isopulegol; alfa-terpineol; terpin-4-ol; mentan-8-ol; mentan-1-ol; mentan-7-ol; borneol; isoborneol; óxido de linalol; nopol; cedrol; ambrinol; vetiverol guajol; y los formiatos, acetatos, propionatos, isobutiratos, butiratos, isovaleratos, pentanoatos, hexanoatos, crotonatos, tiglinatos y 3-metil-2-butenos de los mismos;
- 30 los aldehídos y cetonas terpénicas cíclicas tales como, por ejemplo, mentona; isomentona; 8-mercaptomentana-3-ona; carvona; alcanfor; fencona; alfa-ionona; beta-ionona; alfa-n-metilionona; beta-n-metilionona; alfa-isometilionona; beta-isometilionona; alfa-irona; alfa-damascona; beta-damascona; beta-damascenona; delta-damascona; gamma-damascona; 1-(2,4,4-trimetil-2-ciclohexen-1-il)-2-buten-1-ona; 1,3,4,6,7,8a-hexahidro-1,1,5,5-tetrametil-2H-2,4a-metano-naftalen-8(5H)-ona; 2-metil-4-(2,6,6-trimetil-1-ciclohexen-1-il)-2-butenal;
- 40 nootkatona; dihidronootkatona; 4,6,8-megaestigmatrien-3-ona; alfa-sinensal; beta-sinensal; aceite de madera de cedro acetilado (metil cedril cetona);
- los alcoholes cíclicos tales como, por ejemplo, 4-terc-butilciclohexanol; 3,3,5-trimetilciclohexanol; e13-isocanfliciclohexanol; 2,6,9-trimetil-Z2,Z5,E9-ciclododecatrien-1-ol; 2-isobutil-4-metiltetrahydro-2H-piran-4-ol;
- 45 los alcoholes cicloalifáticos tales como, por ejemplo, alfa-3,3-trimetilciclohexilmetanol; 1-(4-isopropilciclohexil)etanol; 2-metil-4-(2,2,3-trimetil-3-ciclopent-1-il)butanol; 2-metil-4-(2,2,3-trimetil-3-ciclopent-1-il)-2-buten-1-ol; 2-etil-4-(2,2,3-trimetil-3-ciclopent-1-il)-2-buten-1-ol 3-metil-5-(2,2,3-trimetil-3-ciclopent-1-il)pentan-2-ol; 3-metil-5-(2,2,3-trimetil-3-ciclopent-1-il)-4-penten-2-ol; 3,3-dimetil-5-(2,2,3-trimetil-3-ciclopent-1-il)-4-penten-2-ol; 1-(2,2,6-trimetilciclohexil)pentan-3-ol; 1-(2,2,6-trimetilciclohexil)hexan-3-ol;
- 50 los éteres cíclicos y cicloalifáticos tales como, por ejemplo, cineol; éter metílico de cedrilo; éter metílico de ciclododecilo; 1,1-dimetoxiciclododecano; (etoximetoxi)ciclododecano; epóxido de alfa-cedreno; 3a,6,6,9a-tetrametildodecahidronafto[2,1-b]furano; 3a-etil-6,6,9a-trimetildodecahidronafto[2,1-b]furano; 1,5,9-trimetil-13-oxabicyclo-[10.1.0]trideca-4,8-dieno; óxido de rosa; 2-(2,4-dimetil-3-ciclohexen-1-il)-5-metil-5-(1-metilpropil)-1,3-dioxano;
- 55 las cetonas cíclicas y macrocíclicas tales como, por ejemplo, 4-terc-butilciclohexanona; 2,2,5-trimetil-5-pentilciclopentanona; 2-heptilciclopentanona; 2-pentilciclopentanona; 2-hidroxi-3-metil-2-ciclopenten-1-ona; 3-metil-cis-2-penten-1-il-2-ciclopenten-1-ona; 3-metil-2-pentil-2-ciclopenten-1-ona; 3-metil-4-ciclopentadecenona; 3-metil-5-ciclopentadecenona; 3-metilciclopentadecanona; 4-(1-etoxivinil)-3,3,5,5-tetrametilciclohexanona; 4-terc-

- pentilciclohexanona; 5-ciclohexadecen-1-ona; 6,7-dihidro-1,1,2,3,3-pentametil-4(5H)-indanona; 8-ciclohexadecen-1-ona; 7-ciclohexadecen-1-ona; (7/8)-ciclohexadecen-1-ona; 9-cicloheptadecen-1-ona; ciclopentadecanona; ciclohexadecanona;
- 5 los aldehídos cicloalifáticos tales como, por ejemplo, 2,4-dimetil-3-ciclohexencarbaldehído; 2-metil-4-(2,2,6-trimetilciclohexen-1-il)-2-butenal; 4-(4-hidroxi-4-metilpentil)-3-ciclohexencarbaldehído; 4-(4-metil-3-penten-1-il)-3-ciclohexencarbaldehído;
- 10 las cetonas cicloalifáticas tales como, por ejemplo, 1-(3,3-dimetilciclohexil)-4-penten-1-ona; 2,2-dimetil-1-(2,4-dimetil-3-ciclohexen-1-il)-1-propanona; 1-(5,5-dimetil-1-ciclohexen-1-il)-4-penten-1-ona; 2,3,8,8-tetrametil-1,2,3,3,4,5,6,7,8-octahidro-2-naftalenil cetona; metil 2,6,10-trimetil-2,5,9-ciclododecatrienil cetona; terc-butil (2,4-dimetil-3-ciclohexen-1-il) cetona;
- 15 los ésteres de alcoholes cíclicos tales como, por ejemplo, acetato de 2-terc-butilciclohexilo; acetato de 4-terc-butilciclohexilo; acetato de 2-terc-pentilciclohexilo; acetato de 4-terc-pentilciclohexilo; acetato de 3,3,5-trimetilciclohexilo; acetato de decahidro-2-naftilo; crotonato de 2-ciclopentilo; acetato de 3-pentiltetrahidro-2H-piran-4-ilo; acetato de decahidro-2,5,5,8a-tetrametil-2-naftilo; acetato de 4,7-metano-3a,4,5,6,7a-hexahidro-5 o 6-indenilo; propionato de 4,7-metano-3a,4,5,6,7,7a-hexahidro-5 o 6-indenilo; isobutirato de 4,7-metano-3a,4,5,6,7a-hexahidro-5 o 6-indenilo; acetato de 4,7-metanooctahidro-5 o 6-indenilo;
- los ésteres de alcoholes cicloalifáticos tales como, por ejemplo, crotonato de 1-ciclohexiletilo;
- 20 los ésteres de ácidos carboxílicos cicloalifáticos tales como, por ejemplo, 3-ciclohexilpropionato de alilo; ciclohexiloxiacetato de alilo; dihidrojasmonato cis- y trans-metilo; jasmonato de cis- y trans-metilo; 2-hexil-3-oxociclopentancarboxilato de metilo; 2-etil-6,6-dimetil-2-ciclohexencarboxilato de etilo; 2,3,6,6-tetrametil-2-ciclohexencarboxilato de etilo; 2-metil-1,3-dioxolan-2-acetato de etilo;
- 25 los alcoholes aralifáticos tales como, por ejemplo, alcohol bencílico; alcohol 1-feniletílico, alcohol 2-feniletílico, 3-fenilpropanol; 2-fenilpropanol; 2-fenoxietanol; 2,2-dimetil-3-fenilpropanol; 2,2-dimetil-3-(3-metilfenil)propanol; alcohol 1,1-dimetil-2-feniletílico 1,1-dimetil-3-fenilpropanol; 1-etil-1-metil-3-fenilpropanol; 2-metil-5-fenilpentanol; 3-metil-5-fenilpentanol; 3-fenil-2-propen-1-ol; alcohol 4-metoxibencílico; 1-(4-isopropilfenil)etanol;
- 30 los ésteres de alcoholes aralifáticos y de ácidos carboxílicos alifáticos tales como, por ejemplo, acetato de bencilo; propionato de bencilo; isobutirato de bencilo; isovalerato de bencilo; acetato de 2-feniletilo; propionato de 2-feniletilo; isobutirato de 2-feniletilo; isovalerato de 2-feniletilo; acetato de 1-feniletilo; acetato de alfa-triclorometilbencilo; acetato de alfa,alfa-dimetilfeniletilo; butirato de alfa,alfa-dimetilfeniletilo; acetato de cinamilo; isobutirato de 2-fenoxietilo; acetato de 4-metoxibencilo;
- 35 los éteres aralifáticos tales como, por ejemplo, 2-feniletil metil éter; 2-feniletil isoamil éter; 2-feniletil 1-etoxietil éter; fenilacetaldehído dimetil acetal; fenilacetaldehído dietil acetal; hidratopaaldehído dimetil acetal; fenilacetaldehído glicerol acetal; 2,4,6-trimetil-4-fenil-1,3-dioxano; 4,4a,5,9b-tetrahidroindeno[1,2-d]-m-dioxina; 4,4a,5,9b-tetrahidro-2,4-dimetilindeno[1,2-d]-m-dioxina;
- 40 los aldehídos aromáticos y aralifáticos tales como, por ejemplo, benzaldehído; fenilacetaldehído; 3-fenilpropanal; hidratopaaldehído; 4-metilbenzaldehído; 4-metilfenilacetaldehído; 3-(4-etilfenil)-2,2-dimetilpropanal; 2-metil-3-(4-isopropilfenil)propanal; 2-metil-3-(4-terc-butilfenil)propanal; 2-metil-3-(4-isobutilfenil)propanal; 3-(4-terc-butilfenil)propanal; cinamaldehído; alfa-butilcinamaldehído; alfa-amilcinamaldehído; alfa-hexilcinamaldehído; 3-metil-5-fenilpentanal; 4-metoxibenzaldehído; 4-hidroxi-3-metoxibenzaldehído; 4-hidroxi-3-etoxibenzaldehído; 3,4-metilendioxibenzaldehído; 3,4-dimetoxibenzaldehído; 2-metil-3-(4-metoxifenil)propanal; 2-metil-3-(4-metilendioxifenil)propanal;
- 45 las cetonas aromáticas y aralifáticas tales como, por ejemplo, acetofenona; 4-metilacetofenona; 4-metoxiacetofenona; 4-terc-butil-2,6-dimetilacetofenona; 4-fenil-2-butanona; 4-(4-hidroxifenil)-2-butanona; 1-(2-naftalenil)etanona; 2-benzofuraniletanona; (3-metil-2-benzofuranil)etanona; benzofenona; 1,1,2,3,3,6-hexametil-5-indanil metil cetona; 6-terc-butil-1,1-dimetil-4-indanil metil cetona; 1-[2,3-dihidro-1,1,2,6-tetrametil-3-(1-metiletil)-1H-5-indenil]etanona; 5',6',7',8'-tetrahidro-3',5',5',6',8',8'-hexametil-2-acetonaftona;
- 50 los ácidos carboxílicos aromáticos y aralifáticos y sus ésteres, tales como por ejemplo, ácido benzoico; ácido fenilacético; benzoato de metilo; benzoato de etilo; benzoato de hexilo; benzoato de bencilo; fenilacetato de metilo; fenilacetato de etilo; fenilacetato de geranilo; fenilacetato de fenilo; cinamato de metilo; cinamato de etilo; cinamato de bencilo; cinamato de feniletilo; cinamato de cinamilo; fenoxiacetato de alilo; salicilato de metilo; salicilato de isoamilo; salicilato de hexilo; salicilato de ciclohexilo; salicilato de cis-3-hexenilo; salicilato de bencilo; salicilato de feniletilo; 2,4-dihidroxi-3,6-dimetilbenzoato de metilo; 3-fenilglicidato de etilo; 3-metil-3-fenilglicidato de etilo;
- 55 los compuestos aromáticos que contienen nitrógeno tales como, por ejemplo, 2,4,6-trinitro-1,3-dimetil-5-terc-butilbenceno; 3,5-dinitro-2,6-dimetil-4-terc-butilacetofenona; cinamonitrilo; 3-metil-5-fenil-2-pentenitrilo; 3-metil-5-fenilpentanonitrilo; antranilato de metilo; metil-N-metil-antranilato; bases de Schiff de antranilato de metilo con 7-hidroxi-3,7-dimetiloctanal, 2-metil-3-(4-terc-butilfenil)propanal o 2,4-dimetil-3-ciclohexencarbaldehído; 6-

isopropilquinolina; 6-isobutilquinolina; 6-sec-butilquinolina; 2-(3-fenilpropil)piridina; indol; escatol; 2-metoxi-3-isopropilpirazina; 2-isobutil-3-metoxipirazina;

5 los fenoles, éteres de fenilo y ésteres de fenilo tales como, por ejemplo, estragol; anetol; eugenol; eugenil metil éter; isoeugenol; isoeugenil metil éter; timol; carvacrol; difenil éter; beta-naftil metil éter; beta-naftil etil éter; beta-naftil isobutil éter; 1,4-dimetoxibenceno; acetato de eugenilo; 2-metoxi-4-metilfenol; 2-etoxi-5-(1-propenil)fenol; fenilacetato de p-cresilo;

los compuestos heterocíclicos tales como, por ejemplo, 2,5-dimetil-4-hidroxi-2H-furan-3-ona; 2-etil-4-hidroxi-5-metil-2H-furan-3-ona; 3-hidroxi-2-metil-4H-piran-4-ona; 2-etil-3-hidroxi-4H-piran-4-ona;

10 las lactonas tales como, por ejemplo, 1,4-octanolida; 3-metil-1,4-octanolida; 1,4-nonanolida; 1,4-decanolida; 8-decen-1,4-olida; 1,4-undecanolida; 1,4-dodecanolida; 1,5-decanolida; 4-metil-1,4-decanolida; 1,15-pentadecanolida; cis- y trans-11-pentadecen-1,15-olida cis- y trans-12-pentadecen-1,15-olida; 1,16-hexadecanolida; 9-hexadecen-1,16-olida; 10-oxa-1,16-hexadecanolida; 11-oxa-1,16-hexadecanolida; 12-oxa-1,16-hexadecanolida; 1,12-dodecanodioato de etileno; 1,13-tridecanodioato de etileno; cumarina; 2,3-dihidrocumarina; octahidrocumarina.

15 En una realización preferente, el al menos un portador químico no aromático (ii) se selecciona del grupo que consiste en tensioactivos, componentes oleosos, antioxidantes, agentes desodorantes activos y disolventes.

En el contexto de la presente invención reivindicada, un "disolvente" sirve para la dilución del compuesto de la fórmula (I) que se va a usar de acuerdo con la invención y/o cualquier componente adicional de la composición sin tener su propio aroma.

20 La cantidad de disolvente/s se selecciona en función de la composición.

En otra realización preferente más, el disolvente se selecciona del grupo que consiste en etanol, isopropanol, dietilenglicol monoetil éter, glicerol, propilenglicol, 1,2-butilenglicol, dipropilenglicol, citrato de trietilo, miristato de isopropilo y cualquier mezcla de dos o más de los disolventes mencionados anteriormente.

25 En otra realización preferente, el disolvente está presente en la composición en una cantidad total de 0,01% en peso a 99,0% en peso, más preferentemente en una cantidad total de 0,05% en peso a 95,0% en peso, aún más preferentemente en una cantidad total de 0,1% en peso a 80,0% en peso, más preferentemente de 0,1% en peso a 70,0% en peso, particularmente en una cantidad total de 0,1% en peso a 60,0% en peso, en base al peso total de la composición.

30 En otra realización preferente de la invención, la composición comprende de 0,05 al 10% en peso, más preferentemente de 0,1 al 5% en peso, aún más preferentemente de 0,2 a 3% en peso, en base al peso total de la composición. En otra realización preferente de la invención, la composición comprende de 20 a 70% en peso, más preferentemente de 25 a 50% en peso de disolventes totales, en base al peso total de la composición.

Una realización de la invención está dirigida a una composición que comprende el compuesto de la fórmula (I) y al menos un componente de aceite.

35 En una realización preferente, los componentes de aceite totales están presentes en una cantidad total de 0,1 a 80% en peso, más preferentemente de 0,5 a 70% en peso, aún más preferentemente de 1 a 60% en peso, incluso aún más preferentemente de 1 a 50% en peso, en concreto de 1 a 40% en peso, más en concreto de 5 a 25% en peso y específicamente de 5 a 15% en peso, en base al peso total de la composición.

40 Los componentes de aceite se pueden seleccionar, por ejemplo, de alcoholes de Guerbet basados en alcoholes grasos que contienen de 6 a 18, preferentemente de 8 a 10 átomos de carbono y otros ésteres, tales como miristato de miristilo, palmitato de miristilo, estearato de miristilo, isoestearato de miristilo, oleato de miristilo, behenato de miristilo, erucato de miristilo, miristato de cetilo, palmitato de cetilo, estearato de cetilo, isoestearato de cetilo, oleato de cetilo, behenato de cetilo, erucato de cetilo, miristato de estearilo, palmitato de estearilo, estearato de estearilo, oleato de estearilo, behenato de estearilo, erucato de estearilo, miristato de isoestearilo, palmitato de isoestearilo, estearato de isoestearilo, oleato de isoestearilo, behenato de isoestearilo, oleato de isoestearilo, miristato de oleilo, palmitato de oleilo, estearato de oleilo, isoestearato de oleilo, oleato de oleilo, behenato de oleilo, erucato de oleilo, miristato de behenilo, palmitato de behenilo, estearato de behenilo, isoestearato de behenilo, oleato de behenilo, behenato de behenilo, erucato de behenilo, miristato de erucilo, palmitato de erucilo, estearato de erucilo, isoestearato de erucilo, oleato de erucilo, behenato de erucilo y erucato de erucilo. También son adecuados los ésteres de ácidos (alquil C₁₈-C₃₈)-hidroxicarboxílicos con alcoholes grasos lineales o ramificados C₆-C₂₂, más especialmente malato de dioctilo, los ésteres de ácidos grasos lineales y/o ramificados con alcoholes polihidroxílicos (por ejemplo, propilenglicol, dial dímero o triol trímero), los triglicéridos a base de ácidos grasos C₆-C₁₀, mezclas líquidas de mono-, di- y triglicéridos a base de ácidos grasos C₆-C₁₈, ésteres de alcoholes grasos C₆-C₂₂ y/o de alcoholes de Guerbet con ácidos carboxílicos aromáticos, más concretamente con el ácido benzoico, ésteres de ácidos dicarboxílicos con polioles que contengan de 2 a 10 átomos de carbono y de 2 a 6 grupos hidroxilo, aceites vegetales, alcoholes primarios ramificados, ciclohexanos sustituidos, carbonatos de alcoholes grasos lineales y ramificados C₆-C₂₂ tales como, por ejemplo,

55

5 carbonato de dicaprililo (Cetio® CC), carbonatos de Guerbet a base de alcoholes grasos que contengan de 6 a 18, preferentemente de 8 a 10, átomos de carbono, ésteres de ácido benzoico con alcoholes lineales y/o ramificados C₆ a C₂₂ (por ejemplo, Finsolv® TN), éteres dialquílicos lineales o ramificados, simétricos o no, que contengan de 6 a 22 átomos de carbono por grupo alquilo, tales como, por ejemplo, éter de dicaprililo (Cetio® OE), productos de apertura de anillos de ésteres de ácidos grasos epoxidados con polioles e hidrocarburos o mezclas de los mismos.

Se debe entender que los antioxidantes son capaces de inhibir o prevenir los cambios no deseados en las composiciones a proteger causados por los efectos del oxígeno y otros procesos oxidativos. El efecto de los antioxidantes consiste, en la mayoría de los casos, en que actúan como eliminadores de los radicales libres que surgen durante la autooxidación.

10 En una realización preferente, el antioxidante se selecciona del grupo que consiste en:

- aminoácidos (por ejemplo, glicina, alanina, arginina, serina, treonina, histidina, tirosina, triptófano) y derivados de los mismos,
- imidazoles (por ejemplo, ácido urocánico) y derivados de los mismos,
- péptidos, tales como D,L-carnosina, D-carnosina, L-carnosina (= β -alanil-L-histidina) y derivados de los mismos,
- 15 • carotenoides, carotenos (por ejemplo, alfa-caroteno, beta-caroteno, licopeno, luteína) o derivados de los mismos,
- ácido clorogénico y derivados del mismo,
- ácido lipoico y derivados del mismo (por ejemplo, el ácido dihidrolipoico),
- aurotioglucosa, propiltiouracilo y otros tioles (por ejemplo, tioredoxina, glutatión, cisteína, cistina, cistamina y sus ésteres de glicosilo, N-acetilo, metílicos, etílicos, propílicos, amílicos, butílicos y laurílicos, palmitoílicos, oleílicos, gamma-linoleílicos, colesterílicos y glicerílicos de los mismos) y sales de los mismos,
- 20 • tiodipropionato de dilaurilo, tiodipropionato de diestearilo, ácido tiodipropiónico y derivados de los mismos (ésteres, éteres, péptidos, lípidos, nucleótidos, nucleósidos y sales),
- compuestos de sulfoximina (por ejemplo, butionina sulfoximina, homocisteína sulfoximina, butionina sulfona, penta-, hexa-, heptationina sulfoximina),
- 25 • agentes quelantes (de metales) (por ejemplo, alfa-hidroxiácidos, ácido palmítico, ácido fítico, lactoferrina),
- alfa-hidroxiácidos (por ejemplo, ácido cítrico, ácido láctico, ácido málico),
- ácido húmico, ácido biliar, extractos biliares, bilirrubina, biliverdina, boldina (= alcaloide de la planta *Peumus boldus*, extracto de boldo),
- EDTA, EGTA y derivados de los mismos,
- 30 • ácidos grasos insaturados y derivados de los mismos (por ejemplo, ácido gamma-linolénico, ácido linoleico, ácido oleico),
- ácido fólico y derivados del mismo,
- ubiquinona y ubiquinol y derivados de los mismos,
- vitamina C y derivados (por ejemplo, palmitato de ascorbilo, fosfato de ascorbilo Mg, acetato de ascorbilo),
- 35 • tocoferoles y derivados (por ejemplo, acetato de vitamina E),
- vitamina A y derivados (por ejemplo, palmitato de vitamina A),
- benzoato de coniferilo de la goma benzoína, ácido rutico y derivados de los mismos, alfa-glicosilrutina, ácido ferúlico, furfuralidenglucitol,
- butilhidroxitolueno (BHT), butilhidroxianisol (BHA),
- 40 • ácido nordihidroguaiácico, ácido nordihidroguayarético, trihidroxibutirofenona, ácido úrico y derivados de los mismos, manosa y derivados de los mismos,
- superóxido dismutasa,
- cinc y derivados del mismo (por ejemplo, ZnO, ZnSO₄),
- selenio y derivado del mismo (por ejemplo, selenometionina) y
- 45 • estilbenos y derivados de los mismos (por ejemplo, óxido de estilbeno, óxido de trans-estilbeno) y mezclas de dos o más de los mencionados anteriormente.

En una realización preferente, el antioxidante se selecciona del grupo que consiste en pentaeritrito, hidroxicinamato de tetra-di-t-butilo, ácido nordihidroguayárico, ácido ferúlico, resveratrol, galato de propilo, butilhidroxitolueno (BHT), butilhidroxianisol (BHA), palmitato de ascorbilo, tocoferol y mezclas de dos o más de los mencionados anteriormente.

50 En otra realización preferida más, las composiciones de acuerdo con la presente invención reivindicada pueden comprender los antioxidantes en una cantidad total de 0,001 a 25% en peso, preferentemente de 0,005 a 10% en peso, más preferentemente de 0,01 a 8% en peso, aún más preferentemente de 0,025 a 7% en peso, incluso más preferentemente de 0,05 a 5% en peso, en base al peso total de la composición.

55 Las composiciones desodorantes (desodorantes y antitranspirantes) contrarrestan, enmascaran o eliminan los olores corporales. Los olores corporales se forman a través de la acción de las bacterias de la piel sobre la transpiración apocrina que da lugar a la formación de productos de degradación de olor desagradable.

Otra realización de la invención se dirige, por lo tanto, a una composición que comprende el compuesto de la fórmula (I) y al menos un agente desodorante activo. En una realización preferente, el agente desodorante activo se selecciona de los grupos que consisten en antitranspirantes, inhibidores de esterasas y agentes antibacterianos.

5 Los antitranspirantes adecuados se seleccionan del grupo que consiste en sales de aluminio, circonio o cinc. Algunos ejemplos son el cloruro de aluminio, el clorhidrato de aluminio, el diclorhidrato de aluminio, el sesquiclorhidrato de aluminio y los compuestos complejos de los mismos, por ejemplo, con 1,2-propilenglicol, el hidroxialantoinato de aluminio, el tartrato de cloruro de aluminio, el triclorhidrato de aluminio y circonio, el tetraclorhidrato de aluminio y circonio, el pentaclorhidrato de aluminio y compuestos complejos de los mismos, por ejemplo, con aminoácidos, tales como la glicina. Se usan preferentemente el clorhidrato de aluminio, el tetraclorhidrato de aluminio y circonio, el pentaclorhidrato de aluminio y circonio y compuestos complejos de los mismos.

En una realización preferente, el antitranspirante se selecciona del grupo que consiste en cloruro de aluminio, clorhidrato de aluminio, diclorhidrato de aluminio, sesquiclorhidrato de aluminio, hidroxialantoinato de aluminio, tartrato de cloruro de aluminio, triclorhidrato de circonio y aluminio, tetraclorhidrato de circonio y aluminio, pentaclorhidrato de circonio y mezclas de dos o más de los mencionados anteriormente.

15 Cuando la transpiración está presente en la región de la axila, las bacterias forman enzimas extracelulares esterasas, principalmente proteasas y/o lipasas y dividen los ésteres presentes en la transpiración, lo cual libera olores en el proceso. Los inhibidores de esterasas adecuados son, por ejemplo, los citratos de trialquilo, tales como el citrato de trimetilo, el citrato de tripropilo, el citrato de tributo y, en concreto, el citrato de tritilo. Los inhibidores de esterasas inhiben la actividad enzimática y, por lo tanto, reducen la formación de olores. El ácido libre se libera probablemente por la escisión del éster del ácido cítrico y reduce el valor del pH de la piel hasta tal punto que las enzimas se inactivan por acilación. Otros inhibidores de esterasas son los sulfatos o fosfatos de esteroides, tales como, por ejemplo, lanosterol, colesterol, campesterol, estigmasterol y sulfato o fosfato de sitosterol, los ácidos dicarboxílicos y sus ésteres, por ejemplo, ácido glutárico, éster monoetilico del ácido glutárico, éster dietílico del ácido glutárico, ácido adípico, éster monoetilico del ácido adípico, éster dietílico del ácido adípico, ácido malónico y éster dietético del ácido malónico, ácidos hidroxicarboxílicos y sus ésteres, por ejemplo, ácido cítrico, ácido málico, ácido tartárico o éster dietílico del ácido tartárico, y glicinato de cinc.

En una realización preferente, el inhibidor de esterasas se selecciona del grupo que consiste en citrato de trimetilo, citrato de tripropilo, citrato de triisopropilo, citrato de tributilo, citrato de trietilo, lanosterol, colesterol, campesterol, estigmasterol, sulfato de sitoesterol, fosfato de sitoesterol, ácido glutárico, éster monoetilico del ácido glutárico, éster dietílico del ácido glutárico, ácido adípico, éster monoetilico del ácido adípico, éster dietílico del ácido adípico, ácido malónico, éster dietílico del ácido malónico, ácido cítrico, ácido málico, ácido tartárico, éster dietílico del ácido tartárico, glicinato de cinc y mezclas de dos o más de los mencionados anteriormente.

Las composiciones de acuerdo con la presente invención reivindicada comprende el inhibidor de esterasas en el intervalo de 0,01 a 20%, preferentemente de 0,1 a 10% y más particularmente de 0,5 a 5% en peso, en base al peso total de la composición.

El término "agentes antibacterianos", como se usa en la presente memoria, abarca las sustancias que tienen propiedades bactericidas y/o bacteriostáticas. Normalmente, estas sustancias actúan contra las bacterias grampositivas tales como, por ejemplo, ácido 4-hidroxibenzoico y sales y ésteres del mismo, N-(4-clorofenil)-N'-(3,4-diclorofenil)urea, 2,4,4'-tricloro-2'-hidroxidifeniléter (triclosán), 4-cloro-3,5-dimetilfenol, 2,2'-metilen-bis-(6-bromo-4-clorofenol), 3-metil-4-(1-metiletil)-fenol, 2-bencil-4-clorofenol, 3-(4-clorofenoxi)-propan-1,2-diol, carbamato de 3-yodo-2-propinilbutilo, clorhexidina, 3,4,4'-triclorocarbanilida (TTC), fenoxietanol, monocaprato de glicerol, monocaprilato de glicerol, monolaurato de glicerol (GML), monocaprato de diglicerol (DMC), ácido salicílico-N-alquilamidas tales como, por ejemplo, ácido salicílico-n-octilamida o ácido salicílico-n-decilamida.

En una realización preferente, el agente antibacteriano se selecciona del grupo que consiste en quitosano, fenoxietanol, 5-cloro-2-(2,4-diclorofenoxi)-fenol, ácido 4-hidroxibenzoico y sales de los mismos y ésteres, N-(4-clorofenil)-N'-(3,4-diclorofenil)-urea, 2,4,4'-tricloro-2'-hidroxidifeniléter (triclosán), 4-cloro-3,5-dimetilfenol, 2,2'-metilen-bis-(6-bromo-4-clorofenol), 3-metil-4-(1-metiletil)-fenol, 2-bencil-4-clorofenol, 3-(4-clorofenoxi)-propan-1,2-diol, carbamato de 3-yodo-2-propinibutilo, clorhexidina, 3,4,4'-triclorocarbanilida (TTC), fenoxietanol, monocaprato de glicerol, monocaprilato de glicerol, monolaurato de glicerol (GML), monocaprato de diglicerol (DMC), ácido salicílico-N-alquilamidas y mezclas de dos o más de los mencionados anteriormente.

La composición de acuerdo con la presente invención reivindicada comprende los agentes antibacterianos en el intervalo de 0,01 a 5% en peso y preferentemente de 0,1 a 2% en peso, en base al peso total de la composición.

En una realización preferente, la composición preferente comprende un tensioactivo. Debido a la propiedad de fragancia característica del compuesto de la fórmula (I) y a su sustantividad, tenacidad así como estabilidad, se puede usar especialmente para proporcionar un olor, preferentemente una impresión de fragancia o una impresión de aroma a composiciones que contienen tensioactivos tales como, por ejemplo, limpiadores (en particular productos para el cuidado de la ropa y limpiadores multiusos). Se puede usar preferentemente para conferir una impresión odorífera duradera de tipo floral y/o marino y/o verde y/o dulce y/o gomoso y/o de nuez y/o amaderado y/o polvoriento y/o de

raíz y/o de limón a una composición que contenga tensioactivos.

En una realización preferente, el tensioactivo se selecciona del grupo que consiste en tensioactivos aniónicos, no iónicos, catiónicos, anfóteros, bipolares y mezclas de dos o más de los mencionados anteriormente. En otra realización preferente, el tensioactivo es un tensioactivo aniónico.

5 Las composiciones de acuerdo con la presente invención reivindicada de este modo pueden comprender preferentemente al menos un tensioactivo. Los tensioactivos se pueden seleccionar de tensioactivos aniónicos, no iónicos, catiónicos y/o anfóteros o bipolares. Las composiciones que contienen tensioactivos, tales como, por ejemplo, geles de ducha, baños de espuma, champús, etc., contienen preferentemente al menos un tensioactivo aniónico.

10 Las composiciones de acuerdo con la invención suelen contener los tensioactivos, en el agregado, en una cantidad de 0 a 40% en peso, preferentemente de 0 a 20% en peso, más preferentemente de 0,1 a 15% en peso, y en concreto de 0,1 a 10% en peso, en base al peso total de la composición. Los ejemplos típicos de tensioactivos no iónicos son éteres poliglicólicos de alcoholes grasos, éteres poliglicólicos de alquilfenoles, ésteres poliglicólicos de ácidos grasos, éteres poliglicólicos de amidas de ácidos grasos, éteres poliglicólicos de aminas grasas, triglicéridos alcoxilados, éteres mixtos y formales mixtos, opcionalmente, oligoglucósidos de alqu(en)ilo o derivados del ácido glucurónico
15 parcialmente oxidados, glucamidas de ácido graso-N-alquilo, hidrolizados de proteínas (en concreto, productos vegetales a base de trigo), ésteres de ácidos grasos de polioli, ésteres de azúcar, ésteres de sorbitán, polisorbatos y óxidos de amina. Si los tensioactivos no iónicos contienen cadenas de éteres de poliglicol, pueden tener una distribución homóloga convencional, aunque es preferente que tengan una distribución homóloga de amplitud estrecha.

20 Los tensioactivos bipolares son compuestos tensioactivos que contienen al menos un grupo de amonio cuaternario y al menos un grupo -COO(-) o -SO₃(-) en la molécula.

Los tensioactivos bipolares particularmente adecuados son las denominadas betaínas, tales como los glicinatos de N-alquil-N,N-dimetilamonio, por ejemplo, glicinato de cocoalquildimetilamonio, glicinatos de N-acilaminopropil-N,N-dimetilamonio, por ejemplo, glicinato de cocoacilaminopropildimetilamonio, y 2-alquil-3-carboximetil-3-hidroxietyl imidazolininas, que contienen de 8 a 18 átomos de carbono en el grupo alquilo o acilo, y glicinato de cocoacilaminoethylhidroxietilcarboximetilo. El derivado de amida de ácido graso conocido con el nombre CTFA de Betaína de Cocamidopropilo es particularmente preferente.
25

Los tensioactivos anfólicos también son adecuados, especialmente como cotensioactivos. Los tensioactivos anfólicos son compuestos tensioactivos que, además de un grupo alquilo o acilo de C₈ a C₁₈, contienen al menos un grupo amino libre y al menos un grupo -COOH- o -SO₃H- en la molécula y son capaces de formar sales internas. Los ejemplos de tensioactivos anfólicos adecuados son las N-alquiliglicinas, los ácidos N-alquilpropiónicos, los ácidos N-alquilaminobutíricos, los ácidos N-alquiliminodipropiónicos, las N-hidroxietyl-N-alquilamidopropilglicinas, las N-alquiltaurinas, las N-alquilsarcosinas, los ácidos 2-alquilaminopropiónicos y los ácidos alquilaminoacéticos que contienen entre 8 y 18 átomos de carbono en el grupo alquilo. Los tensioactivos anfólicos preferentes son el N-cocoalquilaminopropionato, el aminopropionato de cocoacilaminoetil y la acilsarcosina.
30
35

Los tensioactivos aniónicos se caracterizan por tener un grupo aniónico hidrosoluble tales como, por ejemplo, un grupo carboxilato, sulfato, sulfonato o fosfato y un grupo lipofílico. Los tensioactivos aniónicos dermatológicamente seguros son conocidos por el profesional en gran número por los libros de texto pertinentes y están disponibles en el mercado. Se trata, en particular, de sulfatos de alquilo en forma de sus sales de metal alcalino, de amonio o de alcanolamonio, sulfatos de alquiléteres, carboxilatos de alquiléteres, isetionatos de acilo, sarcosinatos de acilo, taurinas de acilo que contienen grupos lineales de alquilo o acilo C₁₂-C₁₈ y sulfosuccinatos y glutamatos de acilo en forma de sus sales de metal alcalino o de amonio.
40

Los tensioactivos catiónicos particularmente adecuados son compuestos de amonio cuaternario, preferentemente haluros de amonio, más especialmente cloruros y bromuros, tales como cloruros de alquiltrimetilamonio, cloruros de dialquildimetilamonio y cloruros de trialquilmetilamonio, por ejemplo, cloruro de cetiltrimetilamonio, cloruro de esteariltrimetilamonio, cloruro de diesteariltrimetilamonio, cloruro de lauriltrimetilamonio, cloruro de laurildimetilbencilamonio y cloruro de tricetiltrimetilamonio. Además, los compuestos de éster cuaternario fácilmente biodegradables, tales como, por ejemplo, los metosulfatos de dialquilamonio y los metosulfatos de metilhidroxialquildialcooilalquilamonio comercializados con el nombre de Stepantex y los productos correspondientes de la serie Dehyquart[®], se pueden usar como tensioactivos catiónicos. Por "ésterquats" se entienden generalmente las sales de ésteres de trietanolamina de ácidos grasos cuaternizados. Pueden aportar a las composiciones una suavidad concreta. Son sustancias conocidas que se preparan por medio los procedimientos pertinentes de la química orgánica. Otros tensioactivos catiónicos adecuados para su uso de acuerdo con la invención son los hidrolizados proteicos cuaternizados.
45
50

55 Una realización de la presente invención reivindicada se dirige a una composición que se selecciona del grupo que consiste en composiciones de perfume, composiciones para el cuidado del cuerpo, artículos de higiene, composiciones de limpieza, composiciones de detergentes textiles, composiciones para dispensadores de aromas, alimentos, complementos alimentarios, composiciones farmacéuticas y composiciones para la protección de cultivos.

Dicha composición preferentemente es una composición química aromática, más preferentemente una composición de fragancia.

5 Las composiciones adecuadas son, por ejemplo, composiciones de perfume, composiciones para el cuidado del cuerpo (que incluyen composiciones cosméticas y productos para la higiene bucal y dental), artículos de higiene, composiciones de limpieza (que incluyen composiciones para lavavajillas), composiciones de detergentes textiles, composiciones para dispensadores de aromas, alimentos, complementos alimentarios, composiciones farmacéuticas y composiciones para la protección de cultivos.

10 Las composiciones de perfume se pueden seleccionar de fragancias finas, ambientadores en forma líquida, en forma de gel o en forma aplicada a un soporte sólido, aerosoles, limpiadores perfumados, velas y aceites de perfume, tales como aceites para lámparas o aceites para masaje.

Los ejemplos de fragancias finas son los extractos de perfume, Eau de Parfums, Eau de Toilettes, Eau de Cologne, Eau de Solide y Extrait Parfum.

15 Las composiciones para el cuidado del cuerpo incluyen composiciones cosméticas y productos para la higiene bucal y dental, y se pueden seleccionar de productos para después del afeitado, productos para antes del afeitado, agua de colonia, jabones sólidos y líquidos, geles de ducha, champús, jabones de afeitado, espumas de afeitado, aceites de baño, emulsiones cosméticas del tipo de aceite en agua, del tipo de agua en aceite y del tipo de agua en aceite en agua, tales como, por ejemplo, cremas y lociones para la piel, cremas y lociones para la cara, cremas y lociones de protección solar, cremas y lociones para después del sol, cremas y lociones para las manos, cremas y lociones para los pies, cremas y lociones para la depilación, cremas y lociones para después del afeitado, cremas y lociones para el bronceado, productos para el cuidado del cabello tales como, por ejemplo, lacas para el cabello, geles para el cabello, lociones fijadoras para el cabello, acondicionadores para el cabello, champú para el cabello, tintes permanentes y semipermanentes para el cabello, composiciones para modelar el cabello, tales como ondas frías y composiciones para alisar el cabello, tónicos para el cabello, cremas y lociones para el cabello, desodorantes y antitranspirantes, tales como, por ejemplo, aerosoles para las axilas, aplicadores con tapón de bola, desodorantes en barra y cremas desodorantes, productos de cosmética decorativa tales como, por ejemplo, delineadores de ojos, sombras de ojos, esmaltes de uñas, maquillajes, barras de labios y rímel, y productos para la higiene bucal y dental, tales como pasta de dientes, hilo dental, enjuague bucal, refrescantes para el aliento, espuma dental, geles dentales y tiras dentales.

20 Los artículos de higiene se pueden seleccionar de entre varillas de incienso, insecticidas, repelentes, propulsores, eliminadores de óxido, toallitas refrescantes perfumadas, almohadillas para las axilas, pañales para bebés, compresas, papel higiénico, toallitas cosméticas, pañuelos de bolsillo, lavavajillas y desodorante.

35 Las composiciones de limpieza, tales como, por ejemplo, los limpiadores para superficies sólidas, se pueden seleccionar de limpiadores perfumados ácidos, alcalinos y neutros, tales como, por ejemplo, limpiadores de suelos, limpiadores de ventanas, detergentes para lavavajillas, tanto para el lavado a mano como a máquina, limpiadores de baños y sanitarios, leche limpiadora, limpiadores de olores sólidos y líquidos, limpiadores de alfombras en polvo y en espuma, ceras y abrillantadores tales como abrillantadores de muebles, ceras para suelos, cremas para zapatos, desinfectantes, desinfectantes de superficies y limpiadores sanitarios, limpiadores de frenos, limpiadores de tuberías, eliminadores de cal, limpiadores de parrillas y hornos, eliminadores de algas y musgo, eliminadores de moho, limpiadores de fachadas.

40 Las composiciones de detergentes textiles se pueden seleccionar de detergentes líquidos, detergentes en polvo, pretratamientos de la ropa tales como blanqueadores, agentes de remojo y quitamanchas, suavizantes para la ropa, jabones de lavado, pastillas de lavado.

Por alimento se entiende una sustancia comestible cruda, cocinada o procesada, hielo, bebida o ingrediente usado o destinado a ser usado en su totalidad o en parte para el consumo humano, o goma de mascar, gominolas, jaleas y productos de repostería.

45 Un complemento alimentario es un producto destinado a la ingestión que contiene un ingrediente dietético destinado a añadir un valor nutricional adicional a la dieta. Un ingrediente dietético puede ser una, o cualquier combinación, de las siguientes sustancias: una vitamina, un mineral, una hierba u otro producto botánico, un aminoácido, una sustancia dietética para que las personas la usen para complementar la dieta por medio del aumento de la ingesta dietética total, un concentrado, un metabolito, un ingrediente o un extracto. Los complementos alimentarios se pueden encontrar en muchas formas, tales como comprimidos, cápsulas, cápsulas blandas, cápsulas de gel, líquidos o polvos.

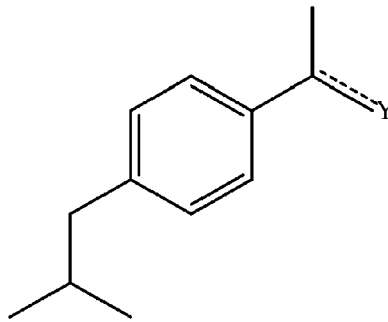
Las composiciones farmacéuticas comprenden composiciones destinadas a ser usadas en el diagnóstico, la cura, la mitigación, el tratamiento o la prevención de enfermedades, así como artículos (diferentes de los alimentos) destinados a afectar a la estructura o a cualquier función del cuerpo del ser humano o de otros animales.

55 Las composiciones para la protección de cultivos comprenden composiciones destinadas a la gestión de enfermedades de las plantas, hierbas adventicias y otras plagas (tanto de vertebrados como de invertebrados) que dañan los cultivos agrícolas y la silvicultura.

En una realización preferente, la composición además comprende al menos un agente auxiliar seleccionado del grupo que consiste en conservantes, abrasivos, agentes antiacné, agentes para combatir el envejecimiento de la piel, agentes anticelulíticos, agentes anticaspa, agentes antiinflamatorios, agentes para prevenir la irritación, agentes para aliviar la irritación, astringentes, agentes inhibidores del sudor, antisépticos, antiestáticos, aglutinantes, tampones, materiales de portador, agentes quelantes, estimulantes celulares, agentes de cuidado, agentes de depilación, emulsionantes, enzimas, aceites esenciales, fibras, formadores de película, fijadores, formadores de espuma, estabilizantes de espuma, sustancias para evitar la formación de espuma, potenciadores de espuma, fungicidas, agentes gelificantes, agentes de formación de gel, agentes para el cuidado del cabello, agentes para dar forma al cabello, agentes para alisar el cabello, agentes donadores de humedad, sustancias hidratantes, sustancias humectantes, agentes blanqueadores, agentes fortalecedores, agentes quitamanchas, abrillantadores ópticos, agentes impregnantes, repelentes de la suciedad, agentes reductores de la fricción, lubricantes, cremas hidratantes, ungüentos, opacificantes, plastificantes, agentes de revestimiento, abrillantadores, agentes de brillo, polímeros, polvos, proteínas, agentes reengrasantes, agentes exfoliantes, siliconas, agentes calmantes de la piel, agentes limpiadores de la piel, agentes para el cuidado de la piel, agentes para la curación de la piel, agentes aclaradores de la piel, agentes protectores de la piel, agentes suavizantes de la piel, agentes refrescantes, agentes refrescantes de la piel, agentes calentadores, agentes calentadores de la piel, estabilizantes, agentes absorbentes de rayos UV, filtros UV, suavizantes de telas, agentes de suspensión, agentes de bronceado de la piel, espesantes, vitaminas, ceras, grasas, fosfolípidos, ácidos grasos saturados, ácidos grasos mono- o poliinsaturados, α -hidroxiácidos, ácidos grasos polihidroxiados, licuantes, tintes, agentes de protección del color, pigmentos, anticorrosivos, polioles, electrolitos y derivados de silicona.

Mezcla

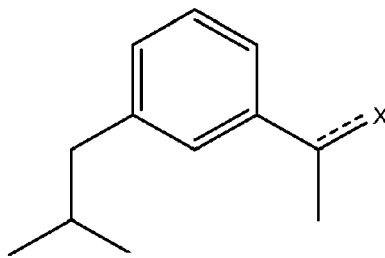
Una realización de la presente invención está dirigida a una mezcla que comprende al menos un compuesto de la fórmula (II),



fórmula (II),

25 en la que

Y se selecciona del grupo que consiste en -O-R₁, -O(C=O)-R₁ y =O;
 R₁ se selecciona del grupo que consiste en alquilo C₁-C₅ lineal o ramificado, no sustituido y cicloalquilo C₃-C₅ no sustituido;
 o su sal o un estereoisómero del mismo;
 30 y
 al menos un compuesto de la fórmula (I)



fórmula (I),

en la que
 X se selecciona del grupo que consiste en -O-R, -O(C=O)-R y =O;
 35 R se selecciona del grupo que consiste en -H, alquilo C₁-C₅ lineal o ramificado, no sustituido y cicloalquilo C₃-C₅ no sustituido;

o su sal o un estereoisómero del mismo.

En una realización preferente de la presente invención, la mezcla comprende compuesto de la fórmula (I) en la que R se selecciona del grupo que consiste en -H, -CH₃, -CH₂CH₃, -CH₂CH₂CH₃, -CH(CH₃)₂, -CH(CH₃)(C₂H₅), -CH₂CH(CH₃)₂, -CH₂CH₂CH₂CH₃, -CH(CH₃)₂, -CH₂CH(CH₃)₂, -CH(CH₃)CH₂CH₃, ciclopropilo y ciclobutilo.

- 5 En otra realización preferente de la presente invención, la mezcla comprende un compuesto de la fórmula (II) en la que R₁ se selecciona del grupo que consiste en -CH₃, -CH₂CH₃, -CH₂CH₂CH₃, -CH(CH₃)₂, -CH(CH₃)(C₂H₅), -CH₂CH(CH₃)₂, -CH₂CH₂CH₂CH₃, -CH(CH₃)₂, -CH₂CH(CH₃)₂, -CH(CH₃)CH₂CH₃ y ciclopropilo.

En otra realización de la presente invención, la mezcla de acuerdo con las realizaciones anteriores se usa para impartir una impresión de aroma a una composición.

- 10 En otra realización de la presente invención, la proporción en peso del compuesto de la fórmula (I) y el compuesto de la fórmula (II) está en el intervalo de 99,9:0,1 a 0,1:99,9, preferentemente de 90:10 a 10:90, más preferentemente de 80:20 a 20: 80.

- 15 En otra realización de la presente invención, la mezcla de acuerdo con las realizaciones anteriores proporciona una impresión aromática que recuerda a una nota agrícola, una nota violeta, una nota de lirio de los valles, una nota dulce, una nota cerosa.

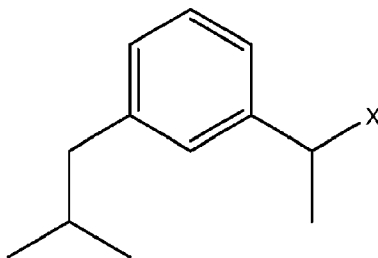
En una realización de la presente invención, las mezclas de los compuestos de la fórmula (I) y la fórmula (II) son particularmente preferentes debido a las impresiones aromáticas reminiscentes impartidas por ellas.

En otra realización de la presente invención, la composición comprende:

- 20 (i) la mezcla de acuerdo con cualquiera de las realizaciones anteriores y
 (ii) al menos un aroma químico diferente de los de la fórmula (I) y la fórmula (II), o
 (iii) al menos un portador químico no aromático, o
 (iv) ambos de (ii) y (iii).

Compuesto

Una realización de la presente invención reivindicada está dirigida a un compuesto de la fórmula (I'),



- 25 fórmula (I'),

en la que

X se selecciona del grupo que consiste en -O-R_a, y -O(C=O)-R_b;

R_a se selecciona del grupo que consiste en alquilo C₂-C₅ lineal o ramificado, no sustituido y cicloalquilo C₃-C₅ no sustituido;

- 30 R_b se selecciona del grupo que consiste en alquilo C₁-C₅ lineal o ramificado, no sustituido y cicloalquilo C₃-C₅ no sustituido

o su sal o un estereoisómero del mismo.

En una realización preferente, X es -O-R_a.

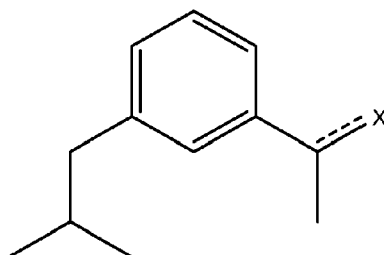
En otra realización preferente, X es -O(C=O)-R_b.

- 35 En una realización preferente, R_a se selecciona del grupo que consiste en -CH₂CH₃, -CH₂CH₂CH₃, -CH(CH₃)₂, -CH(CH₃)(C₂H₅), -CH₂CH(CH₃)₂, -CH₂CH₂CH₂CH₃, -CH(CH₃)₂, -CH₂CH(CH₃)₂, -CH(CH₃)CH₂CH₃, ciclopropilo y ciclobutilo.

- 40 En una realización preferente, R_b se selecciona del grupo que consiste en -CH₃, -CH₂CH₃, -CH₂CH₂CH₃, -CH(CH₃)₂, -CH(CH₃)(C₂H₅), -CH₂CH(CH₃)₂, -CH₂CH₂CH₂CH₃, -CH(CH₃)₂, -CH₂CH(CH₃)₂, -CH(CH₃)CH₂CH₃, ciclopropilo y ciclobutilo.

Realizaciones

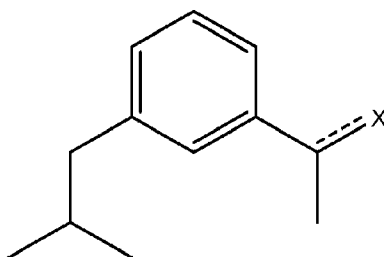
1. Uso de al menos un compuesto de la fórmula (I),



fórmula (I),

en la que

- 5 X se selecciona del grupo que consiste en -O-R, -O(C=O)-R y =O;
R se selecciona del grupo que consiste en -H, alquilo C₁-C₅ lineal o ramificado, no sustituido y cicloalquilo C₃-C₅ no sustituido;
o su sal o un estereoisómero del mismo,
para impartir una impresión de aroma a una composición.
- 10 2. Procedimiento para impartir una impresión de aroma a una composición que comprende al menos la etapa de añadir al menos un compuesto de la fórmula (I),



fórmula (I),

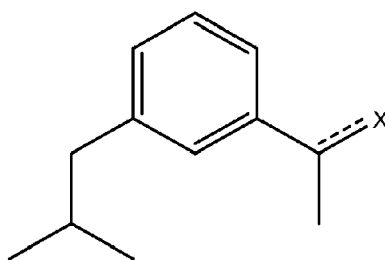
en la que

- 15 X se selecciona del grupo que consiste en -O-R, -O(C=O)-R y =O;
R se selecciona del grupo que consiste en -H, alquilo C₁-C₅ lineal o ramificado, no sustituido y cicloalquilo C₃-C₅ no sustituido;
o su sal o un estereoisómero del mismo,
a la composición.
3. El uso o el procedimiento de acuerdo con cualquiera de las realizaciones 1 a 2, en el que X es -O-R.
- 20 4. El uso o el procedimiento de acuerdo con cualquiera de las realizaciones 1 a 2, en el que X es -O(C=O)-R.
5. El uso o procedimiento de acuerdo con cualquiera de las realizaciones precedentes, en el que R se selecciona del grupo que consiste en -CH₃, -CH₂CH₃, -CH₂CH₂CH₃, -CH(CH₃)₂, -CH(CH₃)(C₂H₅), -CH₂CH(CH₃)₂, -CH₂CH₂CH₂CH₃, -CH(CH₃)₂, -CH₂CH(CH₃)₂, -CH(CH₃)CH₂CH₃, -CH(CH₃)CH₂CH₃, ciclopropilo y ciclobutilo.
- 25 6. El uso o el procedimiento de acuerdo con cualquiera de las realizaciones anteriores, en el que la composición se selecciona del grupo que consiste en composiciones de perfume, composiciones para el cuidado del cuerpo, artículos de higiene, composiciones de limpieza, composiciones de detergentes textiles, composiciones para dispensadores de aromas, alimentos, complementos alimentarios, composiciones farmacéuticas y composiciones para la protección de cultivos.
7. El uso o procedimiento de acuerdo con cualquiera de las realizaciones precedentes, en el que la impresión se

selecciona del grupo que consiste en una nota de zanahoria, una nota de chocolate, una nota de hierbas, una nota cerosa, una nota amaderada, una nota agrícola, una nota de lirio de los valles, una nota acuosa, una nota jabonosa, una nota floral, una nota parecida al pomelo, una nota dulce y una nota de moho.

5 8. El uso o procedimiento de acuerdo con cualquiera de las realizaciones precedentes, en el que el compuesto de la fórmula (I) o sus sales o estereoisómero está presente en una cantidad en el intervalo de $\geq 0,01\%$ en peso a $\leq 70,0\%$ en peso, en base al peso total de la composición.

9. Una composición que comprende al menos un compuesto de la fórmula (I),



fórmula (I),

en la que

10 X se selecciona del grupo que consiste en -O-R, -O(C=O)-R y =O;
R se selecciona del grupo que consiste en -H, alquilo C₁-C₅ lineal o ramificado, no sustituido y cicloalquilo C₃-C₅ no sustituido;
o su sal o un estereoisómero del mismo y

15 (i) al menos una sustancia química aromática diferente de la fórmula (I), o
(ii) al menos un portador químico no aromático, o
(iii) ambos de (i) y (ii).

10. La composición de acuerdo con la realización 9, en la que X es -O-R.

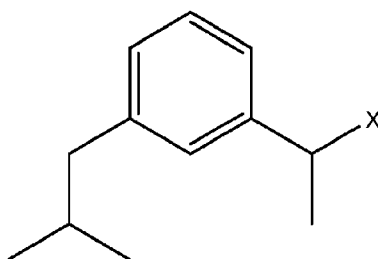
11. La composición de acuerdo con la realización 9, en la que X es -O(C=O)-R.

20 12. La composición de acuerdo con cualquiera de las realizaciones 9 a 11, en la que R se selecciona del grupo que consiste en -H, -CH₃, -CH₂CH₃, -CH₂CH₂CH₃, -CH(CH₃)₂, -CH(CH₃)(C₂H₅), -CH₂CH(CH₃)₂, -CH₂CH₂CH₂CH₃, -CH(CH₃)₂, -CH₂CH(CH₃)₂, -CH(CH₃)CH₂CH₃, ciclopropilo y ciclobutilo.

25 13. La composición de acuerdo con una cualquiera de las realizaciones 9 a 12, en la que el al menos un portador químico no aromático (ii) se selecciona del grupo que consiste en tensioactivos, componentes oleosos, antioxidantes, agentes desodorantes activos, disolventes y mezclas de dos o más de los mencionados anteriormente.

30 14. La composición de acuerdo con cualquiera de las realizaciones anteriores 9 a 13, en la que la composición se selecciona del grupo que consiste en composiciones de perfume, composiciones para el cuidado del cuerpo, artículos de higiene, composiciones de limpieza, composiciones de detergentes textiles, composiciones para dispensadores de aromas, alimentos, complementos alimentarios, composiciones farmacéuticas y composiciones para la protección de cultivos.

15. Un compuesto de la Fórmula (I')



fórmula (I'),

en la que

X se selecciona del grupo que consiste en $-O-R_a$, y $-O(C=O)-R_b$;
 R_a se selecciona del grupo que consiste en alquilo C_2-C_5 lineal o ramificado, no sustituido y cicloalquilo C_3-C_5 no sustituido;
 R_b se selecciona del grupo que consiste en alquilo C_1-C_5 lineal o ramificado, no sustituido y cicloalquilo C_3-C_5 no sustituido
 su sal o un estereoisómero del mismo.

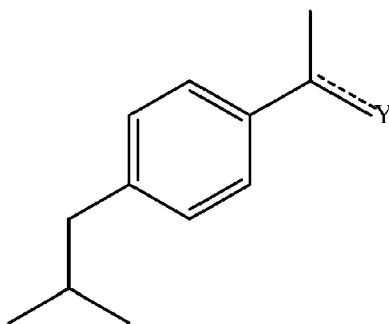
16. El compuesto de acuerdo con la realización 15, en el que X es $-O-R_a$.

17. El compuesto de acuerdo con la realización 15, en el que X es $-O(C=O)-R_b$.

18. El compuesto de acuerdo con una cualquiera de las realizaciones precedentes 15 a 17, en el que R_a se selecciona del grupo que consiste en $-CH_2CH_3$, $-CH_2CH_2CH_3$, $-CH(CH_3)_2$, $-CH(CH_3)(C_2H_5)$, $-CH_2CH(CH_3)_2$, $-CH_2CH_2CH_2CH_3$, $-CH(CH_3)_2$, $-CH_2CH(CH_3)_2$, $-CH(CH_3)CH_2CH_3$, ciclopropilo y ciclobutilo

19. El compuesto de acuerdo con una cualquiera de las realizaciones precedentes 15 a 17, en el que R_b se selecciona del grupo que consiste en $-CH_3$, $-CH_2CH_3$, $-CH_2CH_2CH_3$, $-CH(CH_3)_2$, $-CH(CH_3)(C_2H_5)$, $-CH_2CH(CH_3)_2$, $-CH_2CH_2CH_2CH_3$, $-CH(CH_3)_2$, $-CH_2CH(CH_3)_2$, $-CH(CH_3)CH_2CH_3$, ciclopropilo y ciclobutilo.

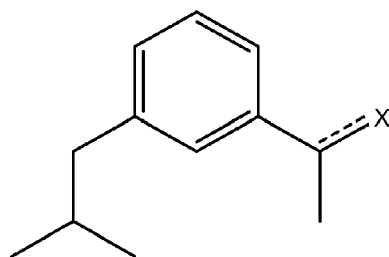
20. Una mezcla que comprende al menos un compuesto de la fórmula (II),



fórmula (II),

en la que

Y se selecciona del grupo que consiste en $-O-R_1$, $-O(C=O)-R_1$ y $=O$;
 R_1 se selecciona del grupo que consiste en alquilo C_1-C_5 lineal o ramificado, no sustituido y cicloalquilo C_3-C_5 no sustituido;
 o su sal o un estereoisómero del mismo;
 y al menos un compuesto de la fórmula (I)



fórmula (I),

en la que

X se selecciona del grupo que consiste en $-O-R$, $-O(C=O)-R$ y $=O$;
 R se selecciona del grupo que consiste en $-H$, alquilo C_1-C_5 lineal o ramificado, no sustituido y cicloalquilo C_3-C_5 no sustituido;
 o su sal o un estereoisómero del mismo.

21. La mezcla de acuerdo con la realización 20, en la que R_1 se selecciona del grupo que consiste en $-CH_3$, $-CH_2CH_3$, $-CH_2CH_2CH_3$, $-CH(CH_3)_2$, $-CH(CH_3)(C_2H_5)$, $-CH_2CH(CH_3)_2$, $-CH_2CH_2CH_2CH_3$, $-CH(CH_3)_2$, $-CH_2CH(CH_3)_2$, $-CH(CH_3)CH_2CH_3$ y ciclopropilo.

22. La mezcla de acuerdo con la realización 20, en la que R se selecciona del grupo que consiste en $-CH_3$, -

CH₂CH₃, -CH₂CH₂CH₃, -CH(CH₃)₂, -CH(CH₃)(C₂H₅), -CH₂CH(CH₃)₂, -CH₂CH₂CH₂CH₃, -CH(CH₃)₂, -CH₂CH(CH₃)₂, -CH(CH₃)CH₂CH₃, ciclopropilo y ciclobutilo.

23. Uso de la mezcla de acuerdo con cualquiera de las realizaciones 20 a 22, para impartir una impresión de aroma a una composición.

5 24. Una composición que comprende:

- (i) la mezcla de acuerdo con cualquiera de las realizaciones 20 a 22, y
- (ii) al menos un aroma químico diferente de los de la fórmula (I) y la fórmula (II), o
- (iii) al menos un portador químico no aromático, o
- (iv) ambos de (i) y (ii).

10 Ejemplos

La presente invención reivindicada se ilustra en detalle por medio de los siguientes ejemplos prácticos no limitativos. Más concretamente, los procedimientos de ensayo que se especifican a continuación forman parte de la divulgación general de la solicitud y no se limitan a los ejemplos de trabajo específicos.

Procedimiento analítico:

15 Los productos se identificaron por RMN de ¹³C. Los espectros RMN de ¹³C se midieron en un espectrómetro Bruker DPX-500

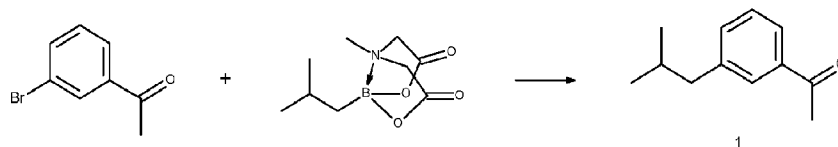
Determinación de la pureza del producto:

La pureza de los productos se determinó por medio del porcentaje de área de la Cromatografía de Gases: Sistema de GC: Agilent 6890N;

20 Columna: DB-WAX: 30 m (longitud), 0,32 mm (diámetro interior), 0,25 micrómetros (espesor de la película); Programa de temperatura: 50 °C a 200 °C a 5 ° / min 17 min de retención a 200 °C, el tiempo total de ejecución: 47 minutos.

Ejemplo 1:

Etapa 1: Síntesis del derivado de acetofenona 1: Preparación de 1-(3-isobutilfenil) etanona



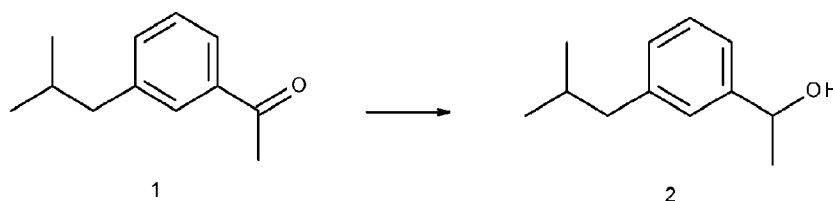
2-*isobutil*-6-*metil*-1,3,6,2-dioxazaborocano-4,8-diona (= éster MIDA del ácido (2-*metilpropil*)borónico, 100%, 20 g, 0,94 mol, 1,1 eq) y complejo diclorometano de 1,1'-bis(difenilfosfino)ferroceno-dicloruro de paladio(II) (PdCl₂(ddpf)·CH₂Cl₂, 100%, 6,98 g, 0,008 mol, 0,1 eq) tetrahidrofurano (85 ml), 3'-bromoacetofenona (100%, 17 g, 0,85 mol, 1 eq.) y agua (17 ml) se añadieron en un recipiente de reacción. Esta mezcla se agitó durante 5 min a temperatura ambiente. A continuación, se añadió a la mezcla carbonato de potasio (70,82 g, 0,512 mol, 6 eq) durante 5 min y se añadió más tetrahidrofurano (30 ml). La mezcla de reacción se agitó durante 32 hs a 65 °C y después se llevó a temperatura ambiente. Se añadieron a la mezcla de reacción *tert*-Butilmetiléter (100 ml) y agua (150 ml) y la mezcla de reacción se agitó durante 25 min más. Se separaron las fases y la fase acuosa se extrajo 2 veces más con *tert*-Butilmetiléter (100 ml cada una). Las fases orgánicas combinadas se secaron sobre sulfato de sodio y, tras la filtración, el disolvente orgánico se eliminó a presión reducida para dar 20 g del producto bruto deseado. Tras cromatografía en columna (ciclohexano: acetato de etilo) se obtuvieron 6,9 g de 1-(3-*isobutilfenil*) etanona como un líquido claro.

Pureza del 99,7 GC-a% en un rendimiento total del 55% tras purificación.

RMN de ¹H (500 MHz, cloroformo-*d*) δ 7,78 (dt, J = 7,0, 1,8 Hz, 1H), 7,75 (s, 1H), 7,42 a 7,33 (m, 2H), 2,61 (s, 3H), 2,54 (d, J = 7,2 Hz, 2H), 1,95 a 1,9 (m, 1H), 0,91 (d, J = 6,6, Hz, 6H).

40 RMN de ¹³C (126 MHz, CDCl₃) δ 198,55, 142,21, 137,02, 133,98, 128,78, 128,30, 125,96, 45,19, 30,22, 26,73, 22,29, 22,28.

Etapa 2: Síntesis del alcohol correspondiente: Preparación de 1-(3-*isobutilfenil*)etanol



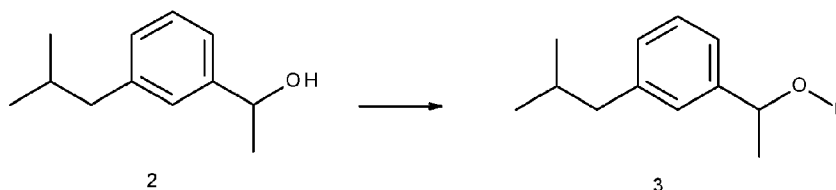
La 1-(3-isobutilfenil) etanona (99,7 GC-a%, 6 g, 34 mmol, 1 eq) obtenida en la etapa 1 y el metanol (42 ml) se agitaron a temperatura ambiente en un recipiente de reacción. Se añadió borohidruro de sodio (1,42 g, 37,5 mmol, 1,1 eq) en porciones durante 5 min. La mezcla de reacción se agitó durante 2 hs a temperatura ambiente. A la mezcla de reacción se añadieron agua (15 ml) y acetato de etilo (30 ml). El disolvente se eliminó a presión reducida y dio lugar a una separación de fases con un residuo sólido al que se añadieron agua (20 ml) y acetato de etilo (15 ml). Se separaron las fases y la fase acuosa se extrajo dos veces con acetato de etilo (15 ml cada una). Las fases orgánicas combinadas se secaron sobre sulfato de sodio y tras la filtración, el disolvente orgánico se eliminó a presión reducida para dar 5,8 g del producto deseado como un líquido claro.

Pureza del 98,4 GC-a% (0,33 GC-a% del material de partida) en un rendimiento total del 94%.

RMN de ^{13}C (126 MHz, CDCl_3) δ 145,59, 141,97, 128,27, 128,20, 126,14, 122,68, 70,46, 45,44, 30,23, 25,14, 22,40, 22,38.

RMN de ^1H (500 MHz, cloroformo-d) δ 7,27 a 7,22 (m., 1H), 7,18 (d, J = 7,7 Hz, 1H), 7,15 (s, 1H), 7,05 (d, J = 7,5 Hz, 1H), 4,86 (q, J = 6,5 Hz, 1H), 2,47 (d, J = 7,2 Hz, 2H), 1,92 a 1,80 (m, 1H), 1,48 (d, J = 6,5 Hz, 3H), 0,90 (d, J = 6,7 Hz, 6H).

Etapas 3: Síntesis de los éteres correspondientes: Preparación de 1-(1-etoxietil)-3-isobutilbenceno (R= Et)



El etanol seco (3,05 g, 66,2 mmol, 3 eq.) y el 1-(3-isobutilfenil) etanol (98,4 GC-a%, 4 g, 22 mmol, 1 eq.) obtenidos en la etapa 2 se mezclaron en un recipiente de reacción. Se añadió ácido metano sulfónico (149 mg, 1,55 mmol, 0,07 eq.) y la mezcla se sometió a reflujo (78 °C). Tras refluir durante 23,5 hs, la mezcla de reacción se enfrió a temperatura ambiente y se añadieron 2 g de solución saturada de NaHCO_3 . El disolvente se volvió a eliminar a presión reducida (180 a 90 mbar) a 60 °C y se separaron las dos fases. La fase orgánica superior se sometió a cromatografía en columna de gel de sílice y se eluyó con ciclohexano: acetato de etilo para obtener 0,6 g del producto bruto deseado con una pureza del 98,9 GC-a%.

RMN de ^{13}C (176 MHz, CDCl_3) δ 143,93, 141,79, 128,11, 128,07, 126,85, 123,50, 77,82, 63,83, 45,45, 30,25, 24,29, 22,39, 22,35, 15,42.

RMN de ^1H (700 MHz, cloroformo-d) δ 7,27 a 7,21 (m, 1H), 7,12 (d, J = 7,6 Hz, 1H), 7,09 (s, 1H), 7,04 (d, J = 7,5 Hz, 1H), 4,37 (q, J = 6,5 Hz, 1H), 3,35 (q, J = 7,0 Hz, 2H), 2,48 (d, J = 7,2 Hz, 2H), 1,85 (d, J = 13,5, 6,8 Hz, 1H), 1,35 (q, J = 7,0 Hz, 2H), 2,48 (d, J = 7,2 Hz, 2H), 1,85 (d, J = 13,5, 6,8 Hz, 1H), 1,43 (d, J = 6,6 Hz, 3H), 1,18 (t, J = 7,0 Hz, 3H), 0,90 (dd, J = 6,7, 2,2 Hz, 6H).

Ejemplo 2

La sustitución de etanol seco por metanol seco en la etapa 3 da lugar a la formación de 1-(1-metoxietil)-3-isobutilbenceno.

Ejemplo 3

La sustitución de etanol seco por isopropanol seco en la etapa 3 da lugar a la formación de 1-(1-propoxietil)-3-isobutilbenceno.

Tabla 1 - Proporciona la impresión de aroma del compuesto de la fórmula (I) o de las mezclas

Muestra Núm.	Ejemplo Núm.	Pureza/mezcla por GC	Meta: Para ratio (RMN)	Nombre Químico	Impresión de aroma
1	Ejemplo 1 Etapa 1	99,7 GC-a%	-	1-(3-isobutilfenil)etanona	Zanahoria, chocolate, hierbas, ceroso,

Muestra Núm.	Ejemplo Núm.	Pureza/mezcla por GC	Meta: Para ratio (RMN)	Nombre Químico	Impresión de aroma
					amaderado
2	Mezcla de compuesto de la fórmula I y la fórmula II en la que X=O Y=O	77,7 meta : 15,2 para (GC-a%)	4:1	1-(3-isobutilfenil)etanona: 1-(4-isobutilfenil)etanona	Los mismos aspectos del Núm. 1 pero también agrícola y violeta
3	Ejemplo 1 Etapa 2	98,4 GC-a%	-	1-(3-isobutilfenil)etanol	Agrícola, lirio de los valles, acuoso, ceroso
4	Ejemplo 1 Etapa 3	98,9 GC-a%	-	1-(1-etoxietil)-3-isobutilbenceno	Jabonoso, floral, pomelo, dulce, mohoso, acuoso
5	Mezcla de compuesto de la fórmula I y la fórmula II en la que X=-OR, Y= -OR y R = CH ₂ CH ₃	87% GC-a% meta : 10 GC-a% para	75:10:15 Meta: para: orto	1-(1-etoxietil)-3-isobutilbenceno : 1-(1-etoxietil)-4-isobutilbenceno : 1-(1-etoxietil)-2-isobutilbenceno	Lirio de los valles, dulce, ceroso

Compuesto A = cualquier compuesto o mezcla de acuerdo con la tabla 1

Composiciones de fragancia ventajosas

El compuesto A como se describió anteriormente se formuló en las composiciones de acuerdo con las tablas 2 y 3. Las cantidades indicadas en las tablas 2 y 3 son unidades de peso en gramos.

5

Tabla 2: Composiciones de fragancia 1A y 1B

	1A	1B
Lactona C10 gamma (5-hexiloxolan-2-ona)	2	2
Bourgeonal (3-(4-terc-butilfenil)propanal)	2	2
Citronelol	3	3
Aldehído C-14 (5-heptiloxolan-2-ona)	3	3
Heptilato de alilo	4	4
Núcleo ámbar (1-(2-terc-butilciclohexil)oxibutan-2-ol)	4	4
Butirato de etil-2-metilo	4	4
Acetato de geranilo	5	5
Helional (3-(1,3-benzodioxol-5-il)-2-metilpropanal)	10	10
Manzanato (2-metilpentanoato de etilo)	10	10
Ámbar (etoximetoxiciclododecano)	10	10
Acetato de hexilo	11	11
Salicilato de bencilo	12	12
Magnolan (2,4-dimetil-4,4a,5,9b-tetrahidroindeno[1,2-d][1,3]dioxina)	15	15
Verdox (acetato de 2-terc-butilciclohexilo)	25	25
Aceite de bergamota sin bergapteno	25	25
Linalol	30	30
Dipropilenglicol	45	45
Iso E Super (Tetrametil acetilcetonaftalenos)	110	110
Piranol (4-metil-2-(2-metilpropil)oxan-4-ol)	170	170
Hediona (3-oxo-2-pentilciclopentanoacetato de metilo)	200	200

	1A	1B
Galaxolide 50% IPM (1,3,4,6,7,8-hexahidro-4,6,6,7,8,8-hexametilciclopenta(g)-2-benzopirano 50% en miristato de isopropilo)	300	300
Compuesto A	5	100
	1005	1100

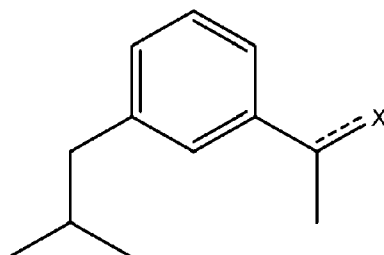
Tabla 3: Composiciones de fragancia 2A y 2B

	2A	2B
Cetona de frambuesa (4-(4-hidroxifenil)butan-2-ona)	4	4
Vanitrope (2-etoxi-5-prop-1-enilfenol)	6	6
Aldehído de ciclamen (al menos 90% de 2-metil-3-(p-isopropilfenil)propionaldehído; componente secundario: 5% de ácido 3-(p-cumenil)-2-metilpropiónico)	10	10
Biciclononalactona (3,4,4a,5,6,7,8,8a-octahidrocromen-2-ona)	10	10
Aldehído C-14 (5-heptiloxolan-2-ona)	14	14
Etilvanillina (3etoxi-4-hidroxibenzaldehído)	16	16
Heliotropina (1,3-benzodioxol-5-carbaldehído)	20	20
Iso E Super (acetilcetronaftalenos tetrametilados)	20	20
Sandela (3-[5,5,6-trimetilbicyclo[2.2.1]hept-2-il]ciclohexan-1-ol)	30	30
Isobutirato de vainillina ((4-formil-2-metoxifenil) 2-metilpropanoato)	40	40
Aldehído C-18 (5-pentiloxolan-2-ona)	50	50
Salicilato de bencilo	60	60
Hexil aldehído cinámico (2-(fenilmetilideno)octanal)	70	70
Hediona (3-oxo-2-pentilciclopentanoacetato de metilo)	130	130
Piranol (4-metil-2-(2-metilpropil)oxan-4-ol)	150	150
Brasilato de etileno (1,4-dioxacicloheptadecano-5,17-diona)	170	170
Galaxolide 50% IPM (1,3,4,6,7,8-hexahidro-4,6,6,7,8,8-hexametilciclopenta(g)-2-benzopirano 50% en miristato de isopropilo)	200	200
Compuesto A	5	50
	1005	1050

- 5 La composición de acuerdo con la tabla 2 y la tabla 3, es decir 1A, 1B, 2A,2B, se podría incluir en varias composiciones seleccionadas del grupo que consiste en Pulverización de bomba desodorante, Acondicionador capilar limpio, Gel de lavado facial, Baño de espuma concentrado, Gel capilar, Jabón corporal autoespumante, Emulsión de protección solar pulverizable, Emulsión de protección solar pulverizable, Gel facial emoliente, Baño de espuma de aceite de 2 fases, Champús, Baño de ducha, Aerosol de bomba de AP/Deo hidroalcohólico, Aerosol, Roll-on de AP/Deo acuoso/alcohólico, Gel de peinado tipo "Fuera de la Cama", Espuma de afeitado, Champú para bebés con piel sensible,
- 10 Jabón corporal para piel sensible, Champú para cuero cabelludo sensible, Deo Stick, Toallitas para bebés, Bálsamo para después del afeitado, Gel facial, Crema facial de día, Limpiador facial, Loción corporal, Protector solar FPS50+, Loción pulverizable, Limpiador de vajilla a mano - normal, Limpiador de vajilla a mano - concentrado, Limpiador sanitario - concentrado, Limpiador multiusos, Suavizante antibacteriano, Composición detergente, Composición detergente en polvo y Composición detergente líquida.
- 15 Los expertos en la técnica pueden conocer bien las diversas formulaciones generales de los productos mencionados anteriormente.
- Las Composiciones 1A, 1B, 2A y 2B pueden, por ejemplo, ser formuladas en formulaciones específicas como las desveladas en el Número IP.com: IPCOM000258614D titulado Nuevos Productos Químicos Aromáticos páginas 6 a 46, Tabla 1 a Tabla D13, en la que la "Composición de Fragancia 1A" se sustituye por cantidades idénticas de
- 20 composiciones 1A, 1B, 2A o 2B.

REIVINDICACIONES

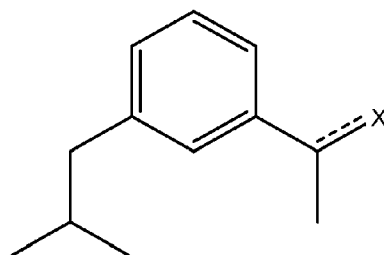
1. Uso de al menos un compuesto de la fórmula (I),



fórmula (I),

en la que

- 5 X se selecciona del grupo que consiste en -O-R, -O(C=O)-R y =O;
R se selecciona del grupo que consiste en -H, alquilo C₁-C₅ lineal o ramificado, no sustituido y cicloalquilo C₃-C₅ no sustituido;
o su sal o un estereoisómero del mismo,
para impartir una impresión de aroma a una composición.
- 10 2. Procedimiento para impartir una impresión de aroma a una composición que comprende al menos la etapa de añadir al menos un compuesto de la fórmula (I),



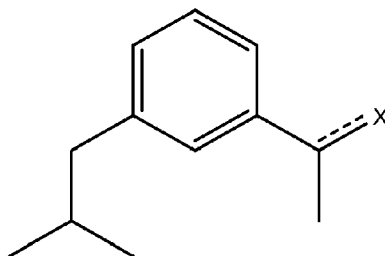
fórmula (I),

en la que

- 15 X se selecciona del grupo que consiste en -O-R, -O(C=O)-R y =O;
R se selecciona del grupo que consiste en -H, alquilo C₁-C₅ lineal o ramificado, no sustituido y cicloalquilo C₃-C₅ no sustituido;
o su sal o un estereoisómero del mismo,
a la composición.
3. El uso o el procedimiento de acuerdo con cualquiera de las reivindicaciones 1 a 2, en el que X es -O-R.
- 20 4. El uso o el procedimiento de acuerdo con cualquiera de las reivindicaciones 1 a 2, en el que X es -O(C=O)-R.
5. El uso o el procedimiento de acuerdo con cualquiera de las reivindicaciones anteriores, en el que R se selecciona del grupo que consiste en -CH₃, -CH₂CH₃, -CH₂CH₂CH₃, -CH(CH₃)₂, -CH(CH₃)(C₂H₅), -CH₂CH(CH₃)₂, -CH₂CH₂CH₂CH₃, -CH(CH₃)₂, -CH₂CH(CH₃)₂, -CH(CH₃)CH₂CH₃, -CH(CH₃)CH₂CH₃, ciclopropilo y ciclobutilo.
- 25 6. El uso o el procedimiento de acuerdo con cualquiera de las reivindicaciones anteriores, en el que la composición se selecciona del grupo que consiste en composiciones de perfume, composiciones para el cuidado del cuerpo, artículos de higiene, composiciones de limpieza, composiciones de detergentes textiles, composiciones para dispensadores de aromas, alimentos, complementos alimentarios, composiciones farmacéuticas y composiciones para la protección de cultivos.
- 30 7. El uso o el procedimiento de acuerdo con cualquiera de las reivindicaciones anteriores, en el que la impresión aromática se selecciona del grupo que consiste en una nota de zanahoria, una nota de chocolate, una nota de hierbas, una nota cerosa, una nota amaderada, una nota agrícola, una nota de lirio de los valles, una nota acuosa, una nota jabonosa, una nota floral, una nota parecida al pomelo, una nota dulce y una nota de moho.
8. El uso o el procedimiento de acuerdo con cualquiera de las reivindicaciones anteriores, en el que el compuesto de

la fórmula (I) o sus sales o estereoisómero está presente en una cantidad en el intervalo de $\geq 0,01\%$ en peso a $\leq 70,0\%$ en peso, en base al peso total de la composición.

9. Una composición que comprende al menos un compuesto de la fórmula (I),



fórmula (I),

5 en la que

X se selecciona del grupo que consiste en $-O-R$, $-O(C=O)-R$ y $=O$;

R se selecciona del grupo que consiste en $-H$, alquilo C_1-C_5 lineal o ramificado, no sustituido y cicloalquilo C_3-C_5 no sustituido;

o su sal o un estereoisómero del mismo y

10 (i) al menos una sustancia química aromática diferente de la fórmula (I), o
(ii) al menos un portador químico no aromático, o
(iii) ambos de (i) y (ii).

10. La composición de acuerdo con la reivindicación 9, en la que X es $-O-R$.

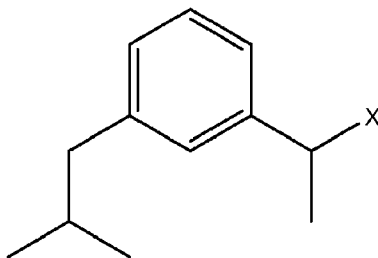
11. La composición de acuerdo con la reivindicación 9, en la que X es $-O(C=O)-R$.

15 12. La composición de acuerdo con cualquiera de las reivindicaciones 9 a 11, en la que R se selecciona del grupo que consiste en $-H$, $-CH_3$, $-CH_2CH_3$, $-CH_2CH_2CH_3$, $-CH(CH_3)_2$, $-CH(CH_3)(C_2H_5)$, $-CH_2CH(CH_3)_2$, $-CH_2CH_2CH_2CH_3$, $-CH(CH_3)_2$, $-CH_2CH(CH_3)_2$, $-CH(CH_3)CH_2CH_3$, ciclopropilo y ciclobutilo.

20 13. La composición de acuerdo con una cualquiera de las reivindicaciones 9 a 12, en la que el al menos un portador químico no aromático (ii) se selecciona del grupo que consiste en tensioactivos, componentes oleosos, antioxidantes, agentes desodorante-activos disolventes y mezclas de dos o más de los mencionados anteriormente.

25 14. La composición de acuerdo con cualquiera de las reivindicaciones anteriores 9 a 13, en la que la composición se selecciona del grupo que consiste en composiciones de perfume, composiciones para el cuidado del cuerpo, artículos de higiene, composiciones de limpieza, composiciones de detergentes textiles, composiciones para dispensadores de aromas, alimentos, complementos alimentarios, composiciones farmacéuticas y composiciones para la protección de cultivos.

15. Un compuesto de la Fórmula (I')



fórmula (I'),

en la que

30 X se selecciona del grupo que consiste en $-O-R_a$, y $-O(C=O)-R_b$;
 R_a se selecciona del grupo que consiste en alquilo C_2-C_5 lineal o ramificado, no sustituido y cicloalquilo C_3-C_5 no sustituido;
 R_b se selecciona del grupo que consiste en alquilo C_1-C_5 lineal o ramificado, no sustituido y cicloalquilo C_3-C_5

no sustituido
o su sal o un estereoisómero del mismo.

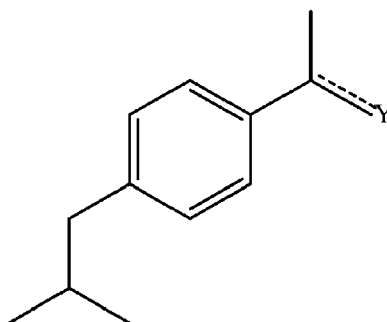
16. El compuesto de acuerdo con la reivindicación 15, en el que X es -O-R_a.

17. El compuesto de acuerdo con la reivindicación 15, en la que X es -O(C=O)-R_b.

5 18. El compuesto de acuerdo con una cualquiera de las reivindicaciones 15 a 17 precedentes, en el que R_a se selecciona del grupo que consiste en -CH₂CH₃, -CH₂CH₂CH₃, -CH(CH₃)₂, -CH(CH₃)(C₂H₅), -CH₂CH(CH₃)₂, -CH₂CH₂CH₂CH₃, -CH(CH₃)₂, -CH₂CH(CH₃)₂, -CH(CH₃)CH₂CH₃, ciclopropilo y ciclobutilo.

10 19. El compuesto de acuerdo con una cualquiera de las reivindicaciones 15 a 17 anteriores, en el que R_b se selecciona del grupo que consiste en -CH₃, -CH₂CH₃, -CH₂CH₂CH₃, -CH(CH₃)₂, -CH(CH₃)(C₂H₅), -CH₂CH(CH₃)₂, -CH₂CH₂CH₂CH₃, -CH(CH₃)₂, -CH₂CH(CH₃)₂, -CH(CH₃)CH₂CH₃, ciclopropilo y ciclobutilo.

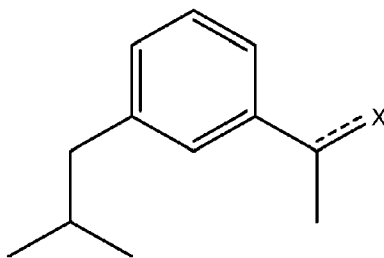
20. Una mezcla que comprende, al menos, un compuesto de la fórmula (II),



fórmula (II),

en la que

15 Y se selecciona del grupo que consiste en -O-R₁, -O(C=O)-R₁ y =O;
R₁ se selecciona del grupo que consiste en alquilo C₁-C₅ lineal o ramificado, no sustituido y cicloalquilo C₃-C₅ no sustituido;
o su sal o un estereoisómero del mismo;
y al menos un compuesto de la fórmula (I)



fórmula (I),

20 en la que
X se selecciona del grupo que consiste en -O-R₁, -O(C=O)-R₁ y =O;
R se selecciona del grupo que consiste en -H, alquilo C₁-C₅ lineal o ramificado, no sustituido y cicloalquilo C₃-C₅ no sustituido;
o su sal o un estereoisómero del mismo.

25 21. La mezcla de acuerdo con la reivindicación 20, en la que R₁ se selecciona del grupo que consiste en -CH₃, -CH₂CH₃, -CH₂CH₂CH₃, -CH(CH₃)₂, -CH(CH₃)(C₂H₅), -CH₂CH(CH₃)₂, -CH₂CH₂CH₂CH₃, -CH(CH₃)₂, -CH₂CH(CH₃)₂, -CH(CH₃)CH₂CH₃ y ciclopropilo.

30 22. La mezcla de acuerdo con la reivindicación 20, en la que R se selecciona del grupo que consiste en -H, -CH₃, -CH₂CH₃, -CH₂CH₂CH₃, -CH(CH₃)₂, -CH(CH₃)(C₂H₅), -CH₂CH(CH₃)₂, -CH₂CH₂CH₂CH₃, -CH(CH₃)₂, -CH₂CH(CH₃)₂, -CH(CH₃)CH₂CH₃, ciclopropilo y ciclobutilo.

23. Uso de la mezcla de acuerdo con cualquiera de las reivindicaciones 20 a 22, para impartir una impresión de aroma a una composición.

24. Una composición que comprende:

- (i) la mezcla de acuerdo con cualquiera de las reivindicaciones 20 a 22, y
- (ii) al menos un aroma químico diferente de los de la fórmula (I) y la fórmula (II), o
- (iii) al menos un portador químico no aromático, o
- (iv) ambos de (i) y (ii).

5