



PI07057210
PI07057210

REPÚBLICA FEDERATIVA DO BRASIL
MINISTÉRIO DO DESENVOLVIMENTO, INDÚSTRIA E COMÉRCIO EXTERIOR
INSTITUTO NACIONAL DA PROPRIEDADE INDUSTRIAL

CARTA PATENTE Nº PI 0705721-0

O INSTITUTO NACIONAL DA PROPRIEDADE INDUSTRIAL concede a presente PATENTE DE INVENÇÃO, que outorga ao seu titular a propriedade da invenção caracterizada neste título, em todo o território nacional, garantindo os direitos dela decorrentes, previstos na legislação em vigor.

(21) Número do Depósito: PI 0705721-0

(22) Data do Depósito: 04/09/2007

(43) Data da Publicação do Pedido: 20/05/2008

(51) Classificação Internacional: A61K 8/11; A61Q 13/00; A61K 8/87; A61Q 5/12; C11D 3/50; D06M 13/00

(30) Prioridade Unionista: 04/09/2006 EP 06 300 921.1

(54) Título: FRAGRÂNCIA ENCAPSULADA COMPREENDENDO UMA CÁPSULA CASCA-NÚCLEO E UMA COMPOSIÇÃO DE FRAGRÂNCIA E COMPOSIÇÃO DE CUIDADO PESSOAL, LAVANDERIA OU DE USO DOMÉSTICO.

(73) Titular: TAKASAGO INTERNATIONAL CORPORATION, Sociedade Japonesa. Endereço: 5-37-1, Kamata, Ohta-Ku, Tokyo, Japão (JP).

(72) Inventor: JONATHAN WARR; EMMANUEL AUSSANT; STUART BERNARD FRASER

Prazo de Validade: 20 (vinte) anos contados a partir de 04/09/2007, observadas as condições legais.

Expedida em: 20 de Outubro de 2015.

Assinado digitalmente por:

Júlio César Castelo Branco Reis Moreira
Diretor de Patentes

"FRAGRÂNCIA ENCAPSULADA COMPREENDENDO UMA CÁPSULA CASCA-NÚCLEO E UMA COMPOSIÇÃO DE FRAGRÂNCIA E COMPOSIÇÃO DE CUIDADO PESSOAL, LAVANDERIA OU DE USO DOMÉSTICO"

CAMPO DA INVENÇÃO

5 A invenção refere-se a composições que serão incorporadas no núcleo de cápsulas, tipo casca de núcleo para controlar a distribuição e liberação de fragrância e opcionalmente outros agentes benéficos, quando empregados como componentes em produtos cosméticos e de cuidado pessoal, domésticos. Princi-
10 palmente, a invenção refere-se às cápsulas de casca de núcleo feitas pela condensação de formaldeído com melamino e/ou uréia como os monômeros principais ao redor de uma emulsão dos materiais de núcleo, entretanto este não é pretendido excluir as cápsulas feitas por outros processos tal como co-acervação, ou
15 precipitação ou para limitar is monômeros empregados para sintetizar a parede da cápsula para aminas e aldeídos.

A invenção também refere-se ao uso destas cápsulas em limpadores domésticos, produtos de lavanderia, produtos cosméticos e de cuidado pessoal na forma de líquido, géis,
20 cremes, pó, ou sólidos macios; nos quais a distribuição e liberação das fragrâncias e opcionalmente outros agentes benéficos, são controladas.

ANTECEDENTES DA INVENÇÃO

A composição é conhecida por encapsular perfumes
25 insolúveis em água ou outros materiais, em cápsulas pequenas geralmente chamadas de microcápsulas, tipicamente tendo um diâmetro menor do que 1000 micrômetros (microns), por uma variedade de razões relacionando-se com a proteção, libera-

ção e distribuição do perfume ou outro material. A preparação de microcápsulas é descrita em Kirt Othmer's Encyclopaedia of Chemical Technology, 5ª edição e também na seguinte Patente U.S. 2.800.457 e Patente U.S. 3.115.758 e citações desta e patente U.S. 6.261.483 e referências destas. Um tipo de cápsula, referido como uma parede ou casca ou cápsula casca-núcleo, compreende uma casca geralmente esférica de material insolúvel em óleo e água, tipicamente um material de polímero de rede, no qual o perfume ou outro material está contido.

Se tais cápsulas são incorporadas em produtos de consumo contendo certos solventes e/ou emulsificantes ou tensoativos, por exemplo, produtos de cuidado pessoal tal como desodorantes, pulverizadores ou xampus para cabelo, produtos de lavanderia tal como condicionadores de tecido ou detergentes de lavanderia líquidos e limpadores domésticos tal como limpadores de superfície de cozinha, problemas podem surgir com o material encapsulado que tende a lixiviar das cápsulas, e ser solubilizado no produto com o passar do tempo, diminuindo a liberação de cápsulas de seus materiais de núcleo. A patente U.S. 4.284.627 ensina a incorporação de materiais não poliméricos hidrofóbicos com a fragrância para controlar a liberação de perfume. Entretanto, isto envolve uma diluição da fragrância ou agente benéfico.

O Pedido de Patente U.S. 2006/0154378 refere-se a um método para medir a lixiviação do material encapsulado em um meio de aplicação empregando uma diálise ou filtração para separar as moléculas de ingrediente ativo das cápsulas.

O Pedido de Patente U.S. 2005/153135 ensina uma variedade de métodos para reduzir a lixiviação de perfume formulando-se a fragrância de materiais que são substancialmente insolúveis em água, adicionando-se um óleo ou polímero à fragrância para reduzir a separação. Ao mesmo tempo em que tais medições reduzem a taxa de escapamento, elas não previnem e podem ter outras conseqüências indesejáveis tal como a redução do impacto da fragrância.

O pedido de patente U.S. 2006/0039934 ensina que a adição de polímeros, ou aos teores do núcleo antes da encapsulação, ou no exterior das cápsulas, pode reduzir o vazamento. Novamente isto se adiciona ao custo e a complexidade de processamento envolvida na fabricação das cápsulas.

Apesar destes ensinamentos, ainda há uma necessidade de modos para minimizar a perda de fragrância durante o armazenamento e a presente invenção objetiva tratar tais problemas de estabilidade.

SUMÁRIO DA INVENÇÃO

É um objetivo da presente invenção fornecer uma composição de fragrância que pode ser incorporada em uma cápsula casca-núcleo de modo que no armazenamento em limpadores domésticos, produtos de lavanderia, produtos cosméticos e de cuidado pessoal, na forma de líquidos, géis, cremes ou sólidos macios, pouca fragrância escape no produto em armazenamento, porém que não afete o desempenho da cápsula em uso.

Surpreendentemente isto pode ser obtido formulando-se as fragrâncias com uma proporção elevada de moléculas

volumosas, isto é, uma mistura de moléculas que em virtude da disposição dos átomos na molécula são muito volumosas ou inflexíveis para passar facilmente através das paredes da cápsula. Para ser efetiva, uma proporção significativa da
5 fragrância deve ser composta de moléculas volumosas da invenção.

DESCRIÇÃO DETALHADA DA INVENÇÃO

Isto é, a presente invenção refere-se aos seguintes itens 1 a 22.

10 1. Uma composição de fragrância a ser incorporada no núcleo de uma cápsula casca-núcleo compreendendo:

(I) 60-100% em peso de pelo menos 5 compostos de fragrância, 20-100% em peso dos referidos compostos de
15 um peso molecular menor do que 325 unidades de massa atômica, de acordo com a seguinte estrutura:

(a) moléculas contendo mais do que um anel, cada contendo 5 ou 6 átomos de carbono, nenhum átomo sendo compartilhado por quaisquer dos anéis;

20 (b) moléculas tendo pelo menos dois anéis, cada anel tendo entre 3 e 6 átomos nos quais qualquer anel compartilha um átomo comum;

(c) moléculas tendo pelo menos dois anéis, cada anel contendo 5 ou 6 átomos de carbono, nos quais todos dois
25 anéis compartilham pelo menos dois átomos comuns adjacentes;

(d) moléculas contendo um anel alicíclico único que contém pelo menos 5 átomos, porém não mais do que 8 átomos, de qualquer do carbono, oxigênio, nitrogênio ou enxofre

no qual pelo menos um dos átomos de carbono do anel tem dois substituintes, ou um átomo de carbono alfa para o anel é átomo de carbono terciário, ou o anel tem substituintes em pelo menos três dos átomos que compõem o anel;

5 (e) moléculas contendo pelo menos um anel macrocíclico, que é um anel tendo mais do que oito átomos no anel;

 (f) moléculas contendo pelo menos um anel de benzeno substituído porém no qual pelo menos um grupo de substituintes possui um carbono terciário em uma posição alfa ou
10 betano anel;

 (g) moléculas contendo um anel aromático substituído compreendendo pelo menos 5 átomos com pelo menos 3 grupos substituintes no anel todos dos quais devem conter pelo menos 2 átomos dentre carbono, oxigênio, nitrogênio ou enxofre; e
15

(II) 0-40% em peso de pró-fragrâncias, solventes, e outros agentes benéficos que possuem quaisquer das características estruturais de (a) a (f) porém não são limitados pelas restrições de peso molecular.

20 2. A composição de fragrância de acordo com o item 1, onde os pesos moleculares dos ingredientes de fragrância individual encontram-se na faixa de 100 a 300 unidades de massa atômica e 80% a 100% em peso de moléculas volumosas têm valores ClogP maiores do que 1,0.

25 3. A composição de fragrância de acordo com o item 1, onde os pesos moleculares dos ingredientes de fragrância individual encontram-se na faixa de 100 a 275 unidades de massa atômica e 80% a 100% em peso de moléculas volumosas

têm valores ClogP maiores do que 1,0.

4. Uma composição de fragrância a ser incorporada no núcleo de uma cápsula casca-núcleo compreendendo 60-100% em peso de moléculas volumosas de acordo com o item 1.

5 5. Uma composição de fragrância a ser incorporada no núcleo de uma cápsula casca-núcleo compreendendo 80-100% em peso de moléculas volumosas de acordo com o item 1.

6. Uma composição de fragrância a ser incorporada no núcleo de uma cápsula casca-núcleo compreendendo:

10 (I) 60-100% em peso de pelo menos 5 compostos de fragrância, 20-100% em peso dos referidos compostos de fragrância compreendidos de pelo menos 3 moléculas volumosas tendo um peso molecular menor do que 275 unidades de massa atômica, possuindo qualquer das seguintes características
15 estruturais:

(a) moléculas contendo mais do que um anel, cada anel tendo entre 3 e 8 átomos de quaisquer do carbono, oxigênio, nitrogênio ou enxofre em qualquer anel e átomos sendo compartilhado por quaisquer dos anéis;

20 (b) moléculas tendo pelo menos dois anéis, tal anel tendo entre 3 e 8 átomos de qualquer do carbono, oxigênio, nitrogênio ou enxofre no qual qualquer anel compartilha um átomo comum;

(c) moléculas tendo pelo menos dois anéis, cada
25 anel tendo entre 3 e 8 átomos de qualquer do carbono, oxigênio, nitrogênio ou enxofre no qual todos dois anéis compar-

tenham pelo menos dois átomos comuns adjacentes;

(d) moléculas contendo um anel alicíclico único que contém pelo menos 5 átomos, porém não mais do que 8 átomos, de qualquer do carbono, oxigênio, nitrogênio ou enxofre no qual pelo menos um dos átomos de carbono do anel tem dois substituintes, ou um átomo de carbono alfa para o anel é átomo de carbono terciário, ou o anel tem substituintes em pelo menos três dos átomos que compõem o anel;

(e) moléculas contendo pelo menos um anel macrocíclico, que é um anel tendo mais do que oito átomos de qualquer do carbono, nitrogênio, oxigênio ou enxofre no anel;

(f) moléculas contendo pelo menos um anel aromático substituinte contendo pelo menos 5 átomos de qualquer do carbono, oxigênio, nitrogênio ou enxofre, porém no qual pelo menos um substituinte tem um carbono terciário em uma posição alfa ou beta no anel; e

(II) 0-40% em peso de pró-fragrâncias, solventes, e outros agentes benéficos que possuem quaisquer das características estruturais de (a) a (g) porém não são limitados pelas restrições de peso molecular.

7. A composição de fragrância, de acordo com o item 1 ou 6, onde 40-100% em peso dos ingredientes da fragrância têm valores ClogP entre ClogP 1,00 e ClogP 4,00.

8. A composição de fragrância, de acordo com o item 1 ou 6, onde 60-100% em peso dos ingredientes da fragrância têm valores ClogP entre ClogP 1,00 e ClogP 4,00.

9. A composição de fragrância, de acordo com o item 1 ou 6, onde 80-100% em peso dos ingredientes da fra-

grância têm valores ClogP entre ClogP 1,00 e ClogP 4,00.

10. A composição de fragrância, de acordo com o item 1 ou 6, onde mais do que 25% da quantidade originalmente encapsulada em peso dos componentes de fragrância individuais sobrevivem ao armazenamento durante 4 semanas a 40°C, quando dosado em 0,5% de óleo de fragrância encapsulado quando disperso em uma solução aquosa de 10% (peso/peso) de sulfato de dodecila de sódio tamponado em pH de 8,5.

11. A composição de fragrância, de acordo com o item 1 ou 6, onde mais do que 50% da quantidade originalmente encapsulada em peso dos componentes de fragrância individuais sobrevivem ao armazenamento durante 4 semanas a 40°C, quando dosado em 0,5% de óleo de fragrância encapsulado quando disperso em uma solução aquosa de 10% (peso/peso) de sulfato de dodecila de sódio tamponado em pH de 8,5.

12. A composição de fragrância, de acordo com o item 1 ou 6, contendo 0-40% em peso de um ou mais agentes benéficos nos quais os agentes benéficos são selecionados entre o grupo consistindo em agentes neutralizantes de mau odor, óleos essenciais, materiais aromaterapêuticos, agentes quimioestéticos, vitamina, repelentes de inseto, pró-fragrância, absorventes de UV, antioxidantes e agentes para melhorar as propriedades da cápsula tal como:

(a) estabilizando-se a emulsão durante a fabricação da cápsula,

(b) reduzindo-se o vazamento da cápsula,

(c) melhorando-se a dureza da cápsula.

13. A composição de fragrância, de acordo com o

item 1 ou 6, onde a fragrância contém menos do que 20% em peso de aldeídos.

14. A composição de fragrância, de acordo com o item 1 ou 6, onde a fragrância contém menos do que 10% em
5 peso de aminas.

15. Uma fragrância encapsulada, compreendendo uma casca de núcleo tendo uma espessura de 0,025-1,0 μm e uma composição de fragrância de acordo com o item 1 ou 6.

16. Uma fragrância encapsulada, de acordo com o
10 item 15, onde a casca da cápsula é uma cápsula de aminoplas-
to constituída de 50-100% em peso de polímero de condensação
de formaldeído-melamino ou formaldeído-melamino-uréia ou
formaldeído-uréia.

17. Uma fragrância encapsulada, de acordo com o
15 item 15, onde o tamanho médio da cápsula é entre 1-1000 mi-
crômetros.

18. Uma composição de cuidados pessoais, lavande-
ria ou de uso doméstico, que está na forma de um líquido,
gel, pasta, sólido macio, ou líquido aplicado a um substrato
20 fibroso tal como um pano para limpeza, contendo um ou mais
dos tensoativos e/ou solventes contendo a cápsula casca-
núcleo de acordo com qualquer uma das reivindicações de 1 a 17.

19. A composição de cuidados pessoais, lavanderia
ou de uso doméstico, de acordo com o item 18, que está na
25 forma de um líquido tendo uma viscosidade maior do que 100
mPa.s em 5 s^{-1} .

20. A composição de cuidados pessoais, lavanderia
ou de uso doméstico, de acordo com o item 18, que está na

forma de um líquido tendo uma viscosidade maior 1000 mPa.s em $5s^{-1}$.

21. A composição de cuidados pessoais, lavanderia ou de uso doméstico, de acordo com o item 18, onde a composição é um detergente de lavanderia líquido, um amaciante de
5 tecido líquido, um xampu de cabelo, um condicionador de cabelo, um sabão líquido, um gel para banho, ou um impregnado líquido em panos para cuidado pessoal ou de uso doméstico.

22. Um método para distribuição de perfumes às su-
10 perfícies, que compreende contatar a superfície com a composição de acordo com qualquer uma das reivindicações 18 a 20 com a cápsula contendo a composição de acordo com qualquer uma das reivindicações 1 a 17, opcionalmente diluída com água, ou distribuída de um utensílio de lavagem adequado de
15 um tal modo que as cápsulas distribuam seus teores ou diretamente na aplicação ou subseqüentemente.

Os seguintes explicam a presente invenção em detalhes.

Composição de Perfume

No contexto deste relatório descritivo uma "compo-
20 sição e perfume", que é também chamada "composição de fragrância", é uma parte essencial da invenção. O termo "composição de perfume" significa qualquer mistura, isto é, mais do que umas espécies químicas, incluindo os materiais que atuam como contra-atuantes de mau odor. Uma ampla variedade
25 de materiais odoríferos é conhecida para uso em perfumaria, incluindo materiais tal como alcenos, álcoois, aldeídos, cetonas, ésteres, éteres, nitrilas, aminas, oximas, acetais, cetais, tióis, tiocetonas, iminas, etc. Sem desejar está

limitado, os ingredientes da composição de perfume terão pesos moleculares menores do que 325 unidades de massa atômica, preferivelmente menores do que 300 unidades de massa atômica e mais preferivelmente menores do que 275 unidades de massa atômica para garantir que volatilidade suficiente seja notável quando as cápsulas liberarem. Além disso, os compostos de perfume terão pesos moleculares maiores do que 100 unidades de massa atômica, preferivelmente maiores do que 120 unidades de massa atômica, quando massas menores puderem ser muito voláteis ou muito solúveis em água. Os ingredientes das composições de fragrância não conterão grupos funcionais fortemente ionizantes tal como sulfonatos, sulfatos, ou íons de amônio quaternário.

Os óleos de animais e plantas de ocorrência natural e os exsudados compreendendo misturas complexas de vários componentes químicos são também conhecidos para uso como perfumes, e tais materiais podem ser empregados aqui. Sabe-se que os componentes químicos principais de maior parte naturais, estão dentro dos limites, e desse modo para a maioria, eles podem ser avaliados do mesmo modo como substâncias químicas de aroma sintéticas. As composições de perfume da presente invenção podem ser relativamente simples em sua composição com um mínimo de dois ingredientes de perfume ou fragrância ou podem compreender misturas altamente complexas de componentes químicos sintéticos e naturais, escolhidos por fornecerem qualquer odor desejado. Isto é preferido se a composição de perfume contém mais do que 5 componentes, mais preferivelmente se a composição de perfume

contém mais do que 8 componentes. Os ingredientes de perfume são descritos mais completamente em S. Arctander, *Perfume Flavors and Chemicals*, Vols. I e II, Montclair, N.J., e o Merck Index, 8^a Edição, Merck & Co., Inc., Rahway, N.J., ambos estão incorporados aqui por referência.

Moléculas de Fragrância Volumosas

As moléculas volumosas da invenção são definidas como moléculas adequadas para uso em perfume tendo disposições moleculares de átomos que ou por disposição dos átomos ou por rigidez conformacional, os torna incapazes, ou somente capazes de passar muito lentamente, através da casca da cápsula. Muitas moléculas podem adotar orientações que as permitirão passar através de espaços pequenos. Por exemplo, uma molécula tal como n-hexanol pode adotar várias conformações por que todos os fragmentos de metileno são relativamente tal como cicloexanol, as unidades de metileno são limitadas serem menos flexíveis.

Um isômero de n-hexanol, 2,2-dimetilbutanol é também mais volumoso do que o hexanol por causa do padrão de substituição nas moléculas. Estes aspectos de estereoquímica são bem conhecidos por aqueles versados na técnica e ensinados em muitos livros didáticos padrões tal como "Organic Chemistry" de Clayden, Greeves, Wadren e Wothers Oxford University Press 2001. Descobriu-se que os compostos da invenção aparentemente em virtude da disposição dos átomos ou por ter cadeias laterais ramificantes ou por possuir estruturas de anel nas moléculas, escapam em grau mais limitado através das paredes de cápsulas de casca de núcleo quando armazena-

dos em produtos líquido contendo tensoativos e/ou solventes do que outras moléculas de perfumaria não possuindo estas características. Os compostos da invenção exibem qualquer das seguintes características estruturais moleculares de (a) a (g) e podem ser definidos como segue:

(a) moléculas contendo mais do que um anel, cada anel tendo entre 3 e 8 átomos de qualquer do carbono, oxigênio, nitrogênio ou enxofre em qualquer anel:

As moléculas devem conter mais do que um anel ou estrutura cíclica. O anel deve ter entre 3 e 8 átomos os quais possam incluir átomos que não sejam de carbono, então chamados anéis heterocíclicos que podem incluir átomos de oxigênio, nitrogênio ou enxofre. Os anéis podem ser aromáticos, isto é, derivados de benzeno ou naftaleno, heteroaromáticos, por exemplo, pridina, pirazina, furano, tiofeno, ozazóis, etc., alicíclicos, opcionalmente incluindo a não saturação em quaisquer dos anéis, então cicloalcanos ou cicloalcenos, por exemplo, ciclopentanos, ciclopentenos, cicloexanos ou cicloezenos, tetraidrofuranos, morfolinas, dioxinas, piperidinas, piranos, etc., ou qualquer mistura dos acima. Os átomos de hidrogênio em qualquer dos anéis podem ser substituídos por átomos de carbono, oxigênio, nitrogênio ou enxofre na faixa usual de grupos funcionais orgânicos, éteres, álcoois, ésteres, aldeídos, cetonas, acetais, cetais, oximas, aminas, amidas, nitrilas, tióis e tioéteres.

Para o propósito desta patente, os seguintes termos são definidos como seguem:

Alquila é o grupo univalente deixado quando um á-

tomo de hidrogênio é removido de um hidrocarboneto alifático tal como metila, CH_3- de etano, e C_2H_5- de etano. Eles têm a fórmula geral $\text{C}_n\text{H}_{2n+1}$.

Alquildiila é o grupo divalente formado por remo-
5 ção de dois átomos de hidrogênio ou de dois átomos de carbono diferentes ou de um átomo de carbono em um hidrocarboneto alifático tal como metileno, $-\text{CH}_2-$ de metano e etildiila $-\text{C}_2\text{H}_4-$ de etano. Eles têm a fórmula geral C_nH_{2n} .

Alquenila é o grupo univalente deixado quando um
10 átomo de hidrogênio é removido de um alceno alifático tal como propenila, $\text{CH}_3=\text{CH}-\text{CH}_2-$ de propano. A menos que de outro modo especificado, os substituintes podem ter estereoisômeros cis ou trans ou podem ser uma mistura dos estereoisômeros.

15 Alquenildiila é o grupo divalente formado por remoção de dois átomos de hidrogênio ou de dois átomos de carbono diferentes ou de um único átomo de carbono em um alceno alifático tal como propenileno $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}=-$ ou propendiila como, por exemplo, $-\text{CH}=\text{C}=\text{CH}-$ de propeno. A menos que de outro
20 modo especificado, os substituintes podem ter estereoisômeros cis ou trans ou podem ser uma mistura dos estereoisômeros.

O grupo heterocíclico é o grupo univalente formado pela remoção de um átomo de hidrogênio de qualquer átomo de
25 anel de um composto heterocíclico (compostos tendo como membros do anel os átomos de pelo menos dois elementos diferentes).

Arila é o grupo monovalente derivado de um areno (um hidrocarboneto aromático monocíclico ou policíclico) por

remoção de um hidrogênio de um átomo de carbono do anel.

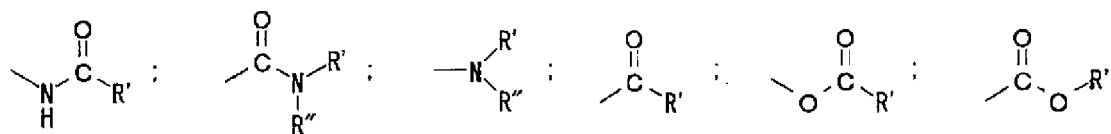
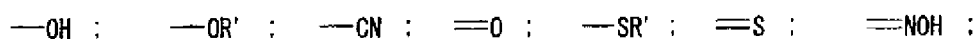
Heteroarila é o grupo deixado quando um átomo de hidrogênio é removido de um heteroareno (os heteroarenos são compostos heterocíclicos aromáticos formalmente derivados de arenos por substituição de um ou mais grupos de metano ($-C=$) e/ou vinileno ($-CH=CH-$) por heteroátomos divalentes ou tri-
valentes respectivamente de um tal modo para manter o sistema de elétron π contínuo característico de sistemas aromáticos.

Os sistemas de anel ou cíclicos são uma série de átomos que formam um anel fechado, por exemplo, cicloexano, no lugar do composto alifático de cadeia aberta. Os anéis aromáticos são aqueles capazes de passar por reações de substituição eletrofílica no lugar das reações de adição que ocorrem com os compostos não saturados não aromáticos. Eles podem também ser definido como anel planar tendo elétrons $(4n+2)\pi$ de acordo com as regras de Huckels e incluem arenos e heteroarenos.

O termo substituído que é empregado em todo este relatório descritivo significa uma unidade de substituintes que substituiu hidrogênio e para o propósito da presente invenção, os substituintes são definidos como frações químicas que podem substituir um átomo de hidrogênio em uma cadeia de hidrocarboneto alifática, um anel alicíclico, um anel de arila, um anel de heteroarila, um anel heterocíclico e outros, ou substituição de átomo de hidrogênio, dois átomos de hidrogênio ou três átomos de hidrogênio de um átomo de carbono para formar uma fração ou a substituição de átomos de

hidrogênio de átomos de carbono adjacentes para formar uma fração. Por exemplo, um substituinte que substitui um único átomo de hidrogênio inclui halogênio, hidróxila, e outros. Uma substituição de dois átomos de hidrogênio e, um único
 5 átomo de carbono inclui carbonila ou imina e outros, ao mesmo tempo em que um exemplo de um substituinte que substitui um hidrogênio em cada dos dois carbonos adjacentes é um epóxido. É muito provável que os substituintes substituam hidrogênios em átomos que possam por eles mesmos ser parte de
 10 um substituinte em outra unidade. Por exemplo, em 2-feniletanol a unidade de hidróxila é um substituinte em uma cadeia de alquila que é por si própria substituída em um anel de benzeno.

Os seguintes são exemplos não limitantes de substitu-
 15 tituintes:

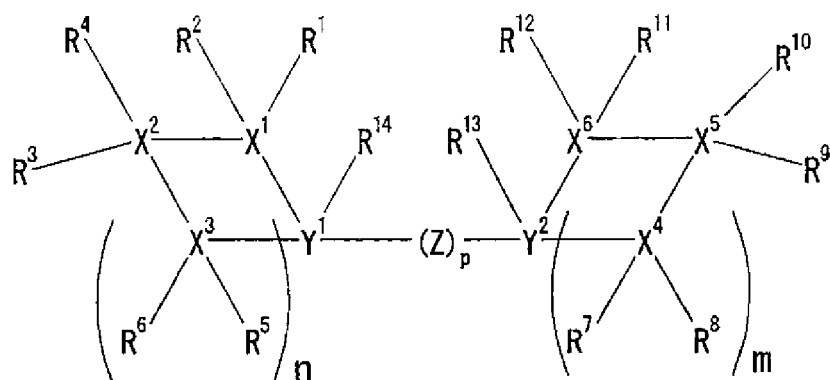


onde R' e R'' podem ser independentemente hidrogênio ou frações de alquila ramificada ou linear C₁-C₆ ou alquenila ramificada ou linear C₃-C₆, ou carbocíclica C₆-C₁₀, heterocíclico, arila ou heteroarila.

20 Outras definições de nomenclaturas químicas podem ser encontradas em "G.P. Moss, P.A.S. Smith e D. Tarvenier,

Pure and Applied Chemistry, Vol. 67, pág. 1307-1375, 1995."

Exemplo de moléculas volumosas como definido no item (a) são compostos de perfume tendo formulas moleculares da Estrutura 1:



Estrutura 1

5 onde:

- Y¹ e Y² podem ser independentemente átomos de carbono ou nitrogênio e

- X¹ a X⁶ pode ser independentemente átomos de carbono, nitrogênio, oxigênio ou enxofre;

10 - Z pode ser qualquer de

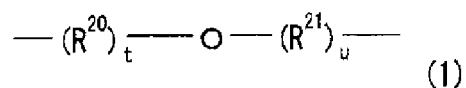
* alquildiila linear substituído ou não substituído C₁-C₆;

* alquendiila linear substituído ou não substituído C₂-C₈;

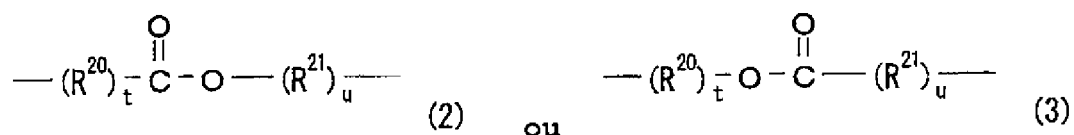
15 * alquildiila ramificada substituída ou não substituída C₂-C₈;

* alquendiila ramificada substituída ou não substituída C₂-C₈;

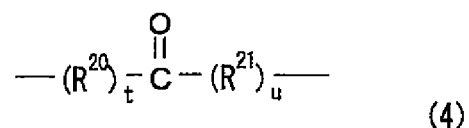
* um éter compreendendo unidade tendo a seguinte fórmula:



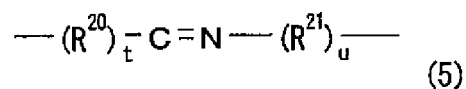
* um éster compreendendo unidade tendo qualquer das seguintes fórmulas:



5 * uma carbonila compreendendo unidade tendo a seguinte fórmula:



* uma imina compreendendo unidade tendo a seguinte fórmula:



onde nas fórmulas (1) a (5), R_{20} e R_{21} podem independentemente representar:

10

alquilidila linear substituída ou não substituída

C_1-C_8 ;

alquenidila linear substituída ou não substituí-

da C_1-C_8 ;

5 alquildila ramificada substituída ou não substi-
tuída C_1-C_8 ;

alquenildila ramificada substituída ou não subs-

tituída C_2-C_8

ao mesmo tempo em que t e u podem ser independen-

10 temente 0 ou 1;

- p pode ser igual a 0 ou 1; quando p é igual a 0

há uma ligação direta entre os átomos nos dois anéis que po-
de ser uma ligação única ou dupla (se for uma ligação dupla
então Y^1 e Y^2 deve ser carbono e R^{12} e R^{14} estarão ausentes),

15 - m e n são independentemente números inteiros en-
tre 0 a 5; —

- R^1 a R^{21} podem estar presentes dependendo dos re-
querimentos de valência dos átomos representados por X e Y e
qualquer não saturação ou aromaticidade em qualquer dos a-

20 néis;

onde presente R^1 a R^{14} podem ser independentemente:

* hidrogênio, metila ou metila substituída;

* alquila linear substituída ou não substituída

C_2-C_8

25 * alquênila linear substituída ou não substituída

C_2-C_8

* alquila ramificada substituído ou não substituí-
do C_3-C_8 ;

* alquênila ramificada substituída ou não substituída C_3-C_8 ;

* cicloalquila substituída ou não substituída C_4-C_8 ;

5 * cicloalquênila substituída ou não substituída C_4-C_8 ;

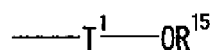
* arila substituída ou não substituída C_6-C_9 ;

* alcarila substituída ou não substituída C_6-C_9 ;

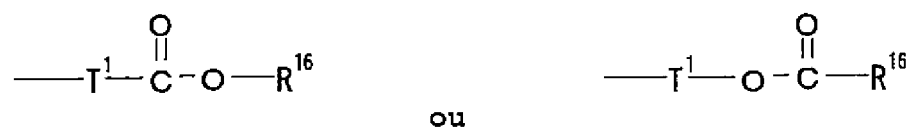
10 * heterocicloalquila substituída ou não substituída C_6-C_9 ;

* hidróxi;

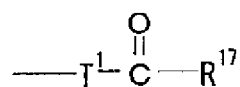
* um éter compreendendo uma unidade tendo a seguinte fórmula:



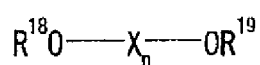
15 * um éster compreendendo uma unidade tendo a seguinte fórmula:



* uma carbonila compreendendo uma unidade tendo a seguinte fórmula:

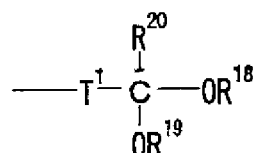


* um cetal compreendendo uma unidade substituída diretamente em um anel tendo a seguinte fórmula:

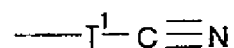


em cujo caso X_n é um átomo de carbono, n sendo 1, 2, 3, 4, 5, ou 6;

5 * um acetal ou cetal compreendendo uma unidade tendo a seguinte fórmula:



* um nitrilo compreendendo uma unidade tendo a seguinte fórmula:



onde

10 T^1 é uma ligação direta, um grupo de alquildila linear ou ramificada $\text{C}_1\text{--C}_6$ ou um grupo de alquenildiila $\text{C}_2\text{--}$

C₈;

R¹⁵, R¹⁶, R¹⁸ e R¹⁹ podem ser:

Metila ou metila substituída;

alquila linear substituída ou não substituída C₁-C₈;

5 alquênila linear substituída ou não substituída

C₁-C₈;

alquila ramificada substituído ou não substituído

C₃-C₈;

alquênila ramificada substituída ou não substituí-

10 da C₃-C₈;

cicloalquila substituída ou não substituída C₄-C₈;

cicloalquênila substituída ou não substituída C₄-

C₈;

arila substituída ou não substituída C₅-C₈;

15 alcarila substituída ou não substituída C₆-C₈;

heterocicloalquila substituída ou não substituída

C₆-C₈;

R¹⁷ e R²⁰ podem ser hidrogênio ou R¹⁶;

20 R¹⁸ e R¹⁹ podem também ser tomado junto para formar um anel espiroanelado C₃ a C₈.

Além disso, qualquer dos R¹ a R¹⁴ pode ser combinado com qualquer outro R ou no mesmo átomo de carbono ou em um átomo de carbono diferente (X) para formar outros anéis.

25 Desse modo, as moléculas deste aspecto da invenção não estão limitadas aos dois anéis. Além disso, os radicais R¹ e R²; R³ e R⁴; R⁵ e R⁶; R⁷ e R⁸; R⁹ e R¹⁰; R¹¹ e R¹² juntos com o átomo X ao qual eles estão ligados podem formar um grupo de

carbonila.

Desse modo as moléculas deste aspecto da invenção têm mais do que um anel que pode ser unido por uma ligação entre qualquer dos dois átomos de qualquer dos anéis; isto
 5 é, p é igual a zero como em Acetocetal (Takasago; 2,5,5-Trimetil-3-fenil-1,3-dioxano), ou eles podem ser ligados por grupos tal como éteres como em óxido de difenila, ésteres como em benzoato de benzila e ésteres α , β -não saturados como em cinamato de cinamila, ou iminas como em Linoma (IFF;
 10 n-{4-(4-hidróxi-4-metilpentil)-3-cicloexen-1-metileno}-antranilato de metila).

Nos compostos tendo a estrutura 1, é preferido se a maioria dos átomos X é carbono e pelo menos um dos m ou n igual a 3, mais preferivelmente ambos m e n igual a 3, onde
 15 pelo menos um ou preferivelmente ambos anéis contêm 6 átomos. É especialmente preferido se os anéis são anéis de cicloexila ou benzeno ou uma mistura dos dois qualquer um dos quais pode conter grupos substituintes. É também preferido na estrutura 1 se Z é um éster de alquila como em salicilato
 20 de benzila ou fenilacetato de feniletila ou cinamato de cinamila.

Sem desejar está restrito de qualquer modo, este grupo pode ser exemplificado por óxido de difenila (101-84-8), salicilato de benzila (118-58-1), salicilato de cicloexila (25485-88-5), fenilacetato de etila de fenila (102-20-5), n-{4-(4-hidróxi-4-metilpentil)-3-cicloexen-1-metileno}-antranilato de metila (Lyrame; IFF) (67634-12-2), Endo 4-(5-Metil-5-norbornen-2-il)-piridina (Okrinift IFF) (125352-06-

9), 2,5,5-Trimetil-2-fenil-1,3-dioxano (Acetocetal; Takasago) (6406-58-6), cicloexanol de isocanfilla (Santalex T; Takasago) (68877-29-2), 2-(2,4-Dimetil-3-cicloexil)-5-metil-5-(1-metilpropil)-1,8-dioxano (Karanal; Quest) (117933-39-8),
 5 acetal de propileno glicol de vanilina (68527-74-2), base de Schiff de Indol-Hidróxicitronelal (Indolene 50; IFF) (68908-82-7), Dimetil-2-(5',5',8',8'-tetrametil-5',6',7',8'-tetraidronaftalen-2'-il)-1,3-dioxolona (Okoumal; Givaudan) (131312-67-4), antranilato de cicloexila (7779-16-0), 2-
 10 Cicloexilideno-2-fenilacetoneitrila (10461-98-0), cinamato de cicloexila (7791-17-1), cinamato de benzila (108-41-3), eugenol de benzila (120-11-6), antranilato de cinamila (87-29-6), cinamato cinamila (122-69-0), acetato de fenila de cinamila (7492-65-1), cinamato de benzila (108-41-3), eugenol
 15 de benzila (120-11-6), antranilato de cinamila (87-29-6), cinamato de cinamila (122-69-0), acetato de fenila de cinamila (7492-65-1), 4-metil-2-feniltetraidro-2H-piran (Doremox; Firmenich) (24720-09-0), cetona de dibenzila (102-04-5), e Benzofenona (119-61-9).

20 (b) moléculas contendo pelo menos dois anéis, cada anel tendo entre 3 e 8 átomos de qualquer do carbono, oxigênio, nitrogênio ou enxofre no qual quaisquer dos dois anéis compartilham um átomo comum.

25 As moléculas tendo esta característica estrutural são chamadas anéis espiroanelados e o átomo de carbono compartilhado C é chamado de um espiro átomo. Para a invenção, os anéis espiroanelados devem conter entre 3 e 8 átomos os quais podem incluir átomos que não sejam carbono, então cha-

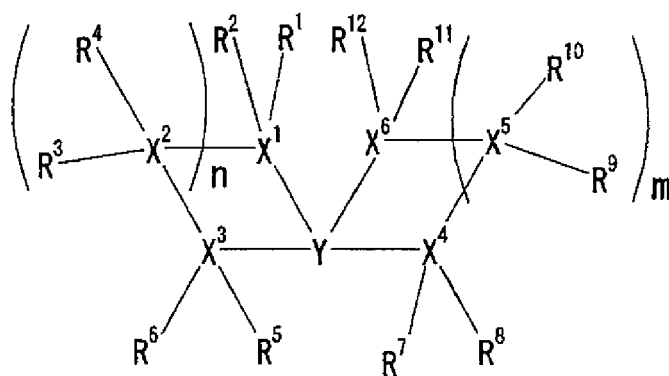
mados anéis heterocíclicos, esses podem incluir um ou mais átomos de oxigênio, nitrogênio ou enxofre no anel de éter. Os anéis espiroanelados são alicíclicos porém podem opcionalmente incluir não saturação em qualquer um ou ambos os

5 anéis como exemplificado por cicloalcanos, cicloalcenos, diidrofuranos ou tetraidrofuranos, morfollinas, dioxinas, piperidinas, oxazolidinas ou quinollinas. Os átomos de hidrogênio em qualquer dos anéis podem ser substituídos por átomos de carbono, nitrogênio, oxigênio ou enxofre na faixa usual

10 de funcionalidades orgânicas: grupos de alcano, alceno, e aliceno, éteres, álcoois, ésteres, aldeídos, cetonas, acetals, cetals, oximas, amlnas, nitrilos, tióis e tioéteres.

Exemplo das moléculas volumosas como definido no item (b) são compostos de perfume tendo as fórmulas moleculares como na Estrutura 2

15



Estrutura 2

Onde,

- Y é carbono;

- X¹ a X⁶ pode ser independentemente átomos de car-

bono, nitrogênio, oxigênio ou enxofre;

- qualquer dos R^1 a R^{12} não pode estar presente dependendo dos requerimentos de valência dos átomos representados por X e não saturação ou aromaticidade em quaisquer

5 dos anéis;

onde presente R^1 a R^{12} pode ser independentemente:

* hidrogênio, metila ou metila substituída;

* alquila linear substituída ou não substituída

C_2-C_8

10 * alquenila linear substituída ou não substituída

C_2-C_8

* alquila ramificada substituído ou não substituído C_3-C_8 ;

* alquenila ramificada substituída ou não substituída

15 C_3-C_8 ;

* cicloalquila substituída ou não substituída C_4-C_8 ;

* cicloalquenila substituída ou não substituída

C_4-C_8 ;

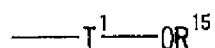
20 * arila substituída ou não substituída C_5-C_8 ;

* alcarila substituída ou não substituída C_6-C_8 ;

* heterocicloalquila substituída ou não substituída C_6-C_8 ;

* hidróxi;

25 * um éter compreendendo uma unidade tendo a seguinte fórmula:



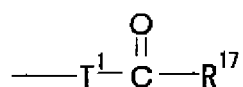
na qual T^1 e R^{15} são como definidos acima para a Estrutura 1;

* um éster compreendendo uma unidade tendo qualquer das seguintes fórmulas:



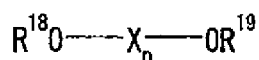
5 na qual T^1 e R^{15} são como definidos acima para a Estrutura 1:

* uma carbonila compreendendo uma unidade tendo a seguinte fórmula:



10 na qual T^1 e R^{17} são como definidos acima para a Estrutura 1:

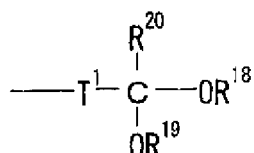
* um cetel compreendendo uma unidade diretamente substituída em um anel tendo a seguinte fórmula:



em cujo caso X_n é um átomo de carbono, n sendo 1,

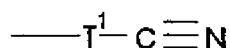
2, 3, 4, 5 ou 6;

* um acetal ou cetel compreendendo uma unidade tendo a seguinte fórmula:



na qual T^1 , R^{18} , R^{19} e R^{20} são como definidos acima
5 para Estrutura 1;

* um nitrilo compreendendo uma unidade tendo a seguinte fórmula:



na qual T^1 é como definido acima para a Estrutura
1.

10 Além disso, quaisquer dos R^1 a R^{12} podem ser combinados com qualquer outro R ou no mesmo ou em um átomo de carbono diferente (X) para formar outros anéis. Desse modo, as moléculas deste aspecto da invenção não são limitadas a dois anéis. Além disso os radicais R^1 e R^2 ; R^3 e R^4 ; R^5 e R^6 ;
15 R^7 e R^8 ; R^9 e R^{10} ; R^{11} e R^{12} juntos com o átomo X ao qual eles estão ligados podem formar um grupo de carbonila.

Desse modo, as moléculas deste aspecto da invenção são definidas compartilhando-se um átomo de carbono comum como em espirodecano. Nos compostos tendo a estrutura 2, é

preferido se a maioria dos átomos X for carbono e pelo menos um dos m ou n igual a 2 ou 8. É também preferido se X^i e X^j são independentemente átomos de oxigênio ou nitrogênio como em 1,3-dioxano ou 1,3-oxazolinás.

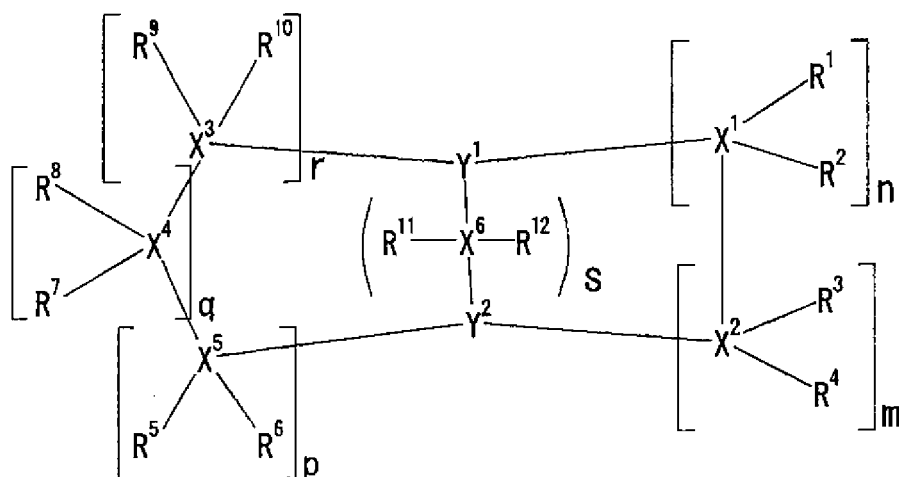
5 Sem desejar está restrito de qualquer modo, este grupo pode ser exemplificado por 2-metil-1,5-dioxaespiro [5,5] undecano (Spirodecano; IFF) (6413-23-9), 2,2,3',7',7'-Pentametilespiro(1,3-dioxan-5,2'-norcerano) (Spirambrene; Givaudan) (12151-67-0 ou 12151-68-1), Decaidro-espiro[furon-
10 2(3H), 5'-(4,7-metano-6H-indeno)] (Vigoflor, IFF) (68480-11-3), 3,3-Dimetil-1,5-Dioxaespiro[5,5]undecano (707-29-9), 4-Metil-1-oxaespiro [5-5] undeceno (Oxaspirane; IFF) (68228-06-8), 8-Metil-1-Oxaespiro[4,5]decan-2-ona (94201-19-1).

(c) moléculas tendo pelo menos dois anéis, cada
15 anel tendo entre 3 e 8 átomos de qualquer do carbono, oxigênio, nitrogênio ou enxofre no qual todos dois anéis compartilham pelo menos dois átomos comuns adjacentes;

Os anéis devem ter entre 3 e 8 átomos os quais podem incluir átomos que não sejam de carbono, então chamados
20 anéis heterocíclicos, estes podem incluir um ou mais átomos de oxigênio, nitrogênio ou enxofre em qualquer anel. Os anéis podem ser aromáticos, isto é, derivados de naftaleno, indol, piridina, pirazina furano, tiofeno, tiazóis, ozazóis ou alicíclicos opcionalmente incluindo a não saturação em
25 qualquer ou ambos anéis exemplificados por cicloalcenos, tetraidrofuranos, morfolinás, dioxanos, piperidinas, quinolinás, piranos, etc., ou uma mistura de anéis aromáticos e alicíclicos como exemplificado por indans e diidrocurmarinas

que podem também opcionalmente incluir a não saturação com os anéis. Os átomos de hidrogênio em qualquer dos anéis podem ser substituídos por átomos de carbono, nitrogênio, oxigênio ou enxofre na faixa usual de funcionalidades orgânicas: grupos de alcano, alceno, e alcina, éteres, álcoois, ésteres, aldeídos, cetonas, acetais, cetais, oximas, aminas, nitrilos, tióis e tioéteres. As moléculas ligadas por ponte tendo a estrutura exemplificada por [2,2,1] bicicloheptano e [3,2,1] biciclooctano estão também neste aspecto da invenção uma vez que elas compartilham mais do que um átomo comum entre os anéis.

Exemplo das moléculas volumosas como definido no item (c) são os compostos de perfume tendo as fórmulas moleculares como na Estrutura 3



Estrutura 3

15

Onde,

- Y^1 e Y^2 podem ser independentemente átomos de carbono ou nitrogênio;

- X' a X'' pode ser independentemente átomos de carbono, nitrogênio, oxigênio ou enxofre;

- s é igual a 0- a 3; quando s é igual a 0 há uma ligação ou dois átomos ($Y-Y$) compartilham entre dois anéis os quais podem ser uma ligação única ou dupla ou parte de uma ligação aromática como em moléculas naftalênicas;

- m , n , p , q e r são independentemente números inteiros entre 0 a 2;

- R^1 a R^{12} podem ou não podem estar presente dependendo dos requerimentos de valência dos átomos representados por X e Y , e qualquer não saturação ou aromaticidade em qualquer dos anéis;

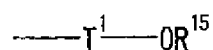
onde presente R^1 a R^{12} pode ser independentemente:

- * hidrogênio, metila ou metila substituída;
- * alquila linear substituída ou não substituída
C₂-C₈
- * alquenila linear substituída ou não substituída
C₂-C₈
- * alquila ramificada substituído ou não substituído
do C₃-C₈;
- * alquenila ramificada substituída ou não substituída
C₃-C₈;
- * cicloalquila substituída ou não substituída
C₄-C₈;
- * cicloalquenila substituída ou não substituída
C₄-C₈;
- * arila substituída ou não substituída
C₅-C₈;
- * alcarila substituída ou não substituída
C₆-C₈;

* heterocíclicaalquila substituída ou não substituída C₁-C₆;

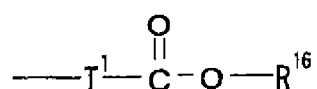
* hidróxi;

* um éter compreendendo uma unidade tendo a seguinte fórmula:

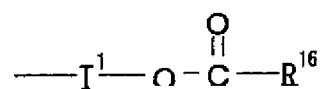


na qual T¹ e R¹⁵ são como definidos acima para a Estrutura 1;

* um éster compreendendo uma unidade tendo qualquer das seguintes fórmulas:

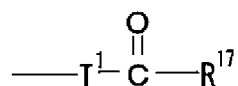


ou



na qual T¹ e R¹⁵ são como definidos acima para a Estrutura 1:

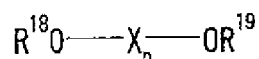
* uma carbonila compreendendo uma unidade tendo a seguinte fórmula:



na qual T¹ e R¹⁷ são como definidos acima para a

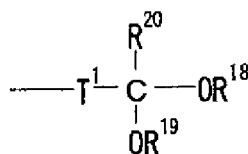
Estrutura 1:

* um cetel compreendendo uma unidade diretamente substituída em um anel tendo a seguinte fórmula:



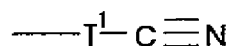
em cujo caso X_n é um átomo de carbono, n sendo 1,
5 2, 3, 4, 5 ou 6;

* um acetal ou cetel compreendendo uma unidade tendo a seguinte fórmula:



na qual T^1 , R^{18} , R^{19} e R^{20} são como definidos acima para Estrutura 1;

10 * um nitrilo compreendendo uma unidade tendo a seguinte fórmula:



na qual T^1 é como definido acima para a Estrutura 1.

Além disso, quaisquer dos R^1 a R^{12} podem ser combinados com qualquer outro R ou no mesmo ou em um átomo de
15

carbono diferente (X) para formar outros anéis. Desse modo, as moléculas deste aspecto da invenção não são limitadas a dois anéis. Além disso os radicais R^i e R^{ii} ; R^j e R^{jj} ; R^k e R^{kk} ; R^l e R^{ll} ; R^m e R^{mm} ; R^n e R^{nn} ; R^o e R^{oo} ; R^p e R^{pp} ; R^q e R^{qq} juntos com o átomo X ao qual eles
5 estão ligados podem formar um grupo de carbonila.

Os exemplos de ingrediente de fragrância desta categoria são éter de metila de 2-naftila (yara yara) (93-04-9), Cumarina (91-64-5), cetona de naftila d emetila (941-98-0), Isobutilquinolina ((66442-31-1), 1,2,3,4,6,7,8-Hexaidro-
10 4,6,6,7,8,8-hexametilciclopentan-il-2-benzopiran (Galaxolida; IFF) (01222-05-5), tetraidronaftaleno de 6-Acetil-1,1,2,4,4,6-hexametila (Tonalida; PFW) (021145-77-7), 6,7-Diidro-1,1,2,3,3-pentametila-4(5H)-indanona (Cashmeran; IFF) (088704-61-9), acetato de triciclo decenila (Cyclacet; IFF)
15 (6418-60-5) e seus homólogos, propionato de triciclo decenila (Cyclaprop; IFF) (17511-60-3) e isobutirato de triciclo decanila (Cyclabute; IFF) (067634-20-2), éter de metila de cedrila (Cedramber; IFF) (019870-74-7), 4-(1,8-Benzodioxol-5-il)butan-2-ona (Dulcinyll; IFF) (55418-52-5), 3a-Etil dodecaidro-6,6,9a-trimetila nafto [2,1-b]-furan (Grisalva; IFF)
20 (68611-23-4), 2,5,5-Trimetiloctaidronaftalen-2-ol (Ambrinol 20-T; Takasago) (41199-19-3), β -cariofileno (13877-93-5), cariofileno (87-44-5), acetato de cariofileno (57082-24-3), α -Cedreno (13877-93-5), δ -Cedren-13-ol (28231-03-0), Cedrol
25 (77-53-2), Acetato de cedrila (77-54-8), Acetato de cedrenila (1405-92-1), Formato de cedrila (39900-33-4), Éter de metila de cedrila (67874-81-1), Aldeído α -metil-3,4-metilenodióxi-hidrocinâmico, (Heliobouquet; Takasago) (1205-

17-6), Triciclo[5,2,1,0]decan-2-carboxilato de etila (Fruta-
 te; Kao) (080667-64-3), 1,4-Cineol (470-67-7), 1,8-Cineol
 (470-82-6), Borneol (646-45-3), Acetato de bornila (76-49-
 3), Isoborneol (124-76-5), Acetato de isobornila (125-12-2),
 5 Formato de isobornila (1200-67-5), Éter de metila de isobor-
 nila (5331-32-8), propionato de isobornila (2756-56-1), 2-
 Etil-5(ou 6)-metóxi biciclo[2.2.1]heptano e 1-Etil-3-metóxi
 triciclo[2,2,1,0^{a,b}]hepteno (Neoproxen; IFF) (122795-41-9),
 2-Etilideno-6-isopropóxi biciclo[2.2.1]heptano (Isoproxen;
 10 IFF) (90530-04-4), 5'(ou 6')-(Metilnorbon-5'-en-2'-il)-2-
 mentil-1-em-8-ol (Florosantal; Takasago) (67739-11-1 e
 85232-76-4), 2-[(1,7,7-Trimetibiciclo[2,2,1]hept-2-il)oxil-
 etanol (Cedanol; Takasago) (7070-15-7), Álcool de feneíla
 (1632-73-1), Decaidro-3a,6,6,8a-tetrametil nafto[2,1-b]furan
 15 (Ambrox; Firmenich) (6790-58-6), 7-Acetil-1,2,3,4,5,6,7,8-
 octaidro-1,1,6,7-tetrametilnaftaleno (Iso E Super, IFF)
 (54464-57-2), Álcool de Patchouli (5986-55-0), Nospatoulenol
 (41429-52-1), Cicloexanol de isobornila (Santalex T; Takasa-
 go) (68877-58-6), 2,2,7,7-
 20 Tetrametiltriciclo[6,2,1,0^{1,6}]undecano-5-ona (Isolongifolano-
 na; Queet) (23787-90-8), Acetato de octaidro-7,7,8,8-
 tetrametil-2,3b-metano-3bH-
 ciclopenta(1,3)ciclopropa(1,2)benzeno-4-metila (Acetato de
 amborila) (59056-62-1), Nootkatona (Givaudan) (4674-50-4),
 25 9-Etilideno-8-oxatriciclo[6,2,1,0^{2,7}]undecano-4-ona (Florex
 Firmenich) (69486-14-2), Éter de metila de cedrila (19870-
 74-7 e 67874-81-1), α -Pineno (80-56-8), β -Pineno (127-91-8),
 5,6,7,7a-Tetraidro-4,4,7a-trimetil-2(4H)-benzofuranona (Dii-

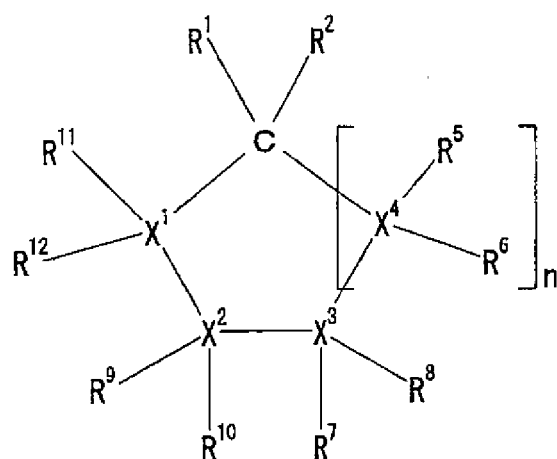
droactinidolida) (15856-74-8), 1,3-Dimetil-8-(1-metiletil)-
 triciclo[4.4.0.0.0¹¹]dec-3-eno (α -Copaeno) (8856-25-5), Can-
 feno (79-92-5), Canfor (484-43-3), Indano de 5-acetil-
 1,1,2,3,3,6-hexametila (Fantolida; PFW) (15828-36-0), Indano
 5 de 4-acetil-6-terciária-butil-1,1-dimetila (Celestolida;
 IFP) (18171-00-1), 5-Acetil-1,1,2,6-tetrametil-3-isopropil-
 diidroindan (Traseolida; Queet) (68140-48-7), Tetraidronaf-
 taleno de 6-acetil-1,1,2,4,4,6-hexametila (Tonalida, PFW)
 (21145-77-7), Éter de isobutila de β -naftila (2173-57-1),
 10 Acetato de decaidro- β -naftila (10619-11-6), Carboxaldeído de
 6-metoxidiciclopentadieno (Scentenal; Firmenich) (86803-90-
 9), Triciclo[6,2,1,0]undecan-5-ona de 4-metila (Plicatona;
 Firmenich) (41724-19-0), 3,4,4a,5,8,8a-hexaidro-3',7'-
 dimetil espiro(1,4-metanonaftaleno-2(1H)2'-oxirano) (Rhubo-
 15 fix; Firmenich) (41815-08-9), Dodecaidro-3a,6,6,9a-
 Tetraidro-Nafto[2,1,1]Furan (Cetaloxi, Firmenich) (8788-00-
 9), 6-Etilideno octaidro-5,8-metano-2H-1-benzopiran-2-ona
 (Florexil, Firmenich) (69488-14-2).

(d) Moléculas contendo um anel alicíclico único
 20 que contém pelo menos 5 átomos, porém não mais do que 8 áto-
 mos, de qualquer do carbono, oxigênio, nitrogênio ou enxofre
 no qual pelo menos um dos átomos de carbono do anel tem dois
 substituintes, isto é, é um átomo de carbono terciário, ou
 um átomo de carbono alfa para o anel é um átomo de carbono
 25 terciário, ou o anel tem substituintes em pelo menos três
 dos átomos que compõem o anel;

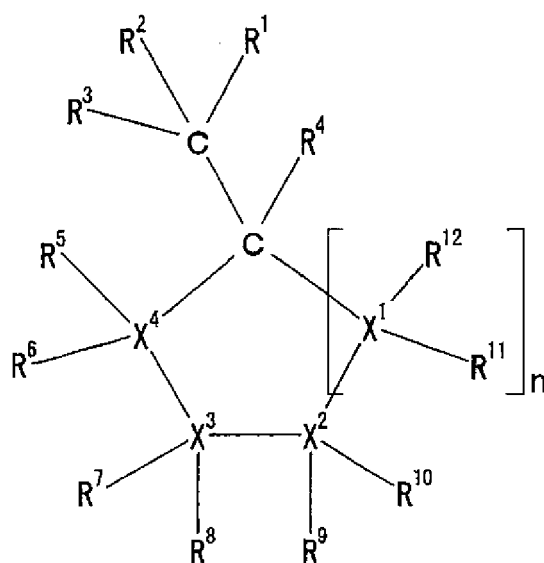
O anel pode opcionalmente conter mais do que 3
 substituintes. O anel pode conter átomos heterocíclicos e

ligações opcionalmente não saturadas e os substituintes podem ser grupos de alquila ou alquenila ou arila, ou grupos funcionais tal como hidróxila, éter, aldeído, cetona, acetal, amina, amida, nitrilo, oxima, tiol, ou tioéter.

- 5 Exemplo de moléculas volumosas como definido no item (d) são compostos de perfume tendo formulas moleculares como nas Estruturas 4 ou 5:



Estrutura 4



Estrutura 5

Onde:

- quaisquer de X^1 a X^4 independentemente representa átomos de carbono, nitrogênio, oxigênio ou enxofre;

- C representa um átomo de carbono;

5 - n é igual a 1 a 4 porém é preferivelmente 2 ou 3;

- R^1 , R^2 e R^3 podem ser quaisquer dos seguintes:

* hidrogênio, metila ou metila substituída;

* alquila linear substituída ou não substituída

10 C_2-C_8

* alquenila linear substituída ou não substituída

C_2-C_8

* alquila ramificada substituído ou não substituído C_3-C_8 ;

15 * alquenila ramificada substituída ou não substituída C_3-C_8 ;

* cicloalquila substituída ou não substituída C_4-C_8 ;

* cicloalquenila substituída ou não substituída

20 C_4-C_8 ;

* arila substituída ou não substituída C_5-C_8 ;

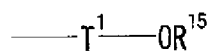
* alcarila substituída ou não substituída C_6-C_8 ;

* heterocicloalquila substituída ou não substituída C_6-C_8 ;

25 * hidróxi;

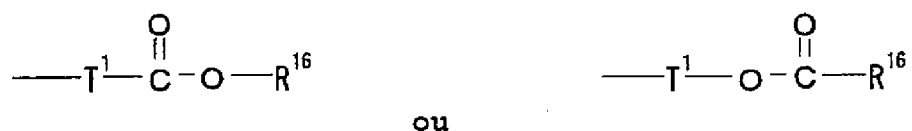
* um éter compreendendo uma unidade tendo a se-

quinta fórmula:



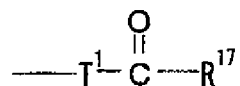
na qual T^1 e R^{15} são como definidos acima para a Estrutura 1;

* um éster compreendendo uma unidade tendo qualquer das seguintes fórmulas:



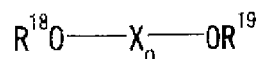
na qual T^1 e R^{15} são como definidos acima para a Estrutura 1:

* uma carbonila compreendendo uma unidade tendo a seguinte fórmula:



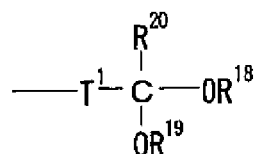
na qual T^1 e R^{17} são como definidos acima para a Estrutura 1:

* um cetel compreendendo uma unidade diretamente substituída em um anel tendo a seguinte fórmula:



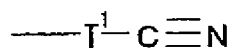
em cujo caso X_n é um átomo de carbono, n sendo 1, 2, 3, 4, 5 ou 6;

* um acetal ou cetel compreendendo uma unidade tendo a seguinte fórmula:



5 na qual T^1 , R^{18} , R^{19} e R^{20} são como definidos acima para Estrutura 1;

* um nitrilo compreendendo uma unidade tendo a seguinte fórmula:



10 1. na qual T^1 é como definido acima para a Estrutura

R^4 a R^{12} pode ser hidrogênio ou R^1 .

Os radicais R^1 e R^2 ; R^3 e R^4 ; R^5 e R^6 ; R^7 e R^8 ; R^9 e R^{10} ; R^{11} e R^{12} juntos com o átomo X ao qual eles estão ligados podem formar um grupo de carbonila.

15 Nos compostos tendo a estrutura 4 ou 5, é preferido se a maioria dos átomos X for carbono e n é igual a 1 ou

2.

Os exemplos de moléculas de fragrância que atendem a esta definição são: Para-terciária-butil-cicloexanol (98-52-2), acetato de Para-terciária-butil-cicloexila (32210-23-4), Orto-terciária-butil-cicloexanol (13491-79-7), Acetato de orto-terciária-butil-cicloexanol (88-41-8), Para-terciária-butil-cicloexanona (98-53-3), Diidrojasmonato de metila (Hediona; Firmenich) (24851-98-7), α -Ionona (127-41-3), β -Ionona (14901-07-6) e γ -Ionona (79-76-5), α -Damascone (24720-09-0), β -Damascone (23726-92-3), δ -Damascone (57373-68-4), γ -Damascone (35087-49-1), β -Damascone (28696-85-7), 2-Etil-4-(2,2,3-trimetil-3-ciclopenten-1-il)-2-buten-1-ol (Bacdanol; IFF) (28219-61-6), 4-Acetóxi-4-metil-2-propil-tetraidro-2H-piran (Clarycet; IFF) (131766-73-9), Orto-terciária amil cicloexanila acetato (Coniferan; IFF) (67874-72-0), 2,4-dimetilcicloexanometano] (Diidrofloradol) (68480-15-9), 3-Metil-5-(2,2,3-trimetil-3-ciclopenten-1-il)-4-penten-2-ol (Ebanoli Givaudan) (67801-20-1), Acetal de propileno glicol de acetoacetato de etila ((Fraistone; IFF) (6290-17-1), Isociclogeraniol (IFF) (63527-49-3), Fentol (22627-95-8), Acetato de fencila (13851-11-1), (-)-2-Etil-4-(2,2,3-trimetil-3-ciclopenten-1-il)-2-buten-1-ol (Levosandol, Takasago) (26219-61-6), Cetol de etilenoglicol de etilacetato (6413-10-1), Nopol (128-50-7), Acetato de nopila (35336-72-7), 2,6,6-Trimetil-1-cicloexen-1-acetoaldeído (472-66-2), 2,4,6-Trimetil-3-cicloexeno-1-carboxaldeído (1335-66-6), 2,4,6-Trimetil-3-cicloexano-1-metanol (63527-77-5), 3-Metil-5-propil-2-cicloexen-1-ona (372-16-9), Dinas-

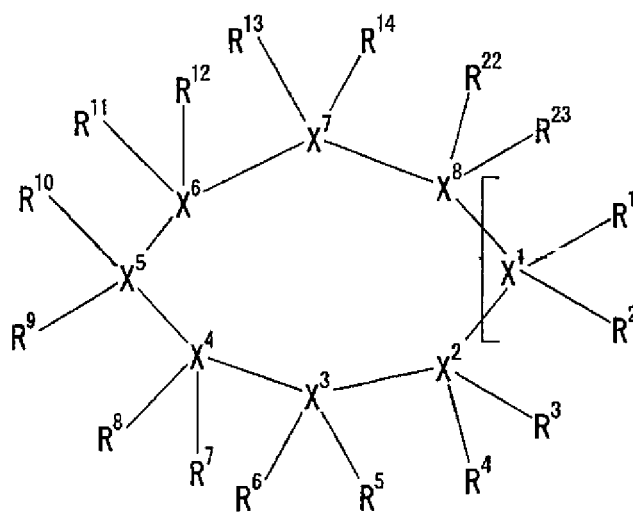
cona (Firmenich) (56978-85-4), α -Isso-metil-ionona (1335-46-8), 3,3-Dimetil-5-(2',2',3'-trimetil-3'-ciclopentan-1'-il)-4-penten-2-ol (Polisantol; Firmenich) (107898-54-4), éster de metila de ácido carboxílico de cicloexeno de 2,2-dimetil-
 5 6-metilano (Romascone; Firmenich) (81752-87-6), 5-Pentil-2,2,5-trimetilciclopentanona (65148-14-8), 2,2,6-Trimetil- α -propil-cicloexanopropanol (Timberol; Symrise) (70788-30-6), Oxy-2-butanol de cicloexila de 2-terc-Butila (Amber Core; Kan) (139504-88-0), Aldeído de mirac (Preciclimona B; IFF)
 10 (52474-60-9), 2-Metil-4-(2,6,6-trimetil-1-cicloexen-1-il)-2-butenol (Boronal; Symrise) (3155-71-3), 2,2,5-Trimetil-5-pentilciclopentanona (65443-14-8) β -2,2,3-Tetrametil-3-Ciclopenteno-1-butanol (Brahmanol; Symrise) (72089-08-8), 2-Metil-4-(2,2,3-trimetil-3-ciclopenten-1-il)-2-buten-1-ol
 15 (Sandahnyeore core; Kan) (23219-60-5), 3-Metil-5-(2,2,3-trimetil ciclopent-3-en-1-il-pentan-2-ol (Sandolare; Givaudan) (65118-99-7), 4-terc-Pentilcicloexanona (16587-71-6), cicloexanona de 4-(1-etoxivinil)-3,3,5,5-tetrametila (Kaphallis; Givaudan) (36306-87-3), Carbonato de cicloexila de 2-
 20 terc-butila (Floramat; Cognis) (67801-64-3), 2-hexil-3-oxociclopentanocarboxilato de metila (Jasnapoli, PFW) (37172-53-5), Éster de metila de ácido acético de 3-oxo-2-(2-cis-pentenil)ciclopentano (1211-29-6), 2-pentil-3-metil-2-ciclopentan-1-ona (1128-08-1).

25 (e) moléculas contendo pelo menos um anel macrocíclico, isto é, um anel com mais do que 8 átomos de qualquer do carbono, nitrogênio, oxigênio ou enxofre no anel;

O anel pode conter átomos carbono, nitrogênio, o-

xigênio ou enxofre e inclui grupos funcionais tal como não
 saturação, lactonas, éteres e amidas. O anel macrocíclico
 pode também conter substituintes com base em grupos de car-
 bono, nitrogênio, oxigênio e enxofre tal como grupos de al-
 quila e alcenila, álcoois, ésteres, éteres, aldeídos, ceto-
 5 nas, acetais, amidas, amidas, nitrilos, oximas, tióis e tio-
 éteres.

Exemplo de moléculas volumosas como definido no
item (e) são compostos de perfume tendo formulas moleculares
 10 da Estrutura 6:



Estrutura 6

onde:

- X¹ representa um átomo de carbono;
- qualquer X¹ a X⁸ independentemente representa á-
tomos de carbono, nitrogênio, oxigênio ou enxofre;
- n é um número inteiro entre 1 a 8;
- R¹ a R¹⁴, R²² e R²³ podem ser independentemente

quaisquer dos seguintes, ou eles podem não estar presentes dependendo dos requerimentos de valência dos átomos representados pelo X correspondente e qualquer não saturação no anel;

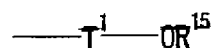
5 * alquildiila linear substituído ou não substituído C_1-C_8 ;

 * alquendiila linear substituído ou não substituído C_2-C_8 ;

10 * alquildiila ramificada substituída ou não substituída C_2-C_8 ;

 * alquendiila ramificada substituída ou não substituída C_2-C_6 ;

 * um éter compreendendo unidade tendo a seguinte fórmula:



15 na qual T^1 e R^{15} são como definidos acima para a Estrutura 1;

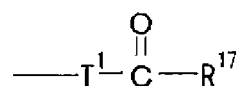
 * um éster compreendendo uma unidade tendo qualquer das seguintes fórmulas:



na qual T^1 e R^{15} são como definidos acima para a

Estrutura 1:

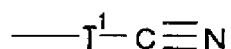
* uma carbonila compreendendo uma unidade tendo a seguinte fórmula:



na qual T¹ e R¹⁷ são como definidos acima para a

5 Estrutura 1:

* um nitrilo compreendendo uma unidade tendo a seguinte fórmula:



na qual T¹ é como definido acima para a Estrutura 1.

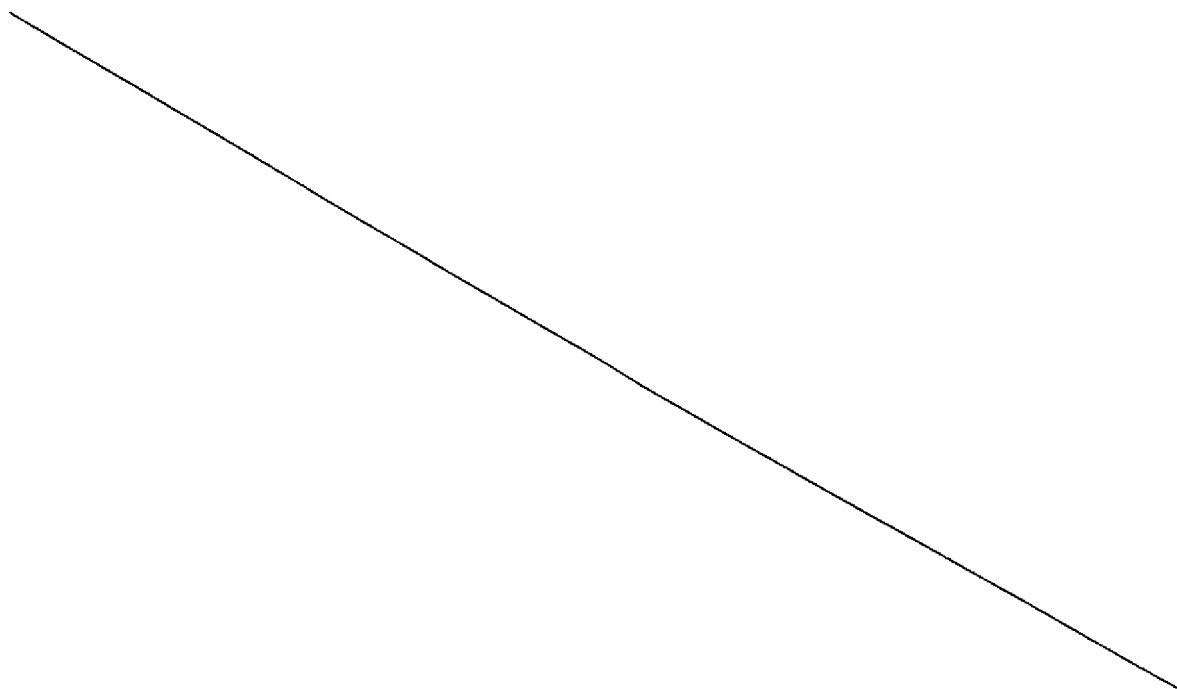
10 ou os radicais R¹ e R²; R³ e R⁴; R⁵ e R⁶; R⁷ e R⁸; R⁹ e R¹⁰; R¹¹ e R¹² juntos com o átomo X ao qual eles estão ligados podem formar um grupo de carbonila.

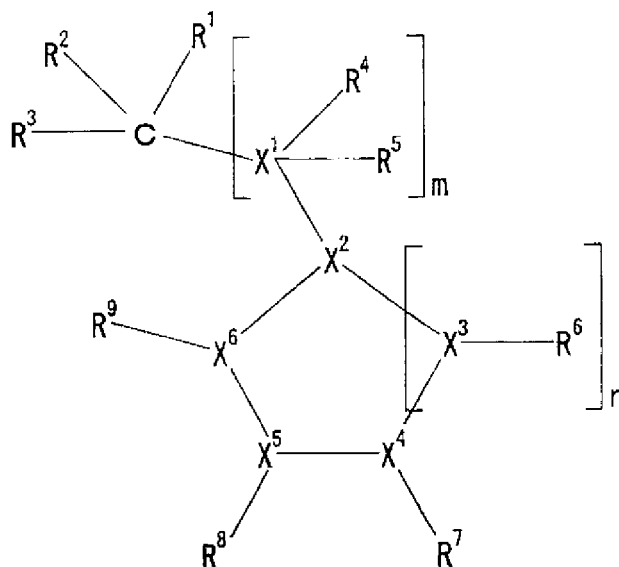
Os exemplos de tais moléculas incluem Brassilato de Etileno (Musk T; Takasago) (105-95-3), 3-Metilciclopentadecanona (Muscone) (541-91-3), 3-Metilciclopentadecanona (Muscenona) (32356-51-2), 3-Metilciclopentadecanol (Muscol) (4727-17-7), Ciclopentadecanolida (Exaltolida; Firmenich) (108-02-5), Ciclopentadecanona (Exaltona; Firmenich) (502-72-7), (Z)-4-Ciclopentadecen-20 1-ona (Exaltenona; Firmenich) (14595-54-1), Trimetil-

oxabicyclotridecadieno (Cedróxido; Firmenich) (71735-79-0),
15-Pentadecenolida (34902-57-3), (Z)-9-Cicloheptadecen-1-ona
(542-46-1); 12-Metil-14-tetradec-9-enolida, Oxacicloheptadec-
7(ou 10)-en-2-ona (Ambrettolide; IFF) (28645-54-4), 5-
5 Cicloexadecen-1-ona (Ambretona; Takasago) (37609-25-9), car-
bonato de [3(ou 4)-Cicloocten-1-il] metila (Vieliff; IFF)
(87731-18-3), Cetona de 2,6,10-trimetilciclododeca-2,5,9-
trien-1-il de metila (Trimofix O; IFF) (28371-99-5), Éter de
metila de ciclodecila (2986-54-1), Etoxiimetoxiciclododecano
10 (5867-11-6).

(f) moléculas contendo pelo menos um anel aromáti-
co substituinte contendo pelo menos 5 átomos de qualquer do
carbono, oxigênio, nitrogênio ou enxofre, porém no qual pelo
menos um substituinte tem um carbono terciário em uma posi-
15 ção alfa ou beta no anel;

Exemplo de moléculas volumosas como definido no
item (f) são compostos de perfume tendo formulas moleculares
da Estrutura 7:



**Estrutura 7**

Onde:

- quaisquer de X^1 a X^6 independentemente representa átomos de carbono, nitrogênio, oxigênio ou enxofre;

- n é igual a um número inteiro entre 1 e 8;

5 - m é igual a um número inteiro entre 0 e 1;

- R^4 a R^9 não necessitam estar presentes dependendo dos requerimentos de valência dos átomos representados por X ;

- R^1 , R^2 e R^3 podem ser:

10 * hidrogênio, metila ou metila substituída;

* alquila linear substituída ou não substituída

C_2-C_8

* alquenila linear substituída ou não substituída

C_2-C_8

15 * alquila ramificada substituído ou não substituído C_3-C_8 ;

* alquenila ramificada substituída ou não substituída C_3-C_9 ;

* cicloalquila substituída ou não substituída C_4-C_9 ;

5 * cicloalquenila substituída ou não substituída C_4-C_9 ;

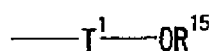
* arila substituída ou não substituída C_6-C_9 ;

* alcarila substituída ou não substituída C_6-C_9 ;

10 * heterocicloalquila substituída ou não substituída C_6-C_8 ;

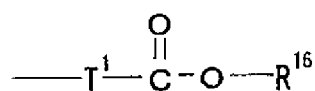
* hidróxi;

* um éter compreendendo uma unidade tendo a seguinte fórmula:

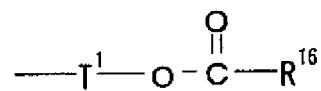


15 na qual T^1 e R^{15} são como definidos acima para a Estrutura 1;

* um éster compreendendo uma unidade tendo qualquer das seguintes fórmulas:



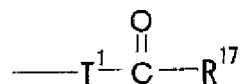
ou



na qual T^1 e R^{15} são como definidos acima para a Estrutura 1:

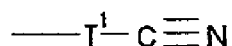
20 * uma carbonila compreendendo uma unidade tendo a

seguinte fórmula:



na qual T¹ e R¹⁷ são como definidos acima para a Estrutura 1:

* um nitrilo compreendendo uma unidade tendo a seguinte fórmula:



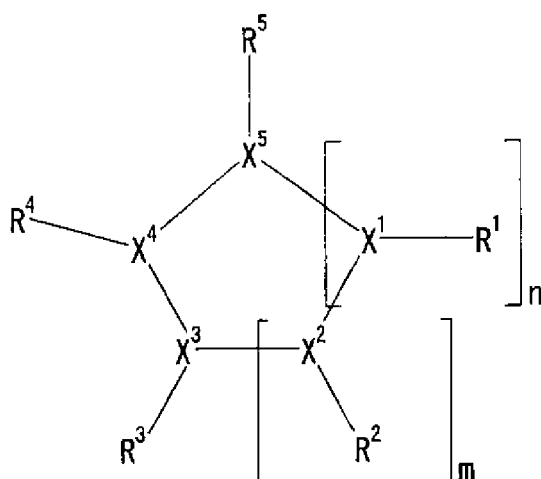
na qual T¹ é como definido acima para a Estrutura 1.

R⁴ a R¹² podem ser independentemente hidrogênio ou R¹.

Os exemplos de tais moléculas são: 2-metil-3-(4-terc-butilfenil)propanol (Lilial Givaudan) (80-54-6), 2,5,5-trimetil-2-fenil-1,3-dioxano (AcetoKetal: TaKasago) (5406-58-6), 4-terc-Butilbenzenopropionaldeído (18127-01-0), Acetato de dimetilbenzilcarbinila (151-05-3), 5-Fenil-5-metil-3-hexanona (Damacol 4: IFF) (4927-36-0).

(g) moléculas contendo um anel substituído compreendendo pelo menos 5 átomos com pelo menos 3 grupos substituídos no anel todos dos quais devem conter pelo menos 2 átomos dentre carbono, oxigênio, nitrogênio ou enxofre; Exem-

plos de moléculas volumosas como definido no item (g) são compostos de perfume tendo fórmulas moleculares como na Es-
trutura 8:



Estrutura 8

onde

- 5 - qualquer de X¹ a X⁵ independentemente representam átomos de carbono, nitrogênio, oxigênio ou enxofre;
- n é um número inteiro entre 1 e 3; e
- m é um número inteiro entre 1 e 2.
- R¹ a R⁵ não necessitam estar presente dependendo
- 10 dos requerimentos de valência dos átomos representados pelo X relevante, quando presente pelo menos três do R¹ a R⁵ devem ser independentemente;
- * hidrogênio, metila substituído ou metila
- * alquila linear substituída ou não substituída
- 15 C₂-C₈
- * alquenila linear substituída ou não substituída
- C₂-C₈

* alquila ramificada substituído ou não substituído C_3-C_9 ;

* alquenila ramificada substituída ou não substituída C_3-C_9 ;

5 * cicloalquila substituída ou não substituída C_3-C_9 ;

* cicloalquenila substituída ou não substituída C_4-C_9 ;

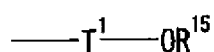
* arila substituída ou não substituída C_6-C_8 ;

10 * alcarila substituída ou não substituída C_6-C_9 ;

* heterocicloalquila substituída ou não substituída C_6-C_8 ;

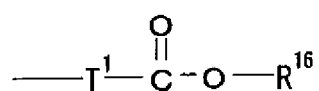
* hidróxi;

15 * um éter compreendendo uma unidade tendo a seguinte fórmula:

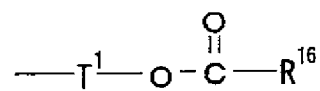


na qual T^1 e R^{15} são como definidos acima para a Estrutura 1;

* um éster compreendendo uma unidade tendo qualquer das seguintes fórmulas:

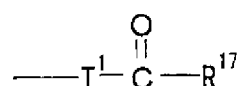


ou



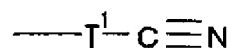
na qual T^i e R^{15} são como definidos acima para a Estrutura 1:

* uma carbonila compreendendo uma unidade tendo a seguinte fórmula:



5 na qual T^i e R^{17} são como definidos acima para a Estrutura 1:

* um nitrilo compreendendo uma unidade tendo a seguinte fórmula:



na qual T^i é como definido acima para a Estrutura
10 1.

Nos compostos tendo estrutura 8, é preferido que a maioria de átomos X seja carbono e mais preferido que n seja igual a 2 e m igual a 1 para que a estrutura ciclo seja um derivado de benzeno substituído.

15 Os exemplos de tais moléculas incluem 1,3,5-trimetoxibenzeno (621-28-8), Eugenol de Acetila (88-28-7), Vanilina de acetila (881-68-5), Acetato de Anisila (104-21-2), Eugenol de Metila (93-15-5), Musk Tibetona (145-39-1), Musk ambrette (83-66-9), Ácido 3-4-dimetoxibenzóico (98-07-
20 2), Acetato de 3,4-metilenodioxibenzila (326-61-4) e vera-

traldeído (120-14-9).

Na presente especificação, os seguintes termos designam o nome das companhias que fornecem a fragrância identificada pelos nomes comerciais: Firmenich = Firmenich SA;
5 Takasago = Takasago International Corporation; Symrise = Symrise GmbH & Co. KG; Cognis = Cognis Corporation; Givaudan = Givaudan SA; IFF = International Flavors e Fragrances; Quest = Quest international; PFW = PFW Aroma Chemicals B.V..

Descobriu-se que o aldeído não somente reage durante a preparação, porém surpreendentemente continua a reação durante o tempo de armazenagem dentro da cápsula propriamente dita na medida em que se torna uma fragrância olfativamente não aceitável. Apesar da vista geral que os aldeídos são espécies reativas, vários aldeídos, por exemplo,
10 Lícial, aldeído de Cyclamen, aldeído cinâmico de hexila e amila e vanilina são freqüentemente empregados em níveis muito elevados em fragrâncias para produtos domésticos, lavanderia e cuidado pessoal. Desse modo, as composições de perfume da presente invenção preferivelmente devem restringir o nível total de aldeídos de fragrância, incluindo alfa,
15 aldeídos beta-não saturados, para menos do que 20% em peso, preferivelmente menos do que 10% em peso, mais preferivelmente menos do que 5% em peso, e ainda mais preferivelmente menos do que 1% em peso da composição de perfume.

25 Embora seja conhecido por adicionar um excesso de aminas solúveis em água com respeito ao final da fabricação de cápsula para reduzir a concentração de formaldeído, descobriu-se que as aminas presentes como componentes de núcleo

mostram um grau surpreendente de reatividade.

Desse modo, as composições de perfume da invenção preferivelmente devem restringir o nível total de amins primária e secundária para menos do que 10% em peso, e mais
5 preferivelmente menos do que 1% em peso da composição de perfume.

Uma vez que as propriedades dos compostos de fragrância não mais desempenham um papel na deposição, então a necessidade de escolher uma proporção de materiais de ClogP
10 elevado (logP calculado) com ensinado na patente U.S. No. 5.652.206 e 5.500.188 para distribuição e longevidade melhoradas de fragrância, não é mais requerida, embora seja ainda um requerimento que a composição de fragrância seja suficientemente insolúvel em água para formar uma emulsão. Uma
15 vez que a solubilidade da água é aproximadamente inversamente correlacionada com ClogP i; é preferível que mais do que 80% em peso, preferivelmente mais do que 90% em peso, da composição de fragrância compreenda os ingredientes tendo valores de ClogP maiores do que 1,00, mais preferível que
20 mais do que 80% em peso e mais preferivelmente mais do que 90% em peso tem valores de ClogP maiores do que 1,50 e ainda mais preferível que mais do que 80% em peso e preferivelmente mais do que 90% em peso tenha valores de ClogP maiores do que 2,00.

25 Como cada cápsula somente contém uma pequena quantidade de fragrância, a fim de obter o impacto olfativo máximo quando as cápsulas liberam seus teores, os materiais de fragrância do núcleo encapsulado devem evaporar e difundir

através do ar rapidamente e ser olfativamente fortes. Os materiais que possuem o equilíbrio correto de resistência, e evaporação rápida tendem a ter valores de ClogP moderado. Ao mesmo tempo em que o limite inferior de valores de ClogP é definido pela necessidade de formar uma emulsão estável de ingredientes insolúveis em água o limite superior é menos ativamente definido, porém ainda definido pela taxa de redução de evaporação e intensidade percebida realizada se a fragrância do núcleo da cápsula tem uma preponderância de ingredientes com ClogP elevado. Desse modo é preferido que a maioria dos ingredientes de fragrância tenha ClogPs abaixo de 4,00. É especialmente preferido que mais do que 40% em peso, preferivelmente mais do que 60% em peso, e ainda mais preferivelmente que mais do que 80% em peso dos componentes de fragrância do núcleo da cápsula tenham ClogPs menores do que 4,00 para distribuir uma fragrância forte quando a cápsula rompe e libera seu perfume.

O ClogP refere-se ao coeficiente de divisão de octanol/água (P) dos ingredientes de fragrância. O coeficiente de divisão de octanol/água de um ingrediente de fragrância é a relação entre suas concentrações de equilíbrio em octanol e água. Os coeficientes de divisão de ingredientes de perfume são mais convenientemente determinados na forma do seu logaritmo para a base de 10, logP. O logP de muitos ingredientes de perfume tem sido relatado; por exemplo, a base de dados Pomann 92, disponível de Daylight Chemical Information Systems, Inc. (Daylight CIS) Irvine, Calif. contém muitos, junto com citações para a literatura original. En-

tretanto, os valores de ClogP reportados aqui são mais convenientemente calculados pelo "CLOGP", programa disponível no Chemoffice Ultra Software versão 9 disponível de CambridgeSoft Corporation, 100 CambridgePark Drive, Cambridge, MA 02140 USA ou CambridgeSoft Corporation, 8 Signet Court, Swanns Road, Cambridge CB5 8LA UK. Os valores de ClogP são preferivelmente empregados no lugar dos valores de logP experimental na secção dos ingredientes de perfume que são úteis na presente invenção. Para extratos ou óleos naturais, a composição de tais óleos pode ser determinada por análises ou empregando as composições publicadas na base de dados ESO 2000 publicada por BACIS (Boelens Aroma Chemical information Service, Groen van Prinsterlean 21, 1272 GB Huizen, Holanda).

Um outro aspecto da invenção é que as cápsulas devem compreender mais do que 60% em peso, e mais preferivelmente mais do que 70% em peso, e ainda mais preferivelmente mais do que 80% em peso de ingredientes de perfumaria e agentes benéficos. Ao mesmo tempo em que seria óbvio incorporar tanto material ativo quanto possível nas cápsulas, muitas reações práticas associadas com a estabilidade da emulsão, a integridade da cápsula, prevenção de vazamento etc., as cápsulas freqüentemente contêm proporções elevadas de outros ingredientes, por exemplo, solventes, endurecedores que substancialmente diluem os agentes benéficos e fragrância.

Uma vez que está inerente no sucesso desta invenção que mais fragrância seja depositada na superfície e que

o local de concentração em torno das cápsulas rompidas seja bastante elevado, a composição do núcleo da cápsula deve levar em consideração as características menos desejável de alguns materiais de fragrância tal como persistência no meio ambiente, acumulação em organismos aquáticos, e efeitos tóxicos, alérgenos ou irritantes com alguns humanos.

Em geral, uma vez que as cápsulas liberarão fragrância mais eficientemente à superfície, menos cápsulas e portanto menos fragrância são necessárias para obter um efeito de fragrância desejável, desse modo, a carga ambiental total é reduzida. Entretanto, a maior concentração sobre a pele ou em proximidade imediata à pele requer cuidado adicional para formular a composição de núcleo empregado somente ingredientes conhecidos por serem seguros em tal contexto. Entre os materiais conhecidos por terem características indesejáveis e portanto excluídas das composições de perfume da invenção estão almíscar de nitro como exemplificar por musk ambrette (CAS 83066-9), e musk cetona (CAS 8101401). Os solventes especialmente os ésteres de ftalato e éteres de carbitol definidos como $R-(OCH_2CH_2)_n-OR^1$ onde $n=1,2$ ou 3 $R=(C_1$ a $C_7)$ alquila ou fenila ou fenila substituída por alquila e R^2 é H ou $(C_1$ a $C_7)$ alquila. Os materiais listados no Anexo 1 do Dangerous Substances Directive (67/548/EEC) ou qualquer de suas alterações ou ATPs (Adaptação ao Progresso Técnico), ou classificados como R43 em sua folha de dados de segurança são opcionalmente restritos para menos do que 1% da composição do núcleo, preferivelmente menos do que 0,1% em peso, mais preferivelmente abaixo de 0,001%, e ainda mais

preferivelmente abaixo do limite detenção analítico.

É também preferível que os níveis dos seguintes ingredientes sejam limitados a menos do que 25% em peso, preferivelmente menos do que 10% em peso e mais preferivelmente menos do que 1% em peso da composição de núcleo: Aldeído cinâmico de amila (122-4-7), álcool cinâmico de amila (101-85-9), Álcool de anisila (105-13-5), Álcool de benzila (100-51-6), Benzoato de benzila (120-51-4), Cinamato de benzila (103-41-3), Salicilato de benzila (118-58-1), Aldeído cinâmico (104-55-2), Álcool de cinamila (104-54-1), Citronelal (108-22-9), Cumarina (91-64-5), Eugenol (97-53-0), Farnesol (4602-84-0); Geraniol (106-24-1), Aldeído cinâmico de hexila (101-86-0), hidroxicitronelal (107-95-5), Hidroximetilpentilcicloexenocarbozaldeído (31906-04-4), Isoeugenol (97-54-1), Lilial (80-54-6), limoneno (5989-27-5), linalol (78-70-6), Carbonato de heptina de metila (111-12-6), Carbonato de octano de metila (111-80-8), Acetoaldeído de fenila (122-78-1), 3-metil-4-(2,6,6-trimetil-2-cicliexen-1-il)-8-buten-2-ona (127-51-5).

20 Ingredientes Opcionais

Opcionalmente outros ingredientes podem ser adicionados ao núcleo da cápsula ou podem estar presentes como uma consequência da preparação de cápsula. Estes materiais não são materiais de fragrância propriamente dito, porém eles podem distribuir outros benefícios tal como antioxidantes compostos protetores solares, repelentes de inseto etc, ou eles podem ser moléculas de pró-fragrância que reagem para liberar os compostos de fragrância, eles podem também in-

oluir solventes, emulsificantes, estabilizadores, polímeros, e agentes espessantes.

Solventes

Os solventes neutros ou olfativamente fracos podem
5 construir até 25% do material de núcleo da cápsula em peso, preferivelmente menos do que 20% em peso, mais preferivelmente menos do que 10% em peso e ainda mais preferivelmente menos do que 5% em peso. Se presente, eles mais provavelmente terão sido introduzidos com um ou mais ingrediente de
10 perfume. Na indústria de perfume é muito comum dissolver materiais de fragrância sólidos em um solvente adequado ou diluir os materiais poderosos empregados em baixos níveis, com um solvente para facilitar a fabricação. Os solventes típicos incluem materiais de ClogP elevado tal como benzoato
15 de benzila, miristato de isopropila, adipato de dialquila, ~~ésteres de citrato tal como citrato de trietila de acetila~~ ou citrato de tributila de acetila ou citrato de trietila ou ftalato de dietila ou materiais de ClogP baixo tal como propileno glicol ou dipropileno glicol. Ao mesmo tempo em que
20 alguns destes materiais podem afetar a liberação de fragrância das cápsulas durante o armazenamento ou propriedades de emulsão durante a fabricação da cápsula, nos níveis descritos tais efeitos serão mínimos. Além disso, alguns solventes podem ser benéficos em certos produtos tal como ésteres
25 de citrato sendo empregados para combater o mau cheiro em desodorantes. Novamente, nos níveis de dosagem descritos, estes efeitos devem ser mínimos. Desse modo, os solventes são considerados como parte da fragrância, porém não necessaria-

mente condescendente com a invenção exceto como um agente benéfico.

Pró-Fragrância

Outro ingrediente opcional que pode ser desejável para proteger dentro e distribuir a partir de uma microcápsulas é uma pró-fragrância. A pró-fragrância são compostos nos quais pequenas fragrâncias geralmente altamente voláteis são reagidas para formar moléculas de peso molecular mais elevado, porém são designados para liberar a molécula de fragrância devido a alguns eventos externos tal como uma alteração do pH, ou por exposição à luz do sol, ou devido à molécula ter uma ligação particularmente lábil que pode hidrolisar para liberar as moléculas de fragrância. As pró-fragrâncias geralmente têm um peso molecular de pelo menos 300 amu, preferivelmente maior do que 350amu, mais preferivelmente maior do que 400amu, e que o peso molecular da pró-fragrância é pelo menos 2 vezes, preferivelmente pelo menos 2,5 vezes, mais preferivelmente 8 vezes o peso molecular do componente do material de fragrância e deve liberar mais do que uma molécula de fragrância por molécula de pró-fragrância. Além disso, o material de fragrância liberado deve ter um peso molecular dentre 100 e 300amu, preferivelmente entre 100 e 250amu e um limiar de detecção de odor abaixo de 100ppb preferivelmente 10ppb como definido na Patente U.S. No. 6.077.021 incorporada aqui por referência. As pró-fragrâncias são geralmente acetais, cetais, base de Schiff, ésteres lábeis tal como orto ésteres, ésteres de carbonato, ésteres de silila ou ésteres de ácido carboxílico

ativado por grupos funcionais vizinhos. As seguintes patentes, ou pedidos de patente descrevem várias moléculas de pró-fragrância e seu uso em produtos de cuidado pessoal e doméstico e são incorporados aqui por referência: Patente 5 U.S. 6.552.987 e Patente 6.077.821. Maior do que uma pró-fragrância pode ser incorporada dentro do núcleo de uma cápsula. Desse modo, as pró-fragrâncias não necessitam cumprir com os requerimentos do peso molecular de moléculas de fragrâncias, porém devem cumprir com as outras obrigações estruturais listadas como (a) a (g). 10

Outros Agentes Benéficos

No contexto desta especificação, outros agentes benéficos significam qualquer material capaz de ser encapsulado no modo descrito mais tarde e que pode sobreviver ao armazenamento para liberar um benefício quando empregado em 15 produtos cosméticos, de cuidado pessoal ou de lavanderia, líquidos, de gel, pasta ou macios, desde que eles contenham pouco ou nenhum de qualquer composto de aldeído, incluindo alfa beta aldeído não saturado, ou aminas primárias ou secundárias, e atendam aos requerimentos estruturais da invenção para moléculas volumosas como definido para ingredientes de fragrância da invenção. Os agentes benéficos não necessariamente contam com a volatilidade para seu efeito, desse modo eles não necessitam ser limitados por peso molecular 20 porém para minimizar a lixiviação da casca durante o armazenamento eles necessitam se adaptar com os requerimentos estruturais de moléculas volumosas. 25

Os agentes benéficos incluem extratos naturais ou

5 materiais que têm efeitos terapêuticos como relaxantes ou estimulantes, por exemplo, 1,3,5-trimetoxibenzeno (621-53-8), 1,3-dimetoxi-5-metilbenzeno, ou vitaminas ou derivados de vitaminas tal como acetato de tocoferila (58-95-7), ou palmitato de retinila (79081-2) são também agentes benéficos nesta definição. Os materiais que suprimem ou reduzem o mau odor ou sua percepção por qualquer dos muitos mecanismos propostos são os agentes benéficos como descrito em U.S. 4.622.221 e U.S. 4.719.195. Os materiais que quando adicionados à emulsão melhoram as propriedades da emulsão de núcleo antes da encapsulação, ou as propriedades das cápsulas propriamente ditas. Os materiais que fornecem um efeito de aquecimento ou resfriamento tal como descrito em Cosmetics and Toiletries Vol. 120 No. 6 pág. 106 de M. Erman são também agentes benéficos. Os exemplos de tais agentes incluem ~~porém não estão limitados a N-etil-5-metil-2-(1-metiletil)~~ de carboxamida de cicloexano conhecido como resfriamento como WS3TM (89711-78-0); Lactato de mentila (69269-38-0); (-)-Mentoxipropano-1,2-diol conhecido como agente de resfriamento 10TM. Os materiais que atuam como repelente de inseto p-Mentano-3,8-diol (4822-86-6) ou óleos de planta naturais tal como óleo de *Tea Tree*, óleo de margosa, ou óleo de eucalipto são agentes benéficos. Os materiais que atuam como antioxidantes tal como tolueno de hidróxi butilado (128-37-0), hidroxianisol butilado (25018-16-5), ou Hidroxiidrocinamato de tetra-di-t-butila de pentaeritritila, Octadecil di-terc-butil-4-hidroxiidrocinamato (2082-79-3), etilidenbisfenol de tetrabutila (35958-80-6) são agentes benéficos. Os

materiais que atuam como absorventes de UV tal como Benzofenona, Butilmetoxidibenzoilmetano, ou Tetracis-[metileno-3-(3', 5'-di-terc-butil-4'-hidroxifenil)propionato]metano (6683-19-8), bis-etilexiloxifenolmetoxifenil-tirazina são
 5 agentes benéficos. Os materiais listados acima são pretendidos exemplificar os agentes benéficos, porém não é pretendido limitar os agentes benéficos a esta lista. A mistura dos acima pode também ser considerada como agentes benéficos da invenção. Desse modo, pode ser vantajoso combinar os ab-
 10 sorventes UV com antioxidantes para proteger os ingredientes da fragrância. Além disso, é reconhecido que alguns materiais possam exibir mais do que um benefício. Desse modo, o acetato de vitamina E pode funcionar como um antioxidante bem como precursor de vitamina.

15 Cápsulas de Casca de Núcleo

A invenção por ser aplicada a qualquer cápsula casca-núcleo que compreende um núcleo central de perfume circundado por uma camada polimérica que forme a parede ou camada de casca. A palavra casca pode dar a impressão de
 20 uma cápsula de parede dura porém isto não necessita necessariamente ser desse modo, ela indica não mais do que uma camada de revestimento que protege os teores porém a casca pode ser plástica ou deformável. As cápsulas da invenção são tipicamente de 1-1000 micrômetros em diâmetro, preferivel-
 25 mente 5-500 µm e mais preferivelmente 10-100 µm.

Co-Acervados

Uma forma de microcápsula pode ser aquela tipicamente formada por técnicas de co-acervação. Os materiais e

processos são descritos em detalhes nas seguintes patentes incorporadas aqui por referência, por exemplo, U.S. 2.300.458; U.S. 3.159.535; U.S. 3.533.958; U.S. 3.697.437; U.S. 3.888.689; U.S. 3.998.156; U.S. 8.965.088; U.S. 4.010.088; e U.S. 4.016.098. O material de encapsulação preferido é gelatina co-acervada com um poliânion tal como goma Arábica, e mais preferivelmente reticulado com um material reticulado tal como glutaraldeído ou alginatos co-acervados com íons de cálcio.

10 Cápsulas de Aminoplasto

Uma forma especialmente preferida de microcápsulas é uma cápsula de aminoplasto formada por polimerização de condensação de aminas e aldeídos preferivelmente formaldeído de melamino e opcionalmente uréia. As patentes descrevendo
15 as composições e processos para a fabricação de cápsulas de ~~aminoplasto na forma de uma dispersão tal como o Pedido de~~ Patente EP 1.246.693 A1 e Patente U.S. 6.261.488, as quais estão incorporadas aqui por referência. Outros monômeros adequados para cápsulas de casca de núcleo são, por exemplo,
20 metacrilato de metila como exemplificado no Pedido de Patente Internacional WO08/099005. Os monômeros adequados adicionais são bem conhecidos por aqueles versados na técnica de reações de polimerização. Sem desejar limitar a patente de modo algum, um processo típico para a preparação de um
25 capeamento de uma dispersão de cápsula incluiria as seguintes etapas.

A preparação de uma emulsão dos ingredientes de perfume e qualquer agente benéfico ou modificadores que po-

dem incluir agentes emulsificantes ou estabilizadores de emulsão, ocorre sob agitação vigorosa.

A primeira etapa é a adição de óleo de fragrância, resina de melamino-formaldeído metilada (com uma mistura de
5 melamino: formaldeído: metanol nas relações molares aproximadas 1:8:2 a 1:6:4) e um emulsificante. Estes monômeros podem ser produzidos ou os monômeros podem ser empregados diretamente. Um pouco de melamino pode ser substituído por uréia. O ácido é adicionado para ajustar para um pH de 3,5
10 a 6,5 e a temperatura aumentada de 30-45°C. A agitação é permitida prosseguir até que a dispersão fique livre de óleo. Qualquer ácido que não tenha nenhuma propriedade adversa pode ser empregado neste processo, tal como, por exemplo, ácido fórmico ou ácido acético.

15 É particularmente vantajoso se as cápsulas são curadas aquecendo-se a uma temperatura entre 60°C a 100°C durante várias horas sob agitação moderada.

É particularmente vantajoso se durante a fase precoce de cura uma outra adição de uréia, melamino ou outras
20 aminas, ou misturas destas, possa ser feita para reduzir a concentração de formaldeído na dispersão terminada, e aumentar a espessura da parede. Tipicamente 10-80% de melamino e/ou uréia adicional pode ser adicionado neste estágio, e uma relação particularmente vantajosa é 5:1 a 1:1 de melamino:uréia.
25

Uma vez que a cura é concluída, a temperatura é reduzida para cerca de 50°C, e a dispersão é neutralizada antes de ser ajustada para um pH de cerca de 9,5.

Para facilidade de manipulação quando introduzindo as cápsulas em produtos líquidos, é preferível adicionar um agente de dispersão à lama para prevenir as cápsulas de sedimentarem ou de se tornarem cremosas, o que pode formar grandes agregados os quais podem ser difíceis de redistribuir.

A dispersão de cápsula final quando embarcada preferivelmente deveria conter menos do que 0,1% em peso de formaldeído livre medido por GLC, preferivelmente menos do que 100 ppm (peso/ peso) e mais preferivelmente menos do que 10 ppm (peso/peso).

Pode ser vantajoso incorporar fisicamente ou quimicamente outros materiais para melhorar a deposição de cápsula aos substratos ou para melhorar a seletividade de deposição durante a aplicação. Tais materiais como copolímeros ou polímeros catiônicos, por exemplo, imidazol de polivinila, polissacarídeos com base em beta 1,4 ligações tal como goma guar, e copolímeros de poliéster tal como aqueles vendidos comercialmente como polímeros para soltar sujeira para detergentes.

As cápsulas do processo acima geralmente terão um tamanho de partícula na faixa de 5-100 μm dependendo das condições de emulsificação. A parede da cápsula terá uma espessura de 0,025-1,0 μm . Estes parâmetros são preferivelmente para o funcionamento apropriado das cápsulas nesta invenção. Se a parede da cápsula for muito fina, as cápsulas serão muito frágeis para embarque ou manuseio subsequente, se muito grossa elas podem não quebrar quando requerido. Se

as cápsulas são muito pequenas o material de parede pode se tornar uma proporção não economicamente grande da cápsula. As cápsulas muito grandes ou requerem paredes mais grossas a adição de endurecedores ao núcleo para prevenir a quebra na
 5 manipulação ambos dos quais reduzem a quantidade de agente benéfico distribuído.

A dispersão final pode tipicamente conter de 2,5% -80%, preferivelmente 10%-70%, e mais preferivelmente de 20%-70% de cápsulas dispersas em água. Em algumas formas do
 10 processo a água em excesso pode ser removida do éter, uma massa úmida concentrada ou um pó de fluxo livre seco como melhor convir à aplicação subsequente.

Composições Domésticas, de Cuidado Pessoal e de
 Lavanderia

15 As formulações e ingredientes de cosméticos e produtos domésticos, lavanderia e cuidado pessoal, nos quais as cápsulas contendo as composições de fragrância da invenção podem ser empregadas, são bem conhecidos por aqueles versados na técnica, referência pode ser feita aos seguintes trabalhos que são incorporados nesta referência:
 20

Formulating Detergent and Personal Care Products A guide to Product Development de Lo Ho Tai, ISBN 1-89399-7-10-3 publicada pela AOCS Press. Também ao Vol. 67 de Surfactant Science Series Liquid Detergent ISBN 0-8247-9391-0
 25 (Marcel Derker Inc.), bem como às seguintes patentes ou pedidos de patente:

Condicionadores e amaciantes de tecido:

Patente U.S. 6.335.315; 5.674.832; 5.759

990; 5.873.145 e 5.574.279;

Detergentes Líquidos de Lavanderia:

Patentes U.S. 5.929.022; 5.916.862; 5.731.278;
6.470.5071; 5.466.802; 5.460.752 e 5.458.810;

5 Xampus e condicionadores de cabelo:

Patentes U.S. 6.162.428; 5.363.286; 5.985.561;
5.932.203; 5.937.661; 5.776.443; 5.756.486; 5.661.118 e
5.618.523;

A tendência dos materiais de fragrância a vazar
10 das cápsulas será influenciada pela composição do produto.
Os níveis elevados de tensoativos podem ser esperados aumen-
tar a taxa de escapamento ao mesmo tempo em que os níveis
mais baixos de tensoativo não auxiliariam na solubilização.
Outros fatores tal como viscosidade do produto e o pH do
15 produto podem também afetar a taxa de liberação influenciando-se a mobilidade das moléculas ou ionizando-se os grupos
químicos tal como aminas na parede da casca. O efeito de
composições de produto diferentes no vazamento é observado
nos exemplos. Finalmente, os produtos tiveram que funcionar
20 em formulações comerciais, porém quanto à facilidade de teste e para comparação no futuro, foi definida uma solução de
tensoativo tamponada como as condições padrões para um teste
de armazenamento. As cápsulas para produzir 0,5 g em peso
da fragrância encapsulada foram suavemente misturadas em 10g
25 de uma solução de 10% em peso de sulfato de dodecila de sódio em água desmineralizada tamponada para pH 8,5 com um
tampão de fosfato de citrato, e armazenadas em uma garrafa
de vidro a 40°C. A fragrância livre foi determinada por

GCMS de topo livre no começo da experiência e novamente após 4 semanas. Uma amostra de controle foi preparada de 0,5 g da fragrância empregada na encapsulação, dissolvida em uma solução de 10% em peso de sulfato de dodecila de sódio em 5 água desmineralizada tamponada para pH 8,5 com um tampão de fosfato de citrato, e armazenada em uma garrafa de vidro selada a 40°C. A comparação das contagens de área das medições de topo livre no tempo zero indica a extensão de qualquer ingrediente de fragrância que não foi encapsulado, ou a 10 extensão maior do que 50% e mais preferivelmente maior do que 75% da amostra de controle após 4 semanas, armazenada a 40°C.

Ao incorporar a cápsula em produtos líquidos, há uma tendência das cápsulas ficarem "cremosas", isto é, subir 15 para superfície, ou "sedimentar", isto é, afundar, em armazenamento prolongado em uma faixa de temperatura normal (4°C -40°C) devido às diferenças na densidade entre o líquido e as cápsulas. Ao mesmo tempo em que muitos fatores afetam a taxa na qual a cremosidade ou sedimentação ocorre, é útil 20 ser os produtos propriamente dito retardar ou prevenir a separação. Por exemplo, se os produtos têm viscosidade elevada em taxas de cisalhamento muito baixas, as cápsulas tenderão a permanecer uniformemente distribuída em todo o produto. Portanto, é preferível, se os produtos nos quais as 25 cápsulas são introduzidas têm viscosidades maiores do que 100 mPas preferivelmente maiores do que 1000 mPas medidos em uma taxa de cisalhamento de 5 s^{-1} empregando um viscosímetro LVT Brookfield.

A presente invenção será agora descrita em maiores detalhes pelos seguintes exemplos ilustrativos, porém não limitantes.

Exemplo 1: Preparação de Cápsulas

5 Um recipiente cilíndrico de agitação de 2 litros foi cheio com um dispersador tendo um disco de dispersão comercial padrão com um diâmetro de 50 mm.

Ele foi carregado em sucessão com:

- 400 de óleo de fragrância;

10 -86 g de um título de solução aquosa a 70% de uma resina de melamino-formaldeído metilada (relação molar: melamino:formaldeído:metanol. 1:3,9:2,4) com uma viscosidade de 275 mPa.s e um pH de 8,5;

15 - 80 g de título de solução a 20% de sal de sódio de ácido poli-2-acrilamida-2-metilpropanossulfônico;

- 350 g de água;

- 15 g de título de solução a 10% em peso de solução de ácido fórmico aquosa.

20 Esta carga foi processada para uma dispersão de carga ajustando-se a velocidade de agitação para uma velocidade periférica de aproximadamente 20 mps. As temperaturas foram mantidas a cerca de 85°C.

25 Após 60 minutos, a dispersão ficou livre de óleo; um tamanho parcial de cerca de 20-30 µm foi estabelecido. A velocidade de agitação do disco de dispersão foi então reduzida para um nível suficiente para circulação uniforme dos teores do recipiente.

Uma temperatura de cura de 80°C foi determinada, e

uma vez alcançado por injeção de corrente quente, um alimento de 27% de suspensão de melamino-uréia (relação de 2,5:1, melamino:uréia) em ácido fórmico (para ajustar pH para pH 4,5) foi adicionado à dispersão das microcápsulas pré-
5 formadas com uma taxa de fluxo de massa de contato, e foi medido durante o curso de uma hora. Um total de 46g da suspensão de melamino-uréia foi medido.

Uma fase de cura de 120 minutos resultou a 90°C.

Após a dispersão ter sido resfriada a cerca de
10 55°C, ela foi neutralizada com dietanolamina para pH 7,0 e ajustada para um pH de 8,5 empregando amônia.

Um agente de dispersão foi adicionado para produzir uma dispersão de cápsula uniforme com um teor sólido de 50% e uma viscosidade de 88 mPa.s.

15 Exemplo 2: Comparação do Vazamento dos Ingredientes

A Tabela 1 compara o vazamento de componentes de fragrância individuais de uma fragrância encapsulada, empregando o método do exemplo 1, com as cápsulas dosadas no equivalente de 0,5% de fragrância em uma faixa de produtos líquidos de cuidado pessoal e lavanderia. Os resultados são citados como percentual de fragrância liberado comparado com a quantidade equivalente de fragrância livre dosada no mesmo produto como um controle. Alguns dos ingredientes de fra-
25 grância atendem aos critérios para moléculas volumosas da invenção, ao mesmo tempo em que outros exemplos comparativos tal como Acetofenona, Eugenol, Acetato de benzila, e Benzoato de etila não atendem a estes critérios. A concentração

de ingrediente foi medida por GCMS após a cápsula de topo livre de SPME dos voláteis no topo livre após o armazenamento a 40°C durante 4 semanas.

Tabela 1

Compos- to (CAS No.)	Clog P	Per- sil Sens ¹	Le- nor Conc ²	Da- sh Reg ³	Via Sens ⁴	Down y ⁵	Tide Free ⁶	Sam- poo ⁷
1,4- Cineol (470- 67-7)	2,81	1	29	15	10	8	13	2
Euca- liptol (470- 82-6)	2,88	2	36	16	2	2	12	13
Borneol (464- 45-9)	8,09	<1	23	8	3	3	4	2
Benzoa- to de Etila (98-89- 0)	2,64	91	48	100	100	100	97	100
Bucco- xime	2,55	<1	-	3	3	-	3	<1

(75147- 23-8)								
Cedanol (7070- 15-7)	8,12	<1	3	<1	<1	3	1	1
Fruita- te (80657- 64-3)	3,37	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1
β - Ionona (14901- 07-6)	3,71	<1	12	-	<1	<1	1	1
Spiram- brene (121251 -67-0)	4,68	<1	<1	-	<1	<1	<1	<1
Eugenol (97-53- 0)	2,40	45	100	96	93	100	79	88
Galaxo- lida (1222- 05-5)	5,74	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1
Bassi- lato de etileno (105-	2,46	<1	25	-	28	60	<1	89

95-3)								
Aceto- fenona (98-86- 2)	1,58	92	42	95	61	72	73	84
Acetato de ben- zila (140- 11-4)	1,96	86	-	87	-	81	63	100
Para- terciá- rio- butil- ciclo- xanona (98-53- 3)	2,71	10	-	33	34	41	14	2
Acetato de Di- metil- benzil- carbi- nila (151- 06-8)	3,30	4	-	44	11	12	18	<1
A- Damas-	8,82	<1	9	16	<1	<1	<1	<1

ceno (24720- 09-0)								
Cycla- cet (5913- 60-5)	2,87	21	-	-	17	18	25	<1
Vigo- flor (68480- 11-5)	3,14	1	31	6	4	8	6	<1
Cashme- ran (38704- 61-9)	4,00	<1	1	<1	<1	<1	<1	<1
Iso bu- tilqui- nolina (65442- 81-1)	3,98	<1	-	9	5	17	11	<1
Rhubo- fix (41816- 03-9)	3,46	<1	-	<1	<1	<1	<1	<1

*indica não medido

Buccoxime é oxima de 1,5-dimetil-
biciclo[3,2,1]octan-8-ona (Fornecido por Symrise):

Cedanol é 2-Isoborniloxietanol (Fornecido por Takasago);

Fruitate é tríciclo[5,2,1,0]decan-2-carboxilato de etila (Fornecido por Kao);

5 Spirambrene é 2,2,3',7',7'-pentametilespiro(1,3-dioxan-5,2-norcaradieno)deastereoisômeros (Fornecido por Givandand SA);

Galaxolida é 1,2,3,4,6,7,8-Hexaidro-4,6,6,7,8,8-hexametilciclopenta-γ-2-benzopiran (Fornecido por International
10 Flavors and Fragrances);

Cyclacet é Triciclododecanilacetato (Fornecido por International Flavors and Fragrances);

Vigoflor é Decaidroespirofan-2(3H)-5'-(4,7)mentano(5H)indeno (Fornecido por International Flavors
15 and Fragrances);

Cashmeran é 6,7-Hidró-1,1,2,3,3-pentametil-4(5H)-indanona (Fornecido por International Flavors and Fragrances)

Rhubofix é 3',7'-Hexaidrodimetilespirometanonaftaleno (Fornecido por International
20 Flavors and Fragrances).

Os produtos comerciais empregados no teste são como seguem com nome do produto, fornecedor e país de origem.

1. Persil Sensitive detergente líquido concentrado
25 de Hankel na Alemanha;

2. Lenor Concentrate de Procter and Gamble na UK;

3. Dash Regular, detergente líquido de Procter and Gamble na Itália;

4. Via Sensitive detergente líquido concentrado de
Lever Fabergé Suécia;

5. Ultra Downy Procter and Gamble USA;

6. Tide Perfume e Dye Free de Procter and Gamble
5 USA;

7. Shampoo Schauma de Henkel Alemanha.

Ao mesmo tempo em que há algumas variações no es-
capamento de perfume da cápsula em formulações de produto
diferentes, é claro que os ingredientes da fragrância da in-
10 venção não escapam na mesma taxa como os ingredientes de
controle. Atenção particular deve ser prestada à diferença
nos resultados entre Eugenol e Brassilato de Etileno que têm
valores de ClogP similares porém taxas de liberação diferen-
tes nos produtos.

15 Exemplo 3

Tabela 2

Composto (CAS No.)	Clog P	Per- sil Sens ¹	Le- nor Conc ²	Via Sens ⁴	Down y ⁵	Tide Free ⁶	Sam- poo ⁷
Vertenex (32210-23-4)	4,06	0	21	0	0	0	0
Spiranubrene (121251-67-0/ 121351-68-1)	4,68	0	0	0	0	0	0
Limoneno (5989-27-5)	4,35	16	60	28	44	31	15

Nitrila de citronelly (51566-62-2)	3,09	15	47	73	67	82	3
1,4-Cineol (470-67-7)	2,81	1	29	10	8	13	2

Vertenex é Acetato de para-terciário-butilcicloexil (Fornecido por International Flavors and Fragrances);

Spirambrene é 2,2,3',7',7'-Pentametilespiro-(1,3-dioxan-5,2'-norcarano) (Fornecido por Givaudan SA).

A Tabela 2 novamente mostra a mesma variação no escapamento devido às diferenças entre os produtos porém os compostos da invenção tal como Vertenex e 1,4-Cineol são mais bem retidos ao mesmo tempo em que os materiais solúveis em água, isto é, com valores de ClogP mais elevados, tal como limoneno, não são então bem retidos na cápsula.

Exemplo 4

Uma composição de fragrância é mostrada na Tabela 3 tendo uma marca adequada para uso nos produtos domésticos, cuidado pessoal e lavanderia exemplificando a invenção com 26% em peso dos ingredientes, de acordo com a invenção.

Tabela 3

Nome	Fornecedor	CAS	% em peso
Ambrinol 20T	Takasago	41199-19-3	4,0
Borneol		464-45-9	2,0

Cedanol	Takasago	7070-15-7	4,0
α -Damascone		24720-08-0	4,0
Brassilato de etile- no	Takasago	105-95-8	10
Fruitate	Kao	80657-64-3/ 80623-07-0	2,0
Ingredientes Totais da Invenção			26,0%
Propionato de ciclo- exila de Alila		2705-87-5	17,5
Diidromircenol		18479-58-8	35
Acetato de Styrally		98-92-5	17,5
Ciclogalbanato		68901-15-5	4

Exemplo 5

Uma composição de fragrância é mostrada na Tabela 4 tendo marca de frutas adequada para uso em produtos domésticos e de cuidado pessoal, exemplificando a invenção com 43,5% em peso dos ingredientes de acordo com a invenção.

Tabela 4

Nome	Fornece- dor	CAS	% em peso
Aphermate	IFF	25225-08-5	1,5
Fruitate	Kao	80667-64-8/80628- 07-0	4,5
Brassilato de etile-	Takasago	105-95-3	10,0

no			
Trilal	IFF	68039-49-6	5,0
Verdorex	IFF	88-41-5	20,0
β -Ionona	IFF	14901-07-6	2,0
Acetato de carbinila de benzila de dime- tila		151-05-3	0,5
Ingredientes Totais da Invenção			43,5%
Acetato de Cis-3- hexenila		3681-71-8	4
Acetato de Hexila		142-92-7	10
Heptanoato de Alila		142-29-8	16,0
α -Tarpineol		98-55-5	26,5

Exemplo 6

Uma composição de fragrância é mostrada na Tabela 5 tendo uma marca adequada para uso em produtos domésticos e de cuidado pessoal, exemplificando a invenção com 60% em peso dos ingredientes de acordo com a invenção.

Tabela 5

Nome	Forneced- dor	CAS	% em pe- so
Brassilato de etileno	Takasago	105-95-3	10
Verdorex	IFF	88-41-5	10
β -Ionona	IFF	14901-07-6	5,0

1,3,5-Trimetoxibenzeno			35
Ingredientes Totais da Invenção			60%
Acetato de Linalila		115-95-7	20
Linalool		78-70-6	20

Exemplo 7

Uma composição de fragrância é mostrada na Tabela 6 tendo uma marca cítrica adequada para uso em produtos domésticos e de cuidado pessoal, exemplificando a invenção com 83% em peso dos ingredientes de acordo com a invenção.

Tabela 6

Nome	Forneced- dor	CAS	% em peso
Eucaliptol		470-82-6	5,0
Acetato de Iso bor- nila		125-12-2	12,0
Óxido de fenila		101-84-8	10,0
Acetato de boroila		5655-61-8	5,0
β -Ionona	IFF	14901-07-6	10
Fruitate	Kao	80657-64-3/80623- 07-0	3,0
Verdox	IFF	88-41-5	3,0
Acetato de carbinila de benzila de dime- tila		151-05-3	5,0

Brassilato de etile-	Takasago	105-95-3	25,0
no			
Ingredientes Totais			83%
da Invenção			
Óleo de laranja		Óleo natural	12,0
Diidromircenol		18478-68-8	5,0

Exemplo 8

Detergentes líquidos padrões (St Liq 1 a 4) ou detergentes líquidos concentrados (Conc Liq 1 a 4) contendo cápsulas de fragrância da invenção.

Tabela 7: Composições de Detergente de Lavanderia Líquido

	ST	ST	ST	ST	Conc.	Conc.	Conc.	Conc.
	liq 1	liq2	liq3	liq 4	Liq 1	Liq 2	Liq 3	. Liq 4
Ingrediente	% em peso	% em peso	% em peso	% em peso	% em peso	% em peso	% em peso	% em peso
NA-LAS	9,5				14			
NA-PAS		4	10	7	4	5	5	15
NA-AES			2	2				2,6
7EO não iôni-	15	9	3,5	4,5	15	24	22	5
co								
Catiônico			1					2
Sabão	15	15	7	6	12	17	18	11

APG		4				4	2,5	
Glicosamida			4,5	4				6
Mono Etanol Amina			5	3,5				6,5
Citrato	1	1	2	1,2	6	1	4	2
Propileno Glicol		3	6	6	5		3	8
Glicerol						4		
Etanol/IMS (Álcoois In- dustriais)	7	2	1	1		7	1,5	2,2
Perfume	0,3	0,2	0,2	0,0	0,5	0,5	0,4	0,0
Perfume En- capsulado do Exemplo 4		0,2					0,3	
Perfume En- capsulado do Exemplo 5			0,3			0,2		
Perfume En- capsulado do Exemplo 7	0,1				0,1			
Modificador de Viscosida- de	0,25		0,25	0,25	0,18			0,18
Agente anti- espumante (15% MA)	1	0,7	0,7	0,7	1	1	1	1
Agente Fluo-	1,1	0,7	0,7	0,7	1	1	1	1

rescente (15: MA)								
Agente des-floculante e sequestrante (Dequest 2040 e 2010)	1	1	1,4	1	1,5	1,5	1,5	1,5
Enzimas (Protease, Lípase, Celulase, Amilase)	0,7	1,05	1,08	0,9	1,2	1,2	1,2	1,2
Polímeros para conservação de tecido, eliminação de manchas, transferência de tinta, etx.	1	1	1	1	1,5	1,5	1,5	1,5
Água	47,05							
Total	100	100	100	100	100	100	100	100

NA-LAS: Sal de sódio de sulfonato de benzeno de alquila linear com C₁₁-C₁₆ de comprimento de cadeia.

NA-PAS: Sal de sódio de sulfato de alquila, o éster de sulfato de um álcool primário comercial com cadeias de alquila na faixa de C₁₂-C₂₀ de comprimento de cadeia.

NA-AES: Sal de sódio de um sulfato de éter de alquila no qual um álcool foi eterificado com óxido de etileno

antes da preparação do éster de sulfato

7EO não iônico: Alcoois primários de cadeia longa linear condensados com uma média de 7 mols de óxido de etileno

5 Catiônico: um sal de amônio quaternário $RN^+(CH_2)_n(CH_2H_2OH)$ com R sendo uma cadeia de alquila longa na faixa de C_8-C_{14} unidades de carbono

 Sabão: Carboxilados de alquila linear de sódio derivados de uma mistura de ácido graxo de cadeia de alquila
10 longa tal como sebo, palma, ou ácidos graxos de coco

 APG: Tensoativos de poliglicossídeos de cadeia de alquila $C_{10}-C_{18}$

Exemplo 9:

 Amaciante padrão (St FC 1-2) ou Amaciante Líquido
15 Concentrado (Conc FC 1-2) exemplificando a invenção por incorporação de cápsulas dos exemplos 4 e 5.

Tabela 8: Composições de condicionadores de tecido líquido

	St FC 1	St FC 2	Conc FC 1	Conc FC 2
Ingrediente	% em peso	% em peso	% em peso	% em peso
Tetranilat-1	5,0		12,0	
DEQA		7,0		18
Genapol C200	0,1		0,75	3
Álcool Isopropíli-		2,0		3

co				
Poli(etilenoglicol 4000				0,6
Laurex CS	0,4		1,8	
Perfume	0,2	0,25	0,5	0,35
Perfume encapsula- do do Exemplo 4	0,1			0,35
Cloreto de magné- sio ou cálcio		0,2	0,3	
Tinta, Agente An- tiespumante, pre- servativo				Qs
Água QSP	Qs	Qs	Qs	Qs
	100	100	100	100

Tetranyl AHT-1: Éster de sebo semi-duro de metos-
~~sulfato de trietanolamônio, comercializado por Kao Corp.~~

Genapol C200: Etoxilado de cobre, comercializado
 por Clariant

5 Laurel CS: Álcool de cadeia longa, comercializado
 por Albright & Wilson

DEQA: Cloreto de di(oxietil de sebo)dimetilamônio

Exemplo 10:

Uma formulação de Xampu de Cabelo contendo cápsu-
 10 las de perfume dos exemplos 5 e 6.

Tabela 9: Uma Formulação de Xampu

Ingrediente	% em pe-	% em	
-------------	----------	------	--

	so	peso	
Sulfato de Éter de Laurila	14,0	14,0	Texapon N70 ex (Cognis)
Betaína de Cocoamidepropi- la	6,5	6,5	DehytonAB30 ex (Cognis)
Glicerol	2,0	2,0	
N-Cocoilamidoetil-N- etoxycarboximetilglicinato de sódio	2/0	2/0	Miranol 2CM ex (Rhodia)
Monoetanolamida de coco	0,8	0,8	Comperian 100 ex (Cognis)
Copolímero de cloreto de amônio de dimetila e acri- lamida	1,5	1,5	Merquat S ex (Nalco)
Copolímero de metacrilato de estearila e ácido acrí- lico	0,3	0,3	Carnopol 1882 ex (Noveon)
Ácido salicíclico	0,2	0,2	
Benzoato de Sódio	0,5	0,5	
Tetraacetato de diamina de etileno de di-sódio	0,25	0,25	Dissolvine Na-2 ex (Akzo Nobel)
Perfume	0,2	0,2	
Perfume Encapsulado do E- xemplo 5	0,2		
Perfume Encapsulado do E-		0,2	

Exemplo 6			
Diestearato de etileno glicol	0,2	0,2	EginBL 315 ex (Goldschmidt)
Ajuste de pH com solução de ácido cítrico ou solução de hidróxido de sódio	Para pH 5,2	Para pH 5,2	
Água	Para 100	Para 100	

Ao mesmo tempo em que a presente invenção tem sido descrita em detalhes e com referência às modalidades específicas desta, será evidente para alguém versado na técnica que várias alterações e modificações podem ser feitas aqui sem afastar-se do escopo desta.

Este pedido é com base no Pedido de Patente Europeu No. 06.300.921.1 depositado em 4 de setembro de 2006, os ~~teores totais deste sendo desse modo incorporados por referência.~~

Além disso, todos os documentos citados aqui são incorporados por referência.

REIVINDICAÇÕES

1. Fragrância encapsulada **CARACTERIZADA** por compreender uma cápsula casca-núcleo tendo uma espessura de 0,025 a 1,0 μm e uma composição de fragrância, em que a cas-
5 ca da cápsula é uma cápsula de aminoplasto constituída de 50 a 100% em peso de polímero de condensação de formaldeído-melamina ou formaldeído-melamina-ureia ou formaldeído-ureia, e em que a composição de fragrância compreende:

(I) 60 a 100% em peso de pelo menos 5 ingredientes
10 de fragrância, 60-100% em peso dos referidos ingredientes de fragrância compreendendo pelo menos 3 moléculas volumosas tendo um peso molecular menor do que 325 unidades de massa atômica, de acordo com as seguintes estruturas:

(a) moléculas contendo mais que um anel, cada anel
15 contendo entre 3 e 8 átomos de qualquer um de: carbono, oxigênio, nitrogênio ou enxofre em qualquer anel e nenhum dos átomos sendo compartilhado por qualquer um dos anéis, as moléculas sendo selecionadas a partir de óxido de difenila (101-84-8), salicilato de benzila (118-58-1), salicilato de
20 cicloexila (25485-88-5), fenilacetato de etila de fenila (102-20-5), Lyrame (67634-12-2), Orriniff (125352-06-9), Santalex T (68877-29-2), Karanal (117933-89-8), acetal de propileno glicol de vanilina (68527-74-2), Indolene 50 (68908-82-7), Okoumal (131812-67-4), antranilato de cicloe-
25 xila (7779-16-0), 2-cicloexilideno-2-fenil acetonitrila (10461-98-0), cinamato de cicloexila (7791-17-1), cinamato de benzila (103-41-3), eugenol de benzila (120-11-6), antranilato de cinamila (87-29-6), cinamato de cinamila (122-69-

0), acetato de fenila de cinamila (7492-65-1), Doremox (24720-09-0), cetona de dibenzila (102-04-5) e benzofenona (119-61-9);

(b) moléculas tendo pelo menos dois anéis, cada
 5 anel tendo entre 3 e 8 átomos de qualquer um de: carbono, oxigênio, nitrogênio ou enxofre, nas quais quaisquer dois anéis compartilham um átomo comum, as moléculas sendo selecionadas a partir de 2-metil-1,5-dioxaspiro[5,5]undecano (6413-26-9), 2,2,3',7',7'-pentametilespiro(1,3-dioxan-5,2'-
 10 norcarano) (12151-67-0 e 12151-68-1), Vigoflor (68480-11-5), 3,3-dimetil-1,5-dioxaspiro[5,5]undecano (707-29-9), Oxaspiroano (68228-06-8) e 8-metil-1-oxaspiro[4,5]decan-2-ona (94201-19-1);

(c) moléculas tendo pelo menos dois anéis, cada
 15 anel contendo entre 3 e 8 átomos de qualquer um de: carbono, oxigênio, nitrogênio ou enxofre, nas quais quaisquer dois anéis compartilham pelo menos dois átomos comuns adjacentes, as moléculas sendo selecionadas a partir de yara yara (93-04-9), Cumarina (91-64-5), cetona de naftila de metila (941-
 20 98-0), Isobutilquinolina (65442-31-1), Galaxolida (01222-05-5), Tonalida (021145-77-7), Cashmeran (033704-61-9), Cyclacet (5413-60-5), Cyclaprop (17511-60-3), Cyclabute (067634-20-2), Cedramber (019870-74-7), Dulcinyll (55418-52-5), Grisalva (68611-23-4), Ambrinol 20T (41199-19-3), β -
 25 cariofileno, cariofileno, acetato de cariofileno, α -Cedreno, 8-Cedren-13-ol, Cedrol, Acetato de cedrila, Acetato de cedrenila, Formato de cedrila, Éter de metila de cedrila, He-liobouquet (1205-17-0), Fruitate (080657-64-3), 1,4-Cineol

(470-67-7), 1,8-Cineol (470-82-6), Borneol (464-45-9), Acetato de bornila (76-49-3), Isoborneol (124-76-5), Acetato de isobornila (125-12-2), Formato de isobornila (1200-67-5), Éter de metila de isobornila (5331-32-8), propionato de isobornila (2756-56-1), Neoproxen (122795-41-9), Isoproxen (90530-04-4), Florosantol, Cedanol (7070-15-7), Álcool de fechila (1632-73-1), Ambrox (6790-58-5), Iso E Super (54464-57-2), Patchoulol (5986-55-0), Norpatchoulol (41429-52-1), Isolongifolanona (23787-90-8), Acetato de amborila (59056-62-1), Nootkatona (4674-50-4), Florex (69486-14-2), Éter de metila de cedrila (19870-74-7 e 67874-81-1), α -Pineno (80-56-8), β -Pineno (127-91-3), Diidroactinidolida (1536-74-8), α -Copaeno (3856-25-5), Canfeno (79-92-5), Canfor (464-49-3), Fantolida (15323-35-0), Celestolida (13171-00-1), Traseolida (68140-48-7), Éter de isobutila de β -naftila (2173-57-1), Acetato de decaidro- β -naftila (10519-11-6), Scentenal (86803-90-9), Plicatona (41724-19-0), Rhubofix (41816-03-9) e CetaloX (3738-00-9);

(d) moléculas contendo um anel alicíclico único que contém pelo menos 5 átomos, porém não mais do que 8 átomos, de qualquer um de: carbono, oxigênio, nitrogênio e enxofre, em que pelo menos um dos átomos de carbono do anel tem dois substituintes, ou seja, é um átomo de carbono terciário, ou um átomo de carbono alfa no anel é um átomo de carbono terciário, ou o anel tem substituintes em pelo menos três dos átomos que compõem o anel, selecionadas a partir de para-terciária-butil-cicloexanol (98-52-2), acetato de para-terciária-butil-cicloexila (32210-23-4), orto-terciária-

butil-cicloexanol (13491-79-7), acetato de orto-terciária-
 butil-cicloexanol (88-41-8), para-terciária-butil-
 cicloexanona, Hediona (24851-98-7), α -Ionona (127-41-3), β -
 Ionona (14901-07-6), γ -Ionona (79-76-5), α -Damascone (24720-
 5 09-0), β -Damascone (23726-92-3), δ -Damascone (57378-68-4),
 γ -Damascone (35087-49-1), β -Damascenone (23696-85-7), Bacda-
 nol (28219-61-6), Clarycet (131766-73-9), Coniferan (67874-
 72-0), Diidrofloralol (68480-15-9), Ebanol (67801-20-1),
 Fraistone (6290-17-1), Isociclogeraniol (68527-77-5), Jasme-
 10 lia (58285-49-3), Fencol (22627-95-8), Acetato de fencila
 (13851-11-1), Levosandol (28219-61-6), Dioxolano de metila
 (6413-10-1), Nopol (128-50-7), Acetato de nopila (35836-72-
 7), 2,6,6-Trimetil-1-cicloexen-1-acetaldeído (472-66-2),
 2,4,6-Trimetil-3-cicloexeno-1-carboxaldeído (1335-66-6),
 15 2,4,6-Trimetil-3-cicloexeno-1-metanol (68527-77-5), 3-Metil-
 5-propil-2-cicloexen-1-ona (3720-16-9), Dinascona (56973-85-
 4), α -Iso-metil-Ionona (1335-46-9), Polisantol (107898-54-
 4), Romascone (81752-87-6), Timberol (70788-30-6), Amber Co-
 re (139504-68-0), Preciclimona B (52474-60-9), Boronal
 20 (3155-71-3), 2,2,5-Trimetil-5-pentilciclopentanona (65443-
 14-3), Brahmanol (72089-08-8), Sandalmysore core (28219-60-
 5), Sandalore (65113-99-7), 4-terc-Pentilcicloexanona
 (16587-71-6), Kephalis (36306-87-3), Floramat (67801-64-3),
 Jasmapol (37172-53-5), Éster de metila de ácido acético de
 25 3-oxo-2-(2-cis-pentenil)ciclopentano (1211-29-6) e 2-pentil-
 3-metil-2-ciclopentan-1-ona (1128-08-1);

(e) moléculas contendo pelo menos um anel macrocí-
 clico, ou seja, um anel tendo mais do que oito átomos de

qualquer um de: carbono, oxigênio, nitrogênio ou enxofre no
 anel; as moléculas sendo selecionadas a partir de Brassilato
 de Etileno (105-95-3), 3-Metilciclopentadecanona (541-91-3),
 3-Metilciclopentadecenona (82356-51-2), 3-
 5 Metilciclopentadecanol (4727-17-7), Exaltolida (106-02-5),
 Exaltona (502-72-7), Exaltenona (14595-54-1), Cedróxido
 (71735-79-0), 15-Pentadecenolida (34902-57-3), (Z)-9-
 Cicloeptadecen-1-ona (542-46-1); 12-Metil-14-tetradec-9-
 enolida, Ambrettolide (28645-51-4), Ambretona (37609-25-9),
 10 Violiff (87731-18-3), Trimofix O (28371-99-5), Éter de meti-
 la de ciclodecila (2986-54-1) e Etoximetoxiciclododecano
 (5867-11-6);

(f) moléculas contendo pelo menos um anel aromáti-
 co substituído contendo pelo menos 5 átomos de qualquer um
 15 de: carbono, oxigênio, nitrogênio ou enxofre, porém no qual
 pelo menos um substituinte possui um carbono terciário em
 uma posição alfa ou beta no anel, as moléculas sendo seleci-
 onadas a partir de Lilial (80-54-6), Acetocetal (5406-58-6),
 4-terc-Butilbenzenopropionaldeído (18127-01-0), Acetato de
 20 dimetilbenzilcarbinila (151-05-3) e Damascol 4 (4927-36-0);

(g) moléculas contendo um anel aromático substitu-
 ido compreendendo pelo menos 5 átomos com pelo menos 3 gru-
 pos substituintes no anel, todos os quais devem conter pelo
 menos 2 átomos dentre: carbono, oxigênio, nitrogênio ou en-
 25 xofre, as moléculas sendo selecionadas a partir de 1,3,5-
 trimetoxibenzeno (621-23-8), Eugenol de Acetila (93-28-7),
 Vanilina de acetila (881-68-5), Acetato de Anisila (104-21-
 2), Eugenol de Metila (93-15-5), Musk Tibeteno (145-39-1),

Musk ambrette (83-66-9), Ácido 3-4-dimetoxibenzóico (93-07-2), Acetato de 3,4-metilenodioxibenzila (326-61-4) e veratraldeído (120-14-9); e

(II) 0-40% em peso de pró-fragrâncias, solventes,
5 e outros agentes benéficos que possuam quaisquer das características estruturais de (a) a (g) porém não são limitados pelas restrições de peso molecular;

em que 40 a 100% em peso dos ingredientes da fragrância têm valores ClogP entre 1,00 e 4,00.

10 2. Fragrância encapsulada, de acordo com a reivindicação 1, **CARACTERIZADA** pelo fato de que os pesos moleculares dos ingredientes de fragrância individual, encontrados na faixa de 100 a 300 unidades de massa atômica e 80% a 100% em peso de moléculas volumosas, têm valores ClogP maiores do
15 que 1,0.

3. Fragrância encapsulada, de acordo com a reivindicação 1 ou 2, **CARACTERIZADA** pelo fato de que os pesos moleculares dos ingredientes de fragrância individual, encontrados na faixa de 100 a 275 unidades de massa atômica e 80%
20 a 100% em peso de moléculas volumosas, têm valores ClogP maiores do que 1,0.

4. Fragrância encapsulada, de acordo com qualquer uma das reivindicações 1 a 3, **CARACTERIZADA** pelo fato de que 80 a 100% em peso dos ingredientes de fragrância são compre-
25 endidos por pelo menos 3 moléculas volumosas.

5. Fragrância encapsulada, de acordo com qualquer uma das reivindicações 1 a 4, **CARACTERIZADA** pelo fato de que 60 a 100% em peso dos ingredientes de fragrância têm valores

ClogP entre 1,00 e 4,00.

6. Fragrância encapsulada, de acordo com qualquer uma das reivindicações 1 a 5, **CARACTERIZADA** pelo fato de que 80 a 100% em peso dos ingredientes de fragrância têm valores ClogP entre 1,00 e 4,00.

7. Fragrância encapsulada, de acordo com qualquer uma das reivindicações 1 a 6, **CARACTERIZADA** pelo fato de que os agentes benéficos são selecionados dentre o grupo consistindo em agentes neutralizantes de mau odor, óleos essenciais, materiais aromaterapêuticos, agentes quimioestéticos, vitaminas, repelentes de inseto, pró-fragrâncias, absorventes de UV e antioxidantes.

8. Fragrância encapsulada, de acordo com qualquer uma das reivindicações 1 a 7, **CARACTERIZADA** pelo fato de que a composição de fragrância contém menos do que 20% em peso, preferencialmente menos do que 10% em peso, de aldeídos.

9. Fragrância encapsulada, de acordo com qualquer uma das reivindicações 1 a 8, **CARACTERIZADA** pelo fato de que a composição de fragrância contém menos do que 10% em peso, preferencialmente menos do que 1% em peso, de aminas primárias e secundárias.

10. Fragrância encapsulada, de acordo com qualquer uma das reivindicações 1 a 9, **CARACTERIZADA** pelo fato de que o tamanho médio da cápsula é entre 1-100 micrômetros.

11. Composição de cuidado pessoal, lavanderia ou de uso doméstico **CARACTERIZADA** pelo fato de que pode estar na forma de um líquido, gel, pasta, sólido macio ou líquido aplicado a um substrato fibroso tal como um pano para limpe-

za, contendo um ou mais tensoativos e/ou solventes contendo uma fragrância encapsulada, conforme definida em qualquer uma das reivindicações 1 a 10.

12. Composição de cuidado pessoal, lavanderia ou
5 de uso doméstico, de acordo com a reivindicação 11, **CARACTERIZADA** pelo fato de que está na forma de um líquido tendo uma viscosidade maior do que 100 mPa.s em 5 s⁻¹.

13. Composição de cuidado pessoal, lavanderia ou
de uso doméstico, de acordo com a reivindicação 12,
10 **CARACTERIZADA** pelo fato de que está na forma de um líquido tendo uma viscosidade maior do que 1000 mPa.s em 5 s⁻¹.

14. Composição de cuidado pessoal, lavanderia ou
de uso doméstico, de acordo com qualquer uma das reivindica-
ções 11 a 13, **CARACTERIZADA** por ser um detergente líquido de
15 lavanderia, um amaciante líquido de tecido, um xampu de cabelo, um condicionador de cabelo, um sabão líquido, um gel para banho, ou um líquido impregnado em panos de uso doméstico ou lenços para cuidado pessoal.

RESUMO

"FRAGRÂNCIA ENCAPSULADA COMPREENDENDO UMA CÁPSULA CASCA-NÚCLEO E UMA COMPOSIÇÃO DE FRAGRÂNCIA E COMPOSIÇÃO DE CUIDADO PESSOAL, LAVANDERIA OU DE USO DOMÉSTICO"

5 A presente invenção refere-se a uma composição de fragrância a ser incorporada no núcleo de uma cápsula casca-núcleo compreendendo:

(I) 60-100% em peso de pelo menos 5 compostos de fragrância, 20-100% em peso dos referidos compostos de fra-
10 grância compreendendo pelo menos 3 moléculas volumosas tendo um peso molecular menor do que 325 unidades de massa atômica, de acordo com a seguinte estrutura:

(a) moléculas contendo mais do que um anel, cada anel tendo entre 3 e 8 átomos de qualquer um de: carbono, oxigênio, nitrogênio ou enxofre em qualquer anel e átomos
15 sendo compartilhados por quaisquer dos anéis;

(b) moléculas tendo pelo menos dois anéis, cada anel tendo entre 3 e 8 átomos de qualquer um de: carbono, oxigênio, nitrogênio ou enxofre no qual qualquer anel com-
20 partilha um átomo em comum;

(c) moléculas tendo pelo menos dois anéis, cada anel tendo entre 3 e 8 átomos de qualquer um de: carbono, oxigênio, nitrogênio ou enxofre no qual todos dois anéis compartilham pelo menos dois átomos em comun adjacentes;

25 (d) moléculas contendo um anel alicíclico único que contém pelo menos 5 átomos, porém não mais do que 8 átomos, de qualquer um de: carbono, oxigênio, nitrogênio ou enxofre, no qual pelo menos um dos átomos de carbono do anel

tem dois substituintes, ou um átomo de carbono alfa no anel é átomo de carbono terciário, ou o anel tem substituintes em pelo menos três dos átomos que compõem o anel;

(e) moléculas contendo pelo menos um anel macrocíclico, que é um anel tendo mais do que oito átomos de qualquer um de: carbono, nitrogênio, oxigênio ou enxofre no anel;

(f) moléculas contendo pelo menos um anel aromático substituinte contendo pelo menos 5 átomos de qualquer um de: carbono, oxigênio, nitrogênio ou enxofre, porém no qual pelo menos um substituinte tem um carbono terciário em uma posição alfa ou beta no anel;

(g) moléculas contendo um anel aromático substituído compreendendo pelo menos 5 átomos com pelo menos 3 grupos substituintes no anel, todos os quais devem conter pelo menos 2 átomos dentre carbono, oxigênio, nitrogênio ou enxofre; e

(II) 0-40% em peso de pró-fragrâncias, solventes, e outros agentes benéficos que possuem quaisquer das características estruturais de (a) a (g), porém não são limitados pelas restrições de peso molecular.