



República Federativa do Brasil
Ministério da Economia
Instituto Nacional da Propriedade Industrial

(11) BR 112017008533-0 B1



(22) Data do Depósito: 10/11/2014

(45) Data de Concessão: 23/11/2021

(54) Título: COMPOSTO, SEU USO COMO INGREDIENTE DE PERFUME, COMPOSIÇÃO DE PERFUME E COMPOSIÇÃO PARA USO PESSOAL OU DE CUIDADOS DOMÉSTICOS

(51) Int.Cl.: C07C 47/238; C07C 47/548; C11B 9/00.

(73) Titular(es): GIVAUDAN SA.

(72) Inventor(es): FELIX FLACHSMANN.

(86) Pedido PCT: PCT EP2014074185 de 10/11/2014

(87) Publicação PCT: WO 2016/074698 de 19/05/2016

(85) Data do Início da Fase Nacional: 25/04/2017

(57) Resumo: A presente invenção refere-se ao composto representado por meio da fórmula I R1 é -(CHR4)m-(CHR5)n-(CHR6)o-CHO, com R4, R5, R6 sendo selecionados independentemente de entre H ou Me, e sendo m, n, o selecionado independentemente entre 0 e 1; R2 é H ou Me; e R3 é um resíduo de C3-C6 alquenila ramificado, linear ou cíclico. Os referidos compostos são úteis como ingredientes de perfume em produtos de cuidados pessoais e de cuidados domésticos.

Relatório Descritivo da Patente de Invenção para
**"COMPOSTO, SEU USO COMO INGREDIENTE DE PERFUME,
COMPOSIÇÃO DE PERFUME E COMPOSIÇÃO PARA USO
PESSOAL OU DE CUIDADOS DOMÉSTICOS".**

[001] A presente invenção refere-se aos ingredientes de perfume e às preparações de perfume contendo os mesmos. Em particular, a presente invenção refere-se aos referidos ingredientes de perfume ou às preparações de perfume que exibem características de odor específicas e podem contribuir para características de odor muguet (lírio do vale). Ainda mais particularmente, a presente invenção refere-se às referidas preparações de perfume que não contêm, ou contêm substancialmente nenhuma, Lilial™. A presente invenção refere-se ainda a métodos para preparar os referidos ingredientes de perfume e às preparações de perfume, bem como a utilização dos referidos ingredientes de perfume e às preparações de perfume em fragrâncias finas e produtos de consumo, tais como produtos de higiene pessoal e cuidados domésticos. A presente invenção refere-se também às referidas fragrâncias finas e aos produtos de consumo que contêm os referidos ingredientes de perfume ou as preparações de perfume.

[002] Os compostos com características de odor muguet são muito procurados após os ingredientes do perfume. Estes compostos são ingredientes importantes em bases florais e podem atuar como harmonizadores em muitos tipos diferentes de criações de fragrâncias. Os compostos deste tipo são amplamente utilizados em produtos de consumo, tais como produtos de cuidados pessoais e de cuidados ao consumidor, bem como em perfumaria fina, para gerar odores agradáveis ou para mascarar odores desagradáveis.

[003] Um excelente ingrediente de perfume amplamente valorizado por sua nota de odor muguet é Lilial™. Lilial™ é um exemplo de

um alcanal substituído por arila, mais particularmente um propanal substituído por arila. Especificamente, o seu nome químico é 3-(4-terc-butilfenil)-2-metilpropanal (CAS 80-54-6). Este composto tem encontrado amplo uso em perfumaria fina, bem como em produtos pessoais e de cuidados domésticos. No entanto, o seu uso tem sido submetido a escrutínio regulamentar em vista de recentes descobertas que exibe efeitos tóxicos sobre os órgãos reprodutivos de ratos machos e cães. Não foram encontrados efeitos nos estudos com camundongos, cobaias e primatas, no entanto, no sistema de classificação do Sistema Harmonizado Global (GHS) este composto é classificado como um material CMR2. Para os materiais CMR de categoria 2, é necessário estabelecer que as quantidades propostas para utilização sejam inofensivas para os consumidores. Tendo em conta a situação reguladora do LilialTM, é necessário substituí-lo por outros ingredientes do perfume.

[004] O WO2010105 873 resolve o problema da substituição de LilialTM. A solução proposta reside no uso de misturas de ingredientes conhecidos comumente encontrados na paleta de perfumaria para recriar características de odor substancialmente semelhantes às de LilialTM.

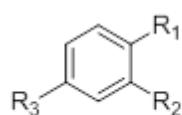
[005] Do mesmo modo, o documento WO2009027957 propõe uma solução que reside na formulação de combinações de ingredientes de perfume conhecidos a partir da paleta de perfumaria.

[006] WO2013045301 também propõe uma solução para substituição LilialTM, que reside na seleção de misturas de ingredientes incluindo o composto LilyfloreTM e um certo composto indanil propanal, em combinação com outros ingredientes perfumantes secundários.

[007] A requerente desenvolveu agora compostos que podem ser utilizados como ingredientes de perfume em composições de perfume e produtos de consumo. Mais particularmente, a requerente encontrou

compostos que possuem características de odor interessantes. Ainda mais particularmente, a requerente encontrou compostos que podem ser utilizados para a reconstituição para o odor de Lilial™ e assim podem servir em substituições para Lilial™. Além disso, os compostos podem ter um desempenho de perfume semelhante ou mesmo melhorado em comparação com Lilial™. Finalmente, a requerente encontrou compostos que não atraem as preocupações reguladoras associadas com Lilial™. Em particular, a requerente verificou que os ingredientes de perfume de alanal substituído com arila que são análogos estruturais próximos a Lilial™ mas que, criticamente, contêm um substituinte no anel arila, que é posicionado *ortho* em relação ao grupo que suporta a funcionalidade aldeído e/ou contém um substituinte alquenila no anel arila, que está posicionado *para* o grupo que suporta a funcionalidade aldeído, tem características de odor interessantes, mas surpreendentemente carregam com elas nenhuma ou significativamente menos dos problemas relacionados com CMR associados a Lilial™ como indicado por dados *in vitro*.

[008] Em conformidade, em um primeiro aspecto, a presente invenção proporciona um composto representado por meio da fórmula



fórmula I

em que

R1 é -(CHR₄)_m-(CHR₅)_n-(CHR₆)_o-CHO, com R₄, R₅, R₆ sendo selecionados independentemente dentre H ou Me, e sendo m, n, o selecionados independentemente entre 0 e 1;

R₂ é H ou Me; e

R₃ é um resíduo de C3-C6 alquenila ramificado, linear ou cíclico.

[009] De preferência, um composto representado por meio da fórmula I é proporcionado com R₁ e R₂ tal como definido acima, e em que R₃ é um resíduo C3-C6 alqu-2-enila ramificado, linear ou cíclico, particularmente preferido um resíduo C3-C6 alqu-2-enila com um grupo exo-metileno.

[0010] Em um outro aspecto da presente invenção, é proporcionado um composto representado por meio da fórmula 1, com R₁ e R₂ tal como definidos acima, e em que R₃ é um resíduo de C3-C6 alqu-2-enila ramificado, linear ou cíclico contendo um grupo CH₂ em alfa para o anel fenila.

[0011] Em um aspecto particular da presente invenção, é proporcionado um composto representado por meio da fórmula 1, com R₁ e R₂ como definidos acima, e em que R₃ é selecionado a partir do grupo que consiste em alila, 2-metilalila, 2-metilenobutila, 3-metilbut- 2-en-1-ila, 3-metilbut-3-en-2-ila e but-2-en-1-ila.

[0012] Em um outro aspecto da presente invenção, o número total de átomos de carbono do composto representado por meio da fórmula 1 não excede 16.

[0013] Ainda em um aspecto mais particular da presente invenção, é proporcionado um composto selecionado a partir do grupo que consiste em 3-(4-(2-metilalil)fenil)propanal, 3-(2-metil-4-(2-metilalil)fenil)propanal, 3-(4-(2-metilalil)fenil)butanal, 2-metil-3-(4-(2-metilalil)fenil)propanal, 3-(2-metil- 4-(2-metilenobutil)fenil)propanal, 2-(2-metil-4-(2-metilalil)fenil) acetaldeído, 3-(4-(3-metilbut-2-en-1-il)fenil)propanal, 3-(4-metilenobutil)fenil)propanal, 2-(4-(2-metilalil)fenil) acetaldeído, 3-(4-(3-metilbut-3-en-2-il)fenil)propanal, 2-(4-(3-metilbut-2-en-1-il)fenil) acetaldeído, 2-(2-metil-4-(3-metilbut-2-en-1-il)fenil) acetaldeído e 3-(4-(but-2-en-1-il)fenil)propanal.

[0014] Os compostos da presente invenção possuem características de odor específicas e boas características de desempenho, e os

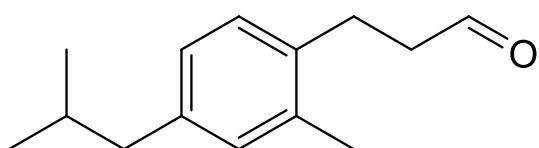
compostos podem contribuir para características de odor semelhantes a Lilial™.

[0015] Além disso, os compostos da presente invenção podem gerar características particularmente odoríferas substanciais e duradouras, e podem contribuir para características de cheiro muguet particularmente substanciais e duradouras.

[0016] Os compostos da presente invenção são ingredientes de perfume adequados.

[0017] Os compostos da presente invenção podem ser ingredientes de perfume particularmente impactantes. O impacto que um ingrediente de perfume exerce está relacionado com o seu Valor de Odor. O Valor de Odor é a razão entre a pressão de vapor e a concentração do limiar de detecção.

[0018] Alguns dos compostos podem ter valores de Odor extremamente elevados. Por exemplo, o composto relacionado com a estrutura



tendo um substituinte no anel arila, que está posicionado orto em relação ao grupo que suporta a funcionalidade aldeído, tem um Valor Odor de 559'071. Os ingredientes de perfume relacionados não são impactantes por comparação. Por exemplo, Lilial™ tem um valor de odor de apenas 32'978 enquanto que o aldeído de ciclameno tem um valor de odor de apenas 21'986.

[0019] Por exemplo, o 3-(2-metil-4-(2-metilalil)fenil)propanal tem um elevado valor de odor quando comparado com Lilial™.

[0020] O elevado Valor de Odor de alguns dos compostos da presente invenção é significativo pelo fato de existir uma necessidade de sustentabilidade e a provisão de ingredientes de perfume impactantes

permite que os perfumantes criem acordos de fragrância desejáveis com menores concentrações de materiais.

[0021] As questões reguladoras relacionadas com Lilial™ nascem do fato de se degradarem enzimaticamente em ratos e cães em ácido terc-butil-benzoico (t-BBA), que é conhecido por inibir a síntese de glicose e a síntese de ácidos graxos *in vitro* (McCune et al, Arch Biochem Biophys (1982) 214 (1): 124 a 133).

[0022] O ácido terc-butilbenzoico é conhecido por causar efeitos testiculares em ratos machos (Hunter et al, Food Cosmet, Toxicol, 1965, 3: 289 a 298, Cagen et al, J. Am. Coll. Toxicol, 1989, 8(5): 1027 a 1038).

[0023] Em contraste, os compostos da presente invenção potencialmente contornam os problemas de toxicidade.

[0024] Em contraste com Lilial, em que o anel aromático é substituído com um grupo t-butila metabolicamente inerte na posição *p* com a cadeia lateral propanal, os compostos da presente invenção possuem um substituinte alquenila linear ou ramificado (R_3 da fórmula geral I). Este substituinte alquenila é susceptível de ser sujeito a outras etapas de degradação metabólica oxidativa em vertebrados, tais como hidroxilação ou epoxidação com subsequente hidrólise a um diol vicinal. Os metabolitos resultantes terão assim propriedades físicas diferentes, por exemplo, uma maior solubilidade em água, em comparação com o ácido p-t-butilbenzoico, e espera-se assim que não exerçam os efeitos de toxicidade reprodutiva de ratos e cães macho ácido p-t-butilbenzoico. Alternativamente, os substituintes alquenila podem prevenir ou reduzir a degradação da cadeia lateral de propano ao ácido benzoico substituído, por exemplo, se as etapas de metabolização descritas que atuam sobre o substituinte alquenila ocorrem mais rapidamente do que a degradação oxidativa da cadeia lateral de propanal.

[0025] Em conformidade, a presente invenção proporciona, em um

outro de seus aspectos, a utilização de um composto definido acima como um ingrediente de perfume.

[0026] A presente invenção proporciona, em um outro dos seus aspectos, a utilização de um composto definido acima em uma composição de perfume como substituição de odorantes de propanal substituído por arila, que são não substituídos no anel arila em uma posição *ortho* e/ou suportam um substituinte alquenila em uma posição *para* ao substituinte que suporta a funcionalidade aldeído, em particular Lilial™.

[0027] Em um outro aspecto da presente invenção proporciona-se um método para conferir um odor verde característico a uma composição de perfume, compreendendo o referido método a etapa de incorporação de um composto definido na presente invenção acima na referida composição de perfume.

[0028] Ainda em um outro aspecto da presente invenção é proporcionada uma composição de perfume compreendendo um composto definido acima.

[0029] Ainda em um outro aspecto da presente invenção é proporcionada uma composição de perfume que possui aspectos verdes de características de odor muguet compreendendo um composto definido acima.

[0030] Ainda em um outro aspecto da presente invenção, é proporcionada uma composição de perfume compreendendo um composto definido acima, que tem uma quantidade reduzida ou está substancialmente livre de quaisquer odorantes propanais substituídos por arila, os quais são não substituídos no anel arila em uma posição *ortho* em relação ao substituinte que suporta a funcionalidade aldeído, em particular Lilial™.

[0031] Uma composição de perfume de acordo com a presente invenção pode ser composta inteiramente por um ou mais dos com-

postos da presente invenção. No entanto, uma composição de perfume pode também conter, para além de um ou mais dos compostos da presente invenção, um ou mais ingredientes de perfume adicionais.

[0032] Os compostos da presente invenção podem estar presentes em uma composição de perfume em qualquer quantidade dependendo do efeito olfativo particular que um perfumista deseja conseguir. Em uma modalidade particular da presente invenção, uma composição de perfume da presente invenção pode conter compostos definidos acima em uma quantidade de 0,1 a 100% em peso da referida composição.

[0033] Se um ou mais ingredientes de perfume adicionais forem empregados, podem ser selecionados a partir de ingredientes de perfume conhecidos na técnica.

[0034] De preferência, o pelo menos um ingrediente de perfume adicional que pode ser utilizado em uma composição de perfume possui características de odor muguet, como 3-(4-isobutil-2-metilfenil)propanal.

[0035] Em particular, os referidos ingredientes de perfume que podem ser utilizados em uma composição de perfume de acordo com a presente invenção incluem (E/Z)-9-hidróxi-5,9-dimetildec-4-enal, 6-metóxi-2,6-dimetilheptan-1-al (metoximelonal), 5,9-dimetil-4,8-decadienal (geraldeído), beta-metil-3-(1-metiletil)benzenopropanal (Florhydral), octahidro-8,8-dimetilnaftaleno-2-carbaldeído (Cyclomyral), alfa-metil-1,3-benzodioxol-5-propionaldeído (helional), 5-metil-2-(1-metilbutil)-5-propil-1,3-dioxan (Troenan), 3-(o-etilfenil)-2,2-dimetilpropionaldeído (Floralozona), farnesol, 3,7,11-trimetildodeca-1,6,10-trien-3-ol, opcionalmente como uma mistura isomérica (nerolidol), 2-metil-4-fenilbutan-2-ol (dimetilfeniletilcarbinol), cis-4-(isopropil)ciclohexanometanol (Mayol), 1-(1-hidroxietil)-4-(1-metiletil)ciclohexano (opcionalmente como uma mistura de diaste-

reoisômeros) (mugetanol), (4-metil-3-pentenil)ciclohexenocarbaldeído (Citrusal), salicilato de ciclohexila, salicilato de hexila, salicilato de benzila, salicilato de amila, 3-(p-(2-metilpropil)fenil)-2-metilpropionaldeído (Silvial), 3-p-cumenil-2-metilpropionaldeído (ciclamenaldeído), misturas de: cis-tetrahidro-2-isobutil-4-metilpiran-4-ol; trans-tetrahidro-2-isobutil-4-metilpiran-4-ol; (Florol), citrato de trietila e dipropileno glicol.

[0036] Os referidos ingredientes de perfume podem adicionalmente incluir Salicilato de Amila (2050-08-0); Aurantiol® (89-43-0); Salicilato de Benzila (118-58-1); Salicilato de Cis-3-hexenila (65405-77-8); Citronelil Oxiacetaldeído (7492-67-3); Cyclemax (7775-00-0); Salicilato de Ciclohexila (25485-88-5); Cyclomyral® (68738-94-3); Citronellol (106-22-9); Geraniol (106-24-1); Cyclopentol Hc 937165 (84560-00-9); Cymal (103-95-7); Dupical (30168-23-1); Etil Linalool (10339-55-6); Super Floral (71077-31-1); Florhydral® (125109-85-5); Florol® (63500-71-0); Gypane (24237-00-1); Salicilato de Hexila (6259-76-3); Helional (TM) (1205-17-0); Hidroxicitronelal (107-75-5); Linalool (78-70-6); Lyral® (31906-04-4); Majantol® (103694-68-4); Mayol® (13828-37-0); Melafleur (68991-97-9); Melonal (106-72-9); Mugetanol (63767-86-2); Muguesia (56836-93-2); álcool Muguet (13351-61-6); Verdantiol (91-51-0); Peonile® (10461-98-0); Fenoxanol® (55066-48-3); Rossitol® (215231-33-7); Silvial® (6658-48-6); Suzural (6658-48-6); Muguol® (18479-57-7); Tetrahidro Linalol (78-69-3); Acalea (84697-09-6); Dihidro Iso Jasmonato (37172-53-5); Hexil Aldeído Cinâmico (101-86-0); Hediona® (24851-98-7); Acetoína (513-86-0); Adoxal (141-13-9); Aldolona® (207228-93-1); Ambrocenide® (211299-54-6); Ambroxan (3738-00-9); Azurone® (362467-67-2); Bacdanol® (28219-61-6); Calone 1951® (28940-11-6); Cetalox® (3738-00-9); álcool cinâmico (104-54-1); Citral (5392-40-5); Ciclabute (67634-20-2); Ciclacet(TM) (5413-60-5); Ciclaptop™ (17511-60-3); Ciclohexadecanolida (109-29-5); Ciclohexadece-nona (3100-36-5); Ciclopentadecanova (507-72-7); Delta Damascona

(57378-68-4); Ebanol® (67801-20-1); Elintaal Forte (40910-49-4); Etil Vanillina (121-32-4); Brassilato de Etileno (105-95-3); Exaltenona 942008 (14595-54-1); Exaltolide Total 935985 (106-02-5); Floralozona (67634-14-4); Fructalate (72903-27-6); Gamma Decalactona (706-14-9); Habanolida (111879-80-2); Helvetolide ® (141773-73-1); Hexametilindanopirano (1222-05-5); Hidroxiambran® (118562-73-5); Iso E Super® (54464-57-2); Iso Hexenil Ciclohexenil Carboxaldeído (37677-14-8); Jasmal (18871-14-2); Javanol® (198404-98-7); Lauric Aldeído (112-54-9); Mefranal (55066-49-4); Muscenona (63314-79-4); Tonalid® (1506-02-1); Nectaril® (95962-14-4); Norlim Banol (70788-30-6); Para Hidróxi Fenil Butanona (5471-51-2); Pino Acetaldeído (33885-51-7); Romandolide® (236391-76-7); Sanjinol (28219-61-6); Silvanone® Supra (109-29- 5/507-72-7); Terpineol (8000-41-7); Vanilina (121-33-5); e Velvione® (37609-25-9), em que, os dados em parêntese são os números CAS.

[0037] Uma composição de perfume não precisa de ser limitada aos ingredientes de perfume listados acima. Podem utilizar-se outros ingredientes de perfume comumente utilizados em perfumaria, por exemplo qualquer um dos ingredientes descritos em "Perfume and Flavour Chemicals", S. Arctander, Allured Publishing Corporation, 1994, IL, EUA, que é incorporado na presente invenção como referência, incluindo os óleos essenciais, extratos de plantas, absolutos, resíduos, odorantes obtidos a partir de produtos naturais e semelhantes.

[0038] Os ingredientes de perfume contidos na referida composição de perfume são descritos acima, mas é claro que a composição de perfume não pode estar limitada aos ingredientes indicados. Em particular, as misturas de perfume podem compreender adjuvantes que são comumente empregados em formulações de perfume. O termo "adjuvantes" refere-se a um ingrediente que pode ser utilizado em uma composição de perfume por razões diferentes ou não especificamente

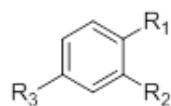
relacionadas com o desempenho olfativo da composição. Por exemplo, um adjuvante pode ser um ingrediente que atua como um auxiliar no processamento de um ingrediente ou ingredientes de perfume ou uma composição contendo o referido ingrediente ou pode melhorar o manuseamento ou armazenamento de um ingrediente de perfume ou composição que o contém, podendo também ser um ingrediente que proporciona benefícios adicionais tais como conferir cor ou textura. Pode também ser um ingrediente que confere resistência à luz ou estabilidade química a um ou mais ingredientes contidos em um ingrediente de perfume ou composição que o contém. Uma descrição detalhada da natureza e do tipo de adjuvantes comumente utilizados na mistura de perfumes ou composições que os contêm não pode ser exaustiva, tem de ser mencionado que os referidos ingredientes são bem conhecidos por meio de uma pessoa que é versada na técnica. Exemplos de adjuvantes incluem os solventes e co-solventes; tensoativos e emulsionantes; viscosidade e modificadores de reologia; agentes de espessamento e gelificantes; conservantes materiais; pigmentos, corantes e matérias corantes; diluentes, agentes de enchimento e agentes de reforço; estabilizadores contra os efeitos prejudiciais do calor e da luz, agentes de volume, agentes acidificantes, agentes de tamponamento e antioxidantes.

[0039] Além disso, qualquer um ou mais dos ingredientes de perfume ou adjuvantes utilizados na presente invenção podem ser formulados em um veículo de entrega, se desejado para proporcionar um efeito desejado. Os veículos de entrega podem incluir encapsulados. Alternativamente, um veículo de administração pode estar na forma de um suporte sólido, por exemplo, um material de suporte polimérico sobre o qual um ou mais ingredientes de perfume ou adjuvantes podem ser química ou fisicamente ligados. Ainda mais, um ou mais ingredientes de perfume ou adjuvantes podem ser dissolvidos ou dispersos em

um material de matriz, o qual serve para controlar a velocidade à qual o referido ingrediente ou ingredientes emana do mesmo. Ainda em uma modalidade alternativa, um ou mais ingredientes ou adjuvantes podem ser suportados em um substrato poroso, tal como uma ciclodextrina ou um zeólito ou outro material inorgânico. Ainda em uma outra modalidade, um ou mais ingredientes de perfume podem ser proporcionados na forma de um pró-perfume, o qual reagirá em um ambiente adequado para libertar o ingrediente de perfume de uma maneira controlada.

[0040] De preferência, no caso de outros ingredientes de perfume possuindo uma funcionalidade carbonila, o pró-perfume correspondente é um produto de reação de um composto de amina primária e/ou secundária e o ingrediente de perfume.

[0041] Em particular é preferido que um tal pró-perfume, também conhecido como precursor de fragrância, seja um produto de reação de um composto amino adequado e um composto representado por meio da fórmula I



fórmula I

em que

R₁ é -(CHR₄)_m-(CHR₅)_n-(CHR₆)_o-CHO; com R₄, R₅, R₆ sendo independentemente selecionados de H ou Me, e com m, n, o sendo selecionados independentemente de 0 e 1;

R₂ é H ou Me; e

R₃ é um resíduo de C3-C6 alquenila ramificado, linear ou cíclico.

[0042] Por tal reação, podem ser obtidos diferentes produtos, por exemplo a imina correspondente, a enamina, o hemi-aminal ou o ami-

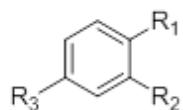
nal.

[0043] Um composto amino adequado para a formação do pró-perfume acima mencionado pode ser selecionado a partir do grupo que consiste em aminas aromáticas, em particular 2-aminobenzoato de metila (antranilato de metila), 2-amino-acetofenona, orto, meta ou para aminobenzoatos de fórmula II (em que R₁ = alquila C₁-C₁₂ linear, ramificado, alquenila, cicloalquila, cicloalquenila ou alquilarila e R₂ = H, Me, Et); aminas alifáticas primárias ou secundárias, de preferência alquilaminas ou alquildiaminas C₈-C₃₀ lineares ou ramificadas; eteraminas; etileno e propileno-aminas; aminoácidos e derivados; poliaminas, em particular polieteraminas primárias e secundárias, polietilenoiiminas, polipropilenoiminas, poliamidoaminas, poliaminoácidos, polivinilaminas, poli (etenoglicol) bis (amina), polivinilálcoois substituídos por amino; N-(3-aminopropil) imidazol, nipecotamida, skatol e indol.

[0044] Alternativamente, o pró-perfume adequado para libertar um composto de fórmula I pode ser proporcionado como um produto de uma condensação de Knoevenagel, uma formação de aldol, como um pró-perfume oxidativo clivável ou um acetal ou hemi-acetal.

[0045] Tendo em conta o que precede, verifica-se que uma composição de perfume pode estar pelo menos parcialmente na forma sólida, sob a forma de gel, sob a forma de espuma e/ou líquida. Se estiver presente na forma sólida, então pode tomar a forma de grânulos, pós ou comprimidos.

[0046] A presente invenção proporciona em um outro de seus aspectos uma fragrância fina ou um produto de consumo, tal como uma composição de higiene pessoal ou de cuidados domésticos que é perfumada por um composto representado por meio da fórmula I



fórmula I

em que

R₁ é -(CHR₄)_m-(CHR₅)_n-(CHR₆)_o-CHO; com R₄, R₅, R₆ sendo independentemente selecionados de H ou Me, e com m, n, o sendo selecionados independentemente de 0 e 1;

R₂ é H ou Me; e

R₃ é um resíduo de C3-C6 alquenila ramificado, linear ou cíclico.

[0047] Em uma modalidade particular, a presente invenção proporciona uma fragrância fina ou um produto de consumo, tal como uma composição de higiene pessoal ou de cuidados domésticos que é perfumada por meio de um composto representado por meio da fórmula I com R₁ e R₂ como definidos acima e em que R₃ é um resíduo C3-C6 alqu-2-enila ramificado, linear ou cíclico, particularmente um resíduo C3-C6 com um grupo exo-metileno.

[0048] Em uma outra modalidade particular, a presente invenção proporciona uma fragrância fina ou um produto de consumo, tal como uma composição de higiene pessoal ou de cuidados domésticos que é perfumada por meio de um composto representado por meio da fórmula 1 com R₁ e R₂ como definidos acima e em que R₃ é um resíduo C3-C6 alqu-2-enila ramificado, linear ou cíclico, que está a transportar um grupo CH₂ na posição alfa para o anel fenila.

[0049] Em uma outra modalidade particular, a presente invenção proporciona uma fragrância fina ou um produto de consumo, tal como uma composição de higiene pessoal ou de cuidados domésticos que é perfumada por meio de um composto representado por meio da fórmula 1 com R₁ e R₂ como definidos acima e em que R₃ é selecionado a

partir do grupo que consiste em alila, 2-metilalila, 2-metilenobutila, 3-metilbut-2-en-1-ila, 3-metilbut-3-en-2-ila e but-2-en-1-ila.

[0050] Em modalidades ainda mais particulares da presente invenção, é proporcionada uma fragrância fina ou um produto de consumo, tal como uma composição de higiene pessoal ou de cuidados domésticos que é perfumada por meio de pelo menos um ou mais compostos selecionados do grupo que consiste em 3-(4-(2-metilalil)fenil)propanal, 3-(2-metil-4-(2-metilalil)fenil)propanal, 3-(4-(2-metilalil)fenil)butanal, 2-metil-3-(4-(2-metilalil)fenil)propanal, 3-(2-metil-4-(2-metilenobutil)fenil)propanal, 2-(2-metil-4-(2-metilalil)fenil) acetaldeído, 3-(4-(3-metilbut-2-en-1-il)fenil)propanal, 3-(4-(2-metilenobutil)fenil)propanal, 2-(4-(2-metilalil)fenil) acetaldeído, 3-(4-(3-metilbut-3-en-2-il)fenil)propanal, 2-(4-(3-metilbut-2-en-1-il)fenil) acetaldeído, 2-(2-metil-4-(3-metilbut-2-en-1-il)fenil) acetaldeído e 3-(4-(but-2-en-1-il)fenil)propanal, ou os próprios perfumes correspondentes.

[0051] Os compostos definidos acima na presente invenção, quando adicionados a uma fragrância fina ou a um produto de consumo, tal como uma composição de cuidado pessoal ou de cuidados domésticos, podem conferir um odor característico às referidas composições, de preferência um odor verde. De acordo com outro aspecto da presente invenção, é proporcionado um método para conferir características de odor específicas, de preferência características de odor verde, a uma fragrância fina ou produto de consumo, tal como uma composição de higiene pessoal ou de cuidados domésticos compreendendo a etapa de adicionar à referida composição um composto definido acima na presente invenção ou uma composição de perfume contendo o referido composto.

[0052] Ainda em um outro aspecto da presente invenção, é proporcionado um método para conferir características de odor específicas, em particular características de odor verde, a uma fragrância fina

ou produto de consumo, tal como uma composição de higiene pessoal ou de cuidados domésticos, compreendendo a etapa de adição seletiva à referida uma fragrância fina ou um produto de consumo, um composto alcanal substituído com arila definido acima e excluindo seletivamente da referida fragrância fina ou produto de consumo quaisquer compostos alcanais substituídos com arila, que são não substituídos no anel arila em uma posição *ortho* em relação ao substituinte que suporta a funcionalidade aldeído ou não substituído por meio de um resíduo alquenila no anel na posição *para* para o substituinte que contém a funcionalidade aldeído.

[0053] Ainda em um outro aspecto da presente invenção, é proporcionado um método para conferir características de odor verde a uma fragrância fina ou produto de consumo, tal como uma composição de higiene pessoal ou de cuidados domésticos, compreendendo a etapa de adicionar a ela um composto alcanal substituído com arila definido acima, e excluindo seletivamente da referida fragrância fina ou produto de consumo quaisquer compostos alcanais substituídos com arila, os quais são não substituídos no anel arila em uma posição *ortho* ao substituinte que suporta a funcionalidade aldeído ou não substituído por um resíduo alquenila no anel na posição *para* para o substituinte contendo aldeído, sendo a referida adição ou exclusão seletiva baseada na susceptibilidade dos referidos compostos à degradação mediada enzimaticamente nos seus derivados de ácido benzoico quando incubados com hepatócitos isolados de ratos, sendo os referidos compostos adequados para adição com base no fato de não se degradarem a seus derivados de ácido benzoico sob condições de teste ou se degradam para derivados de ácido benzoico não tóxicos, enquanto que os referidos compostos são excluídos na base de que se degradam nos seus derivados de ácido benzoico sob condições de teste.

[0054] Ainda em um outro aspecto da presente invenção, é proporcionada uma composição de perfume compreendendo um composto alcanal substituído com arila que suporta um substituinte alquenila no anel arila para um substituinte que suporta a funcionalidade de aldeído e/ou um substituinte metila no anel em uma posição *ortho* ao grupo que ostenta a funcionalidade aldeído, em um recipiente adequado, juntamente com rotulagem que não contém qualquer classificação CMR2.

[0055] Os produtos de consumo, tais como as composições de higiene pessoal e doméstica incluem, mas não estão limitados a, um produto de tratamento têxtil, um auxiliar de engomar, um pano de limpeza, um detergente para a roupa, um produto de limpeza, em particular, para superfícies duras e/ou um produto de higiene, um produto de cuidado doméstico, um produto de cuidado de lavagem, um produto de cuidado de roupa, um fragrante de quarto e ambientador de ar, um condicionador, um corante, um condicionador de tecido, um substrato de condicionamento, um produto farmacêutico, um alimento, um produto cosmético, um fertilizante, um material de construção, um adesivo, uma lixívia, um descalcificador, um produto de autocuidado, produto de cuidado de chão, produto de cozedura, produto de cuidado de couro ou de cuidado de móveis, esfregão, desinfetante, fragrante, removedor de mofo e/ou um precursor dos produtos acima mencionados.

[0056] A pessoa que é versada na técnica está perfeitamente ciente da aplicabilidade dos ingredientes de perfume, e as composições para aplicações de fragrâncias finas, bem como todas as formas de aplicações de produtos de consumo, tais como composições de higiene pessoal e de cuidados domésticos e uma descrição muito detalhada de tais composições não é garantida na presente invenção. Contudo, as composições específicas que podem ser mencionadas incluem

composições de limpeza; composições de autocuidado; composições cosméticas; composições de tratamento têxtil e composições de ambientador e de tratamento de ar.

[0057] Os produtos de limpeza incluem: -

[0058] Produtos de limpeza de toucadores ou de lavatório, isto é, produtos para a limpeza de vasos sanitários e urinóis, sendo estes produtos fornecidos de preferência sob a forma de pós, blocos, comprimidos ou líquidos, de preferência géis. Além de outros ingredientes típicos tais como tensoativos, eles geralmente incluem ácidos orgânicos, por exemplo ácido cítrico e/ou ácido láctico) ou hidrogenossulfato de sódio, ácido amidossulfúrico ou ácido fosfórico para remoção de calcário ou escala de urina;

[0059] Os produtos de limpeza de tubos ou produtos de limpeza de drenos. Estes são tipicamente produtos fortemente alcalinos que servem em geral para remover bloqueios de tubos compreendendo materiais orgânicos tais como cabelos, gorduras, resíduos alimentares, depósitos de sabão e semelhantes. As adições de pó de Al ou pó de Zn podem servir para a formação de gás H₂ com efeito de efervescência. Possíveis ingredientes são comumente álcalis, sais alcalinos, agentes oxidantes e sais neutros. As formas de fornecimento na forma de pó incluem de preferência também nitrato de sódio e cloreto de sódio. Os produtos de limpeza de tubos na forma líquida podem, de preferência, também incluir hipoclorito. Existem também produtos de limpeza de drenos baseados em enzimas também. Os produtos ácidos também são possíveis;

[0060] Detergentes universais ou "lava tudo" ou para fins gerais. Estes são limpadores que podem ser usados universalmente para todas as superfícies duras na casa e no comércio que pode ser varrido tanto molhado quanto úmido. De um modo geral, são produtos neutros ou ligeiramente alcalinos ou ligeiramente ácidos, especialmente produ-

tos líquidos. Os produtos de limpeza para fins gerais ou "lava tudo" contêm geralmente tensoativos, aditivos, solventes e hidrótropos, corantes, conservantes e semelhantes;

[0061] Os produtos de limpeza para uso geral com propriedades desinfetantes especiais. Eles adicionalmente incluem ingredientes ativos antimicrobianos (por exemplo, aldeídos, álcoois, compostos de amônio quaternário, tensoativos anfotéricos, triclosano);

[0062] Sanitários. Estes são produtos para a limpeza no banho e no toalete. Os produtos de limpeza sanitários alcalinos são utilizados de preferência para remover a sujidade gordurosa, enquanto que os produtos de limpeza sanitários ácidos são utilizados em particular, para remover o calcário. Os produtos de limpeza sanitários têm vantajosamente também uma ação desinfetante considerável, particularmente os produtos de limpeza sanitários fortemente alcalinos que contêm cloro;

[0063] Limpadores de fornos ou produtos de limpeza de grelhas que podem ser fornecidos sob a forma de géis ou sprays de espuma. Geralmente servem para remover restos de alimentos queimados ou carbonizados. De preferência, os produtos de limpeza para fornos são fornecidos com uma formulação fortemente alcalina utilizando, por exemplo, hidróxido de sódio, metassilicato de sódio, 2-aminoetanol. Além disso, contêm geralmente tensoativos aniônicos e/ou não iônicos, solventes solúveis em água e, em alguns casos, de agentes de espessamento tais como policarboxilatos e carboximetilcelulose;

[0064] Polidores metálicos. Estes são produtos de limpeza para tipos particulares de metal, como aço inoxidável ou prata. Os agentes de limpeza em aço inoxidável contêm de preferência, além de ácidos (de preferência até 3% em peso, por exemplo, ácido cítrico, ácido lático), tensoativos (em particular até 5% em peso, de preferência tensoativos não iônicos e/ou aniônicos) (de preferência até 15% em peso)

para remover a sujidade gordurosa, e também outros compostos tais como agentes de espessamento e conservantes. Estruturas de polimento muito finas estão incluídas, além disso, em produtos para superfícies de preferência brilhantes de aço inoxidável. Os polimentos de prata, por sua vez, podem ser proporcionados em uma formulação acídica. Em particular, para remoção de depósitos pretos de sulfureto de prata contêm, de preferência, agentes complexantes (por exemplo, tioureia, tiossulfato de sódio). As formas de fornecimento típicas são panos de polimento, banhos de imersão, pastas e líquidos. As descolorações escuras (camadas de óxido) são removidas usando produtos de limpeza de cobre e produtos de limpeza de metais não ferrosos (por exemplo, para latão e bronze). Eles geralmente têm uma formulação fracamente alcalina (de preferência com amoníaco) e, em geral, contêm agentes de polimento e também, de preferência, sabões de amônio e/ou agentes complexantes;

[0065] Limpadores de vidro e limpadores de janelas. Estes produtos servem de preferência para remover a sujidade, especialmente sujeira gordurosa, das superfícies de vidro. De preferência, contêm compostos tais como tensoativos aniônicos e/ou não iônicos (em particular até 5% em peso), amoníaco e/ou etanolamina (em especial até 1% em peso), etanol e/ou 2-propanol, éteres de glicol (em particular, 10-30% em peso), água, conservantes, corantes, agentes antineblina e semelhantes;

[0066] Produtos de limpeza para fins especiais, como por exemplo os de vitrocerâmica, e também produtos de limpeza para tapetes e removedores de manchas.

[0067] Os produtos de autocuidado incluem: -

[0068] Protetores de tinta, abrillantadores para tintas, limpadores de tintas, conservantes de lavagem, shampoos para produtos de lavagem automática, autolavagem e cera, polidores para metais com aca-

bamento, filmes protetores para metais com acabamento, produtos para limpeza de plásticos, removedores de alcatrão, limpadores de tela, limpadores de motores e similares.

[0069] Os produtos cosméticos incluem: -

(A) cosméticos produtos de cuidados da pele, especialmente produtos de banho, produtos de lavagem da pele e de limpeza, produtos de cuidados da pele, maquiagem dos olhos, produtos para cuidados dos lábios, produtos para cuidados das unhas, produtos de cuidados íntimos;

(B) Produtos cosméticos com efeitos específicos, nomeadamente protetores solares, produtos de bronzeamento, produtos de despigmentação, desodorizantes, antiperspirantes, depiladores, produtos de barbear, perfumes;

(C) Produtos para cuidados dentários cosméticos, em especial produtos para cuidados dentários e orais, produtos para cuidados dentários, produtos de limpeza para próteses dentárias, adesivos para próteses dentárias; e

(D) cosméticos produtos para o cuidado do cabelo, especialmente shampoos para cabelo, produtos para o cuidado do cabelo, produtos para a fixação do cabelo, produtos para modelar o cabelo e produtos para coloração do cabelo.

[0070] Os produtos de tratamento têxtil incluem: -

[0071] Detergentes ou condicionadores de tecido, por exemplo, na forma líquida ou sólida.

[0072] Ambientadores e fragrâncias do quarto incluem: -

[0073] Os produtos que contêm de preferência compostos voláteis e geralmente cheiros agradáveis que vantajosamente podem mesmo em quantidades muito pequenas mascarar odores desagradáveis. Os purificadores de ar para áreas de habitação contêm, em particular, óleos essenciais naturais e sintéticos tais como óleos de agulha de

pinheiro, óleo de citrino, óleo de eucalipto, óleo de lavanda e seme-lhantes, em quantidades, por exemplo, até 50% em peso. Como aerossóis, tendem a conter quantidades menores de tais óleos essenciais, a título de exemplo, inferiores a 5% ou inferiores a 2% em peso, mas adicionalmente incluem compostos tais como acetaldeído (em particular < 0,5% em peso), álcool isopropílico (em particular, < 5% em peso), óleo mineral (em particular, < 5% em peso) e propulsores. Outras formas de apresentação incluem varas e blocos. São produzidos tipicamente utilizando um concentrado de gel compreendendo óleos essenciais. É também possível adicionar formaldeído (para preservação) e clorofila (de preferência < 5% em peso), e também outros ingredientes. Ambientadores não são, no entanto, restritos a espaços de vida, mas também podem ser destinados a automóveis, armários, máquinas de lavar louça, refrigeradores ou sapatos, e até mesmo a sua utilização em aspiradores de pó é uma possibilidade. No agregado (por exemplo, em armários), por exemplo, além dos melhoradores de odor, são também utilizados desinfetantes, contendo de preferência compostos tais como fosfato de cálcio, talco, estearina e óleos essenciais, estes produtos assumindo a forma, por exemplo, de sachês.

[0074] As composições de produtos de consumo referidas acima, particularmente aquelas para utilização em aplicações de lavagem ou limpeza podem conter uma ou mais das seguintes substâncias:

[0075] As substâncias formadoras, os tensoativos, as enzimas, os agentes branqueadores, tais como de preferência os compostos peroxigenados orgânicos e/ou inorgânicos, os ativadores peroxigenados, os solventes orgânicos miscíveis em água, os agentes sequestradores, os eletrólitos, os reguladores de pH, os de espessamento e outros adjuvantes tais como substâncias ativas, branqueadores ópticos, inibidores de cinza, inibidores de transferência de cor, reguladores de espuma e corantes.

[0076] O tensoativo inclui tensoativos aniónicos, tensoativos não iônicos e as misturas dos mesmos, mas também tensoativos catiônicos, são apropriados. Tensoativos não iônicos adequados são, em particular, produtos de etoxilação e/ou propoxilação de alquil glicosídeos e/ou de álcoois lineares ou ramificados possuindo cada um 12 a 18 átomos de carbono na porção alquila e 3 a 20, de preferência 4 a 10 grupos alquil éter. Também utilizáveis são produtos de etoxilação e/ou propoxilação correspondentes de N-alquilaminas, dióis vicinais, ésteres de ácidos graxos e amidas de ácidos graxos que correspondem, em termos da porção alquila, aos derivados de álcool de cadeia longa acima mencionados e de alquilfenóis com 5 a 12 átomos de carbono no resíduo alquila.

[0077] Os tensoativos aniónicos adequados incluem sabões, e aqueles que contêm grupos sulfato ou sulfonato tendo de preferência íons alcalinos como cátions. Os sabões incluem sais alcalinos dos ácidos graxos saturados ou não saturados possuindo 12 a 18 átomos de carbono. Tais ácidos graxos podem também ser utilizados em uma forma incompleta neutralizada. Entre os tensoativos utilizáveis do tipo sulfato encontram-se os sais dos semiésteres de ácido sulfúrico de álcoois graxos com 12 a 18 átomos de carbono e os produtos sulfatados dos tensoativos não iônicos anteriormente mencionados com um baixo grau de etoxilação. Entre os tensoativos utilizáveis do tipo sulfonato refere-se alquilbenzenossulfonatos lineares com 9 a 14 átomos de carbono na porção alquila, alcanossulfonatos possuindo 12 a 18 átomos de carbono e olefinsulfonatos com 12 a 18 átomos de carbono que são produzidos por meio da reação das mono-olefinas correspondentes com trióxido de enxofre, bem como ésteres de ácido alfa-sulfo-graxos que são produzidos por meio da sulfonação de ésteres de metila ou de etila de ácidos graxos.

[0078] Os tensoativos catiônicos incluem os compostos de amônio

quaternário (QACs) e/ou os esterquats. Os QACs podem ser produzidos por meio da reação de aminas terciárias com agentes alquilantes tais como cloreto de metila, cloreto de benzila, sulfato de dimetila, brometo de dodecila, mas também óxido de etileno. A alquilação de aminas terciárias com um resíduo alquila longo e dois grupos metila ocorre com particular facilidade e a quaternização de aminas terciárias com dois resíduos longos e um grupo metila pode também ser realizada utilizando cloreto de metila em condições suaves. As aminas que possuem três resíduos de alquila longos ou resíduos de alquila substituídos com hidróxi têm baixa reatividade e são quaternizadas, por exemplo, utilizando sulfato de dimetila. Os QACs adequados são, por exemplo, cloreto de benzalcônio (cloreto de N-alquil-N,N-dimetilbenzilamônio), benzalcônio B (cloreto de m,p-diclorobenzil dimetyl-C12-alquilamônio), cloreto de benzoxônio (cloreto de benzildodecylbis(2-hidroxietil)amônio), brometo de cetrímônio (brometo de N-hexadecil-N,N-trimetilamônio), cloreto de benzetônio (N,N-dimetil-N-[2-[2-[p-(1,1,3,3-tetrametilbutil)-fenóxi] etóxi] etil] benzilamônio), cloretos de dialquildimetilamônio tais como cloreto de di-n-decildimetilamônio, brometo de didecildimetilamônio, cloreto de dioctildimetilamônio, cloreto de 1-cetilpiridínio e iodeto de tiazolina, assim como as misturas dos mesmos. Os QACs preferidos são os cloretos de benzalcônio possuindo resíduos alquila C8 a C22, em particular C12 a C14 alquilbenzildimetilamônio.

[0079] Os esterquats incluem os metossulfatos de metilhidroxialquildialcoioxialquilamônio comerciais comercializados pela empresa Stepan sob a marca registrada StepanexTM, ou os produtos da Cognis Deutschland GmbH conhecidos sob o nome comercial DehyquatTM, ou os produtos RewoquatTM da Goldschmidt-Witco.

[0080] Os tensoativos podem ser utilizados em quantidades de 5% em peso a 50% em peso em um produto de consumo da presente in-

venção.

[0081] Os construtores incluem os aditivos orgânicos e/ou inorgânicos solúveis em água e/ou insolúveis em água. Em particular, os mesmos incluem as substâncias orgânicas hidrossolúveis que são os ácidos policarboxílicos, mais particularmente o ácido cítrico e os ácidos açucarados, os ácidos aminopolicarboxílicos monoméricos e poliméricos, em particular o ácido metilglicinacético, o ácido nitrilatriacético e o ácido etilenodiaminotetracético, bem como o ácido poliaspártico, os ácidos polifosfônicos, em particular ácido aminotris (ácido metilenofosfônico), ácido etilenodiaminotetraquino (ácido metilenofosfônico) e ácido 1-hidroxietano-1,1-difosfônico, compostos hidróxi poliméricos tais como dextrina, bem como ácidos poliméricos (poli) carboxílicos, ácidos acrílicos poliméricos, ácidos metacrílicos, Ácidos maleicos e os polímeros mistos dos mesmos, que também podem conter pequenas proporções de substâncias polimerizáveis sem funcionalidade ácido carboxílico. O peso molecular relativo dos homopolímeros de ácidos carboxílicos insaturados é geralmente entre 5000 e 200.000, o dos copolímeros entre 2000 e 200.000, baseado em cada caso em ácido livre. Os compostos adequados desta classe são copolímeros de ácido acrílico ou ácido metacrílico com éteres de vinila, tais como éteres vinilmetílicos, ésteres de vinila, etileno, propileno e estireno, em que a proporção de ácido é igual a pelo menos 50% em peso. É também possível utilizar, como substâncias orgânicas hidrossolúveis, terpolímeros que contêm dois ácidos insaturados e/ou os seus sais como monômeros e, como terceiro monômero, álcool de vinila e/ou um derivado de álcool de vinila ou um hidrato de carbono. O primeiro monômero ácido ou seu sal pode ser derivado de um C3 a C8 ácido carboxílico etenicamente monoinsaturado. O segundo monômero ácido ou um sal do mesmo pode ser um derivado de um C4 a C8 ácido dicarboxílico, por exemplo ácido maleico. A terceira unidade monomérica é

constituída por álcool de vinila e/ou um álcool de vinila esterificado. Os polímeros podem conter 60% em peso a 95% em peso, em particular 70% em peso a 90% em peso, ácido (met) acrílico ou (met) acrilato, bem como 5% em peso a 40% em peso de álcool de vinila e/ou acetato de vinila. Os polímeros particulares são aqueles em que a razão em peso de (met) ácido acrílico respectivamente (met)acrilato para ácido maleico ou maleato está entre 1: 1 e 4: 1. Tanto as quantidades como as proporções em peso são baseadas nos ácidos. O segundo monômero ácido ou um sal do mesmo pode também ser um derivado de um ácido alilsulfônico que está substituído na posição 2 com um radical alquila, por exemplo, um radical C1 a C4 alquila, ou com um radical aromático que pode ser derivado de derivados de benzeno ou benzeno. Os terpolímeros podem conter 40% em peso a 60% em peso, em particular 45 a 55% em peso, ácido (met) acrílico ou (met) acrilato, particularmente de preferência ácido acrílico ou acrilato, 10% em peso a 30% em peso, de preferência 15% em peso a 25% em peso de ácido metalilsulfônico ou metalilsulfonato, e como terceiro monômero 15% em peso a 40% em peso, de preferência 20% em peso a 40% em peso de um carbohidrato. Este carbohidrato pode ser, por exemplo, um mono-, di-, oligo- ou poli-sacarídeo, por exemplo, sacarose. Os terpolímeros têm geralmente um peso molecular relativo entre 1000 e 200000. Outros copolímeros incluem aqueles que compreendem, como monômeros, acroleína e sais de ácido acrílico/ácido acrílico ou acetato de vinila. Especialmente para a fabricação de detergentes líquidos, as substâncias formadoras orgânicas podem ser utilizadas na forma de soluções aquosas, por exemplo, soluções aquosas de 30 a 50% em peso. Todos os ácidos referidos acima na presente invenção podem ser utilizados na forma dos seus sais solúveis em água, em particular os seus sais alcalinos.

[0082] Podem ser empregadas substâncias orgânicas para cons-

trutores em quantidades de até 40% em peso.

[0083] Os materiais adjuvantes inorgânicos solúveis em água incluem silicatos alcalinos e polifosfatos, por exemplo, trifosfato de sódio. Os aluminossilicatos alcalinos cristalinos ou amorfos, por exemplo, os aluminossilicatos de sódio cristalinos, podem também ser empregados como materiais adjuvantes inorgânicos insolúveis em água e dispersáveis em água, em quantidades até 50% em peso, por exemplo. Os aluminossilicatos compreendem tipicamente partículas com um tamanho de partícula inferior a 30 µm.

[0084] Os silicatos alcalinos cristalinos podem também ser utilizados, isoladamente ou utilizados com silicatos amorfos. Os silicatos alcalinos utilizáveis nos produtos de consumo da presente invenção como adjuvantes de detergência podem ter uma razão molar de óxido alcalino para SiO₂ inferior a 0,95, em particular de 1: 1,1 a 1:12, e podem estar presentes de forma amorfa ou cristalina. Os silicatos alcalinos podem ser silicatos de sódio, em particular os silicatos de sódio amorfos, com uma razão molar de Na₂O: SiO₂ de 1: 2 a 1: 2,8.

[0085] As substâncias construtoras podem estar contidas em composições de produtos de consumo de acordo com a presente invenção a níveis até 60% em peso.

[0086] Os compostos peroxigenados incluem perácidos orgânicos ou sais perácidos de ácidos orgânicos tais como ácido ftalimidoperca-prônico, ácido perbenzoico ou sais de ácido diperdodecanodioico, peróxido de hidrogênio e sais inorgânicos que libertam peróxido de hidrogênio em condições de aplicação, tais como perborato, percarbonato e/ou persilicato. Se forem utilizados compostos peroxigenados sólidos, podem ser utilizados sob a forma de pós ou granulados, os quais, em princípio, também podem ser revestidos de uma forma conhecida.

[0087] Os compostos peroxigenados podem ser empregados em quantidades até 50% em peso. Pode ser útil a adição de pequenas

quantidades de estabilizadores de agentes branqueadores conhecidos, por exemplo fosfonatos, boratos, respectivamente metaboratos e metassilicatos, bem como sais de magnésio tais como sulfato de magnésio.

[0088] Os compostos que, sob condições de perhidrólise, produzem ácidos peroxocarboxílicos alifáticos com de preferência 1 a 10 átomos de carbono, em particular 2 a 4 átomos de carbono e/ou ácido perbenzoico (opcionalmente substituído), podem ser utilizados como ativadores de branqueamento. São adequadas as substâncias que contêm os grupos O- e/ou N-acila com o referido número de átomos de carbono e/ou grupos benzoíla opcionalmente substituídos. As alquilenodiaminas aciladas múltiplas, em particular a tetraacetiletlenodiamina (TAED), os derivados de triazina acilados, em particular a 1,5-diacetil-2,4-dioxohexahidro-1,3,5-triazina (DADHT), os glicolurilas acilados, em particular o tetraacetilglicoluril (TAGU), N-acilimidas, em particular N-nonanoil succinimida (NOSI), fenolsulfonatos acilados, em particular n-nonanoíla ou isononanoiloxibenzenossulfonato (n- ou iso-NOBS), anidridos de ácido carboxílico, em particular anidrido de ácido ftálico, álcoois polivalentes acilados, triacetina, diacetato de etilenoglicol, 2,5-diacetóxi-2,5-dihidrofurano e ésteres de enol, bem como sorbitol e manitol acilados, respectivamente, as misturas dos mesmos (SORMAN), derivados de açúcar acilados, em particular penta-acetylglucose (PAG), penta-acetylfructose, tetra-acetylxylose e octa-acetyl-lactose, bem como glutamina e gluconolactona aciladas, opcionalmente N-alquiladas, e/ou lactamas N-aciladas, por exemplo N-benzoilcaprolactama. Podem igualmente ser utilizados acetatos e acil lactamas substituídos hidrofilicamente. Também podem ser utilizadas as combinações de ativadores de branqueamento convencionais. Tais ativadores de branqueamento podem estar contidos na gama de quantidades habituais, de preferência em quantidades de 1% em peso a

10% em peso, em particular 2% em peso a 8% em peso, com base no agente completo.

[0089] Adicionalmente ou em vez dos ativadores de branqueamento convencionais acima mencionados, sulfoniminas e/ou sais de metal de transição intensificadores de branqueamento ou complexos de metal de transição também podem estar contidos como catalisadores de branqueamento. Incluem-se entre os compostos de metais de transição apropriados, em particular, os complexos salen de manganês, ferro, cobalto, rutênio ou molibdênio e seus compostos análogos de nitrogênio, complexos carbonila de manganês, ferro, cobalto, rutênio ou molibdênio, complexos de manganês, ferro, cobalto, rutênio, molibdênio, titânio, vanádio e cobre contendo os ligantes de tripod contendo nitrogênio, complexos de amina de cobalto, ferro, cobre e rutênio. Podem igualmente ser utilizadas as combinações de ativadores de branqueamento e catalisadores de branqueamento de metal de transição. Os complexos de metal de transição intensificadores de branqueamento, em particular tendo os átomos centrais Mn, Fe, Co, Cu, Mo, V, Ti e/ou Ru, podem ser utilizados em quantidades convencionais, tais como até 1% em peso com base no peso da composição do produto de consumo.

[0090] As enzimas adequadas que podem ser utilizadas em composições são as da classe das proteases, cutinases, amilases, pululanases, hemicelulases, celulases, lipases, oxidases e peroxidases, bem como as misturas dos mesmos. São também adequadas as substâncias ativas enzimaticamente recuperadas a partir de fungos ou bactérias, tais como *Bacillus subtilis*, *Bacillus licheniformis*, *Streptomices griseus*, *Humicola lanuginosa*, *Humicola insolens*, *Pseudomonas pseudoalcaligenes* ou *Pseudomonas cepacia*. As enzimas que são utilizadas conforme aplicável podem ser adsorvidas sobre substâncias veiculares e/ou incorporadas em substâncias envolventes para as pro-

teger da inativação prematura. Podem estar contidas em produtos de lavagem de acordo com a presente invenção em quantidades tipicamente inferiores a 5% em peso.

[0091] Os abrillantadores ópticos incluem derivados do ácido diaminostilbenedissulfônico ou dos sais de metais alcalinos dos mesmos. São adequados, por exemplo, os sais do ácido 4,4'-bis (2-anilino-4-morfolino-1,3,5-triazinil-6-amino) estileno-2,2'-dissulfônico, ou compostos de estrutura semelhante os quais contêm em vez do grupo morfolino, um grupo dietanolamino, um grupo metilamino, um grupo anilino ou um grupo 2-metoxietilamino. Os abrillantadores do tipo difenilestirila substituído também podem estar presentes, por exemplo, os sais alcalinos de 4,4'-bis (2-sulfostiril)difenila, de 4,4'-bis (4-cloro-3-sulfostiril)difenila ou de 4-(4-cloroestiril)-4'-(2-sulfostiril)difenila. Podem também ser utilizadas as misturas dos branqueadores ópticos referidas anteriormente na presente invenção.

[0092] Os inibidores de espuma incluem organopolissiloxanos e as misturas dos mesmos com ácido silícico microfino, opcionalmente silanado, bem como ceras de parafina e as misturas dos mesmos com ácido silícico silanado ou alquilenodiamidas de ácido bis-graxo. Podem também ser utilizadas as misturas de diferentes inibidores de espuma, por exemplo aqueles feitos de silicones, parafinas ou ceras. Os inibidores de espuma, em particular inibidores de espuma contendo silicone e/ou parafina, estão de preferência ligados a uma substância veículo granular que é solúvel ou dispersível em água. Em particular, podem ser utilizadas as misturas de parafinas e bisteariletlenodiamida.

[0093] As substâncias ativas de libertação do solo são os compostos que influenciam positivamente a capacidade dos óleos e gorduras serem lavados dos têxteis. Este efeito torna-se particularmente evidente quando o têxtil sujo é um que já foi previamente lavado várias vezes com um agente de lavagem de acordo com a presente invenção que

contém este componente de libertação de óleo e gordura. Os componentes de libertação de óleo e gordura preferidos incluem, por exemplo, éteres de celulose não iônicos tais como metil celulose e metilhidroxipropil celulose tendo uma proporção de 15 a 30% em peso de grupos metóxi e uma proporção de 1 a 15% em peso de grupos hidroxipropoxila, com base em cada caso dos éteres de celulose não iônicos, bem como polímeros, conhecidos da técnica existente, de ácido ftálico e/ou ácido tereftálico respectivo de seus derivados com dióis monoméricos e/ou poliméricos, em particular polímeros de tereftalatos de etileno e/ou tereftalatos de polietilenoglicol ou seus derivados modificados anionicamente e/ou não.

[0094] Os inibidores de transferência de cor incluem polímeros de vinilpirrolidona, vinilimidazol, N-óxido de vinilpiridina, ou copolímeros dos mesmos. Também utilizáveis são tanto polivinilpirrolidonas com pesos moleculares de 15.000 a 50.000 e polivinilpirrolidonas com pesos moleculares acima de 1.000.000, em particular de 1.500.000 a 4.000.000, copolímeros de N-vinilimidazol/N-vinilpirrolidona, poliviniloxazolidonas, copolímeros à base de monômeros de vinilas e amidas de ácido carboxílico, Poliésteres e poliamidas contendo os grupos pirrolidona, poliamidoaminas enxertadas e polietileniminas, polímeros com grupos amida constituídos por aminas secundárias, polímeros de N-óxido de poliamina, álcoois de polivinila e copolímeros à base de ácidos acrilamido-alquenilsulfônicos. É também possível, no entanto, utilizar os sistemas enzimáticos que englobam uma peroxidase e peróxido de hidrogênio ou uma substância que produz peróxido de hidrogênio em água.

[0095] Os inibidores de granulação são aqueles materiais que mantêm a sujidade que foi separada das fibras têxteis suspensas em um meio de lavagem. São adequados coloides solúveis em água, normalmente de natureza orgânica, por exemplo amido, tamanho, ge-

latina, sais de ácidos etercarboxílicos ou etersulfônicos de amido ou de celulose, ou sais de ésteres ácidos de ácido sulfúrico de celulose ou de amido. Também são adequadas para esta finalidade as poliamidas solúveis em água contendo os grupos ácidos. Podem também ser utilizados derivados de amido diferentes dos mencionados acima, por exemplo, amidos de aldeído. Podem ser utilizados éteres de celulose tais como carboximetilcelulose (sal de sódio), metilcelulose, hidroxialquilcelulose e éteres mistos tais como metilhidroxietilcelulose, metilhidroxipropilcelulose, metilcarboximetilcelulose e as misturas dos mesmos, por exemplo em quantidades de 0,1 a 5% em peso com base no peso do produto de consumo.

[0096] Os solventes orgânicos incluem álcoois com 1 a 4 átomos de carbono, em particular metanol, etanol, isopropanol e terc-butanol, dióis com 2 a 4 átomos de carbono, em particular etilenoglicol e propilenoglicol, bem como as misturas dos mesmos e os éteres deriváveis a partir das classes de compostos referidas anteriormente na presente invenção. Os solventes miscíveis com água deste tipo estão presentes nos produtos de lavagem de acordo com a presente invenção em quantidades que não excedem tipicamente 30% em peso.

[0097] Os reguladores de pH incluem ácido cítrico, ácido acético, ácido tartárico, ácido mágico, ácido láctico, ácido glicólico, ácido succínico, ácido glutárico e/ou ácido adípico, mas também os ácidos minerais, em particular ácido sulfúrico ou bases, em particular hidróxidos de amônio ou hidróxidos alcalinos. Os reguladores de pH deste tipo estão contidos nos agentes de acordo com a presente invenção em quantidades de preferência não superiores a 20% em peso, em particular desde 1,2% em peso a 17% em peso.

[0098] Os compostos podem ser particularmente utilizados para perfumar os produtos domésticos contendo enzimas, tais como os definidos acima, e em particular produtos de tratamento têxtil, tais como

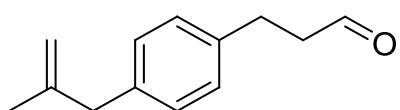
detergentes, contendo as enzimas.

[0099] Seguem-se agora uma série de exemplos que servem para ilustrar melhor a presente invenção.

[00100] Em geral, os compostos da presente invenção podem ser preparados a partir de 1,4-di-halo-benzenos comercialmente disponíveis, por exemplo, 1,4-dibromobenzeno, por meio de uma reação de acoplamento cruzado, por exemplo, uma reação de acoplamento de Negishi com um composto de organozinco do tipo R_1ZnCl , para introduzir R_1 , seguido de uma segunda reação de acoplamento cruzado, por exemplo, uma reação de acoplamento de Heck com um álcool alílico (substituído), para introduzir a cadeia portadora de aldeído. Alternativamente, a reação de acoplamento de Heck pode ser realizada com um éster de ácido acrílico, conduzindo a um éster cinâmico, que é subsequentemente reduzido com um reagente hidreto, por exemplo, hidreto de alumínio e lítio, para formar um álcool di-hidrocinâmico, que é então oxidado para o aldeído por meio dos métodos correntes. Alternativamente, a cadeia portadora de aldeído pode ser ligada a um benzaldeído substituído com *para*- R_1 por meio das reações de elongação de cadeia, conhecidas por meio das pessoas que são versadas na técnica de síntese orgânica e subsequente hidrogenação seletiva dos aldeídos cinâmicos a aldeídos di-hidrocinâmicos de tal modo que não seja para reduzir a porção olefínica de R_1 .

[00101] Os compostos da presente invenção com $R_2 = Me$ podem ser preparados por meio da *p*-alquilação de o-cresol com o haleto de alila requerido, isto é R_1Cl , seguido por meio da transformação do fenol resultante em um triflato que é então submetido a reações de acoplamento de Heck como descrito acima.

Exemplo 1: 3-(4-(2-Metilalil)fenil)propanal

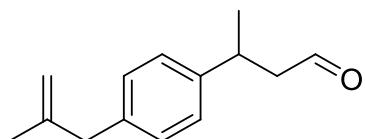


[00102] Dissolveu-se 2-(di-terc-butilfosfino)-1-fenil-1H-indol (0,21 g, 0,61 mmol) e bis (dibenzilidenoacetona) paládio (0) (0,131 g, 0,227 mmol) em dimetilformamida (9 mL) a solução foi agitada sob uma atmosfera de argônio durante 20 min. Em seguida adicionou-se N-ciclohexil-N-metilciclo-hexanamina (3,55 g, 18,2 mmols), 1-bromo-4-(2-metilalil) benzeno (descrito em S. Yasuda, *Materials* **2009**, 2 (3), 978 a 991; 15,2 mmols) e álcool alílico (2,64 g, 45,5 mmols) foram adicionados e a mistura resultante foi aquecida a 100°C durante 3 horas, depois resfriada até à temperatura ambiente. Diluiu-se a mistura com éter metil t-butílico e lavou-se com água, Solução HCL aquosa a 1N e salmoura. Secou-se a camada orgânica sobre MgSO₄ e concentrou-se i. Rv O resíduo foi purificado por meio da cromatografia rápida em coluna sobre SiO₂ com hexano/acetato de etila (19: 1) como eluente para isolar 3-(4-(2-metilalil)fenil)propanal como um óleo incolor (*R_f* = 0,19, 2,1 g, 73%).

[00103] ¹H RMN (400 MHz, CDCl₃): δ = 9,83 (t, *J*=1,5 Hz, 1H), 7,14 (s, 4H), 4,82 (d, *J*=0,7 Hz, 1H), 4,78 - 4,65 (m, 1H), 3,31 (s, 2H), 2,96 (t, *J*=7,8 Hz, 2H), 2,82 - 2,75 (m, 2H), 1,72 - 1,66 (br, s, 3H) ppm, ¹³C RMN (100 MHz, CDCl₃): δ = 201,7 (d), 145,1 (s), 137,9 (s), 137,7 (s), 129,1 (d), 128,2 (d), 111,8 (t), 45,3 (t), 44,2 (t), 27,7 (t), 22,0 (q) ppm, GC-MS (EI, 70 eV): 188 (M⁺), 170 (5), 155 (5), 145 (60), 144 (60), 129 (100), 117 (66), 105 (66), 91 (72), 77 (21), 55 (24), 39 (22).

[00104] Odor: floral, verde, ciclamen, aquoso.

Exemplo 2: 3-(4-(2-Metilalil)fenil)butanal



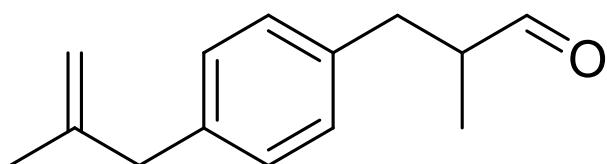
[00105] O procedimento acima descrito para o exemplo 1 foi repetido com as mesmas quantidades de catalisador, amina, solvente e 1-bromo-4-(2-metilalil) benzeno mas substituindo álcool alílico por (E)-but-2-en-1-ol (3,28 g, 45,6 mmols, 3 equiv.) para isolar 3-(4-(2-

metilalil)fenil)butanal após purificação por meio da cromatografia em coluna rápida em SiO₂ (eluição com hexano/acetato de etila 19: 1) sob a forma de um óleo incolor = 0,22, 0,7 g, 23%).

[00106] ¹H RMN (400 MHz, CDCl₃): δ = 9,70 (t, *J*=1,9 Hz, 1H), 7,13 (s, 4H), 4,80-4,78 (m, 1H), 4,72-4,71 (m, 1H), 3,33 (sext, *J*=7,2 Hz, 1H), 3,31 (s, 2H), 2,68 (qd, *J*=6,9, 2,3 Hz, 2H), 1,70 (br, s, 3H), 1,30 (d,, *J*=7,0 Hz, 3H) ppm, ¹³C RMN (100 MHz, CDCl₃): δ = 202,0 (d), 145,1 (s), 143,2 (s), 138,0 (s), 129,2 (d), 126,7 (d), 111,9 (t), 51,8 (t), 44,2 (t), 34,0 (d), 22,2 (q), 22,1 (q) ppm. GC-MS (EI, 70 eV): 202 (M⁺, 4), 187 (3), 169 (2), 159 (48), 147 (100), 143 (17), 129 (28), 117 (48), 105 (23), 91 (45), 77 (9), 55 (41).

[00107] Odor: floral, verde, aldeídico, aquoso, amanteigado.

Exemplo 3: 2-Metil-3-(4-(2-metilalil)fenil)propanal



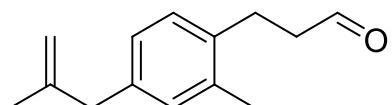
[00108] O procedimento acima descrito para o exemplo 1 foi repetido com 47% das quantidades de catalisador, amina, solvente e 1-bromo-4-(2-metilalil) benzeno e substituindo álcool alílico por 2-metilprop-2-en-1-ol (1,0 g, 13,4 mmols, 3 equiv.) para isolar 2-metil-3-(4-(2-metilalil)fenil)propanal após purificação por meio da cromatografia rápida em coluna sobre SiO₂ (eluição com hexano/acetato de etila 19: 1) como um óleo incolor (*R*f = 0,38, 0,75 g, 80%).

[00109] ¹H RMN (400 MHz, CDCl₃): δ = 9,70 (d, *J*=1,5 Hz, 1H), 7,13-7,03 (m, 4H), 4,80-4,79 (m, 1H), 4,72-4,71 (m, 1H), 3,28 (s, 2H), 3,06 (dd, *J*=13,4, 5,6 Hz, 2H), 2,67-2,55 (m, 2H), 1,67 (br, s, 3H), 1,08 (d, *J*=6,9 Hz, 3H) ppm, ¹³C RMN (100 MHz, CDCl₃): δ = 204,5 (d), 145,1 (s), 137,9 (s), 136,5 (s), 129,1 (d), 128,9 (d), 111,9 (t), 48,1 (d), 44,2 (t), 36,3 (t), 22,1 (q), 13,2 (q) ppm. GC-MS (EI, 70 eV): 202 (M⁺, 13), 184 (1.5), 169 (1.5), 159 (2), 145 (100), 129 (36), 117 (37), 105

(15), 91 (44), 77 (10), 55 (11), 39 (10).

[00110] Odor: aldeídico, metálico, aquoso, gorduroso.

Exemplo 4: 3-(2-metil-4-(2-metilalil)fenil)propanal



[00111] 3-(2-metil-4-(2-metilalil)fenil)propanal foi obtido em 3 etapas como descrito abaixo:

A) 2-metil-4-(2-metilalil)fenol

[00112] O-Cresol (54,1 g, 0,5 mol) foi suspenso em água e adicionou-se KOH (36,5 g, 0,65 mol, 1,3 equiv.) sob agitação intensa. A temperatura subiu para 45°C e formou-se uma solução cinza-amarela, a qual foi agitada durante mais 20 minutos e depois resfriada a 10°C. A esta temperatura, adicionou-se gota a gota 3-cloro-2-metilprop-1-eno (58,9 g, 0,65 mol, 1,3 equiv.) ao longo de 15 min. A mistura resultante foi agitada intensamente durante 6 dias, depois diluída com tolueno (300 ml). Extraiu-se a camada orgânica 3 vezes com NaOH aquoso a 2 N (500 ml cada). Às camadas de água alcalinas combinadas adicionou-se tolueno (300 ml) e, sob resfriamento em banho de gelo, HCl aquoso (350 ml). As camadas foram separadas e a camada aquosa foi adicionalmente extraída com tolueno. As camadas orgânicas combinadas foram lavadas até neutralidade com salmoura, depois secas sobre MgSO₄ e concentradas. O resíduo foi destilado sobre uma coluna de Vigreux a 60 Pa (0,06 mbar)/76 a 83°C para isolar 2-metil-4-(2-metilalil)fenol (36,2 g, 45%, pureza 92%, restante produto o-alquilado) como um óleo incolor.

[00113] ¹H RMN (400 MHz, CDCl₃): δ = 6,92 (br, s, 1H), 6,87 (dd, J = 8,0, 1,8 Hz, 1H), 6,87 (d, J = 8,0, Hz, 1H), 4,90 (s, 1H), 4,78-4,77 (m, 1H), 4,71-4,70 (m, 1H), 3,20 (s, 2H), 2,20 (s, 3H), 1,66 (s, 3H) ppm, ¹³C RMN (100 MHz, CDCl₃): δ = 152,1(s), 145,7 (s), 132,0 (s), 131,6 (d),

127,5 (d), 123,7 (s), 114,8 (d), 111,6 (t), 43,9 (t), 22,0 (q), 15,8 (q) ppm.

B) 3-(2-metil-4-(2-metilalil)fenil)acrilato de etila

[00114] 2-metil-4-(2-metilalil)fenol (5,0 g, 30,8 mmols) foi dissolvido em diclorometano (60 mL) e adicionou-se piridina (4,63 g, 58,6 mmols, 1,9 equiv.) e a solução foi resfriada a 0°C. Depois adicionou-se anidrido trifluorometanossulfônico (diclorometano a 1M, 32,4 ml, 32,4 mmols, 1,05 equiv) através de um funil de adição e agitou-se a solução resultante durante 3 horas. Em seguida, a solução de HCl aquosa a 2 N (10 ml) foi adicionada gota a gota. A camada aquosa foi separada e a camada orgânica foi lavada com solução aquosa de NaHCO₃ e salmoura, depois secou-se sobre MgSO₄ e concentrou-se i. Rv para se obter 8,9 g (98%) de trifluorometanossulfonato de 2-metil-4-(2-metilalil)fenila sob a forma de um óleo ligeiramente amarelo. Para a reação subsequente de acoplamento de Heck, este produto (30,2 mmols) foi dissolvido em dimetilformamida (50 mL), e foi adicionado acrilato de etila (5,75 g, 57,5 mmols, 1,9 equiv.), seguido de trietilamina (15,0 g, 148 mmols, 4,9 equiv.). A solução resultante foi purgada com argônio durante 10 minutos, depois adicionou-se dicloreto de bis (trifenilfosfina) paládio (II) (1,06 g, 1,51 mmol, 5% molar) e a mistura foi agitada durante 6 dias a 80°C sob uma atmosfera de argônio. A mistura foi diluída com MTBE, lavada com água e salmoura, depois seca sobre MgSO₄ e concentrada i. Rv O resíduo foi purificado por FC em SiO₂ (eluição com hexano/acetato de etila 19: 1) para dar 3-(2-metil-4-(2-metilalil)fenil) acrilato de (E)-etila sob a forma de um óleo incolor (R_f = 0,21, 3,9 g, 53%).

[00115] ¹H RMN (400 MHz, CDCl₃): δ = 7,95 (d, J=15,9 Hz, 1H), 7,48 (d, J=8,5 Hz, 1H), 7,02 (d, s, 2H), 6,34 (d, J=15,9 Hz, 1H), 4,83-4,82 (m, 1H), 4,75-4,74 (m, 1H), 4,26 (q, J=7,1 Hz, 2H), 3,28 (s, 2H), 2,42 (s, 3H), 1,67 (s, 3H), 1,34 (t, J=7,1 Hz, 3H) ppm, ¹³C RMN (100 MHz, CDCl₃): δ = 167,2 (s), 144,6 (s), 142,2 (d), 142,0 (s), 137,7 (s),

131,4 (d), 127,0 (d), 126,4 (d), 118,5 (d), 112,3 (t), 60,4 (t), 44,4 (t), 22,1 (q), 19,8 (q), 14,4 (q) ppm.

C) 3-(2-metil-4-(2-metilalil)fenil)propanal

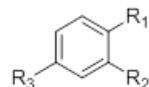
[00116] Adicionou-se, gota a gota, 3-(2-metil-4-(2-metilalil)fenil) acrilato de etila (2,0 g, 8,2 mmols) a uma suspensão de LiAlH₄ (0,47 g, 12,2 mmols, 1,5 equiv.) Em Et₂O (40 mL) A 10°C. A mistura resultante foi agitada à temperatura ambiente sob atmosfera de argônio durante 18 horas. Em seguida, adicionou-se cuidadosamente água (0,47 g) a 10°C, seguido de solução aquosa de NaOH a 15% (0,47 ml) e finalmente novamente água (0,9 ml). Após agitação da suspensão formada durante uma hora, o precipitado foi filtrado e o filtrado foi concentrado para dar um óleo incolor (1,7 g). Este óleo (8,3 mmols) foi dissolvido em diclorometano (5 mL) e a solução adicionada à solução de periodinano de Dess-Martin (4,24 g, 10 mmols, 1,2 equiv.) em diclorometano (25 mL). A mistura foi agitada durante duas horas, depois diluída com MTBE e lavada com solução aquosa de NaHCO₃, água e salmoura. O resíduo obtido após secagem sobre MgSO₄ e concentração foi purificado por FC em SiO₂ (eluição com hexano/acetato de etila 19: 1) para dar o composto em epígrafe como um óleo incolor. (R_f = 0,14, 0,60 g, 36%).

[00117] ¹H RMN (400 MHz, CDCl₃): δ = 9,84 (d, J=1,4 Hz, 1H), 7,04 (d, J=7,5, 1H), 6,97 (s, 1H), 6,96 (d, J=8,2, 1H), 4,79 (m, 1H), 4,73-4,72 (m, 1H), 3,25 (s, 2H), 2,93-2,89 (m, 2H), 2,74-2,70 (m, 2H), 2,28 (s, 3H), 1,67 (s, 3H) ppm, ¹³C RMN (100 MHz, CDCl₃): δ = 201,8 (d), 145,2 (s), 137,9 (s), 136,1 (s), 135,8 (s), 131,0 (d), 128,4 (d), 126,7 (d), 111,8 (t), 44,2 (t), 44,1 (t), 25,1 (t), 22,1 (q), 19,3 (q) ppm, GC-MS (EI, 70 eV): 202 (M⁺, 36), 187 (8), 184 (18), 169 (21), 159 (86), 143 (100), 131 (88), 117 (33), 115 (48), 105 (39), 91 (33), 77 (15).

[00118] Odor: floral, aldeídico, verde, ceroso, cinâmico, lilás

REIVINDICAÇÕES

1. Composto, caracterizado pelo fato de que é representado pela fórmula I



fórmula I

em que

R_1 é $-(\text{CH}\text{R}_4)_m-(\text{CH}\text{R}_5)_n-(\text{CH}\text{R}_6)_o-\text{CHO}$, com R_4 , R_5 , R_6 sendo selecionados independentemente entre H ou Me, e sendo m, n, o selecionados independentemente entre 0 e 1;

R_2 é Me; e

R_3 é um resíduo C3-C6 alqu-2-enila ramificado, linear ou cílico.

2. Composto de acordo com a reivindicação 1, caracterizado pelo fato de que o resíduo alqu-2-enila é selecionado dentre alila, 2-metilalila, 2-metilenobutila, 3-metilbut-2-en-1-ila, 3-metilbut-3-en-2-ila e but-2-en-1-ila.

3. Uso de um composto como definido na reivindicação 1 ou 2, caracterizado pelo fato de ser como um ingrediente de perfume.

4. Composição de perfume, caracterizada pelo fato de que comprehende um composto como definido na reivindicação 1 ou 2.

5. Composição de perfume de acordo com a reivindicação 4, caracterizada pelo fato de que está substancialmente livre de quaisquer odorantes propanais substituídos por arila que são não substituídos no anel arila em uma posição orto em relação ao substituinte que suporta a funcionalidade aldeído.

6. Composição de perfume de acordo com a reivindicação 4 ou 5, caracterizada pelo fato de que comprehende um ou mais ingredientes de fragrância adicionais, em particular 3-(4-isobutil-2-metilfenil)propanal.

7. Composição para uso pessoal ou de cuidados domésticos, caracterizada pelo fato de que compreende pelo menos um composto como definido na reivindicação 1 ou uma composição de perfume como definida em qualquer uma das reivindicações 4 a 6.

8. Composição para uso pessoal ou de cuidados domésticos de acordo com a reivindicação 7, caracterizada pelo fato de que compreende ainda enzimas.

9. Composição para uso pessoal ou de cuidados domésticos de acordo com a reivindicação 8 ou 9, caracterizada pelo fato de que se trata de um produto de tratamento têxtil.

10. Composição para uso pessoal ou de cuidados domésticos de acordo com qualquer uma das reivindicações 7 a 9, caracterizada pelo fato de ser uma composição detergente.