

19



OFICINA ESPAÑOLA DE
PATENTES Y MARCAS

ESPAÑA



11 Número de publicación: **2 831 311**

51 Int. Cl.:

C07C 43/15 (2006.01)

A61K 8/33 (2006.01)

A61Q 13/00 (2006.01)

C11B 9/00 (2006.01)

12

TRADUCCIÓN DE PATENTE EUROPEA

T3

96 Fecha de presentación y número de la solicitud europea: **12.07.2018 E 18183276 (7)**

97 Fecha y número de publicación de la concesión europea: **02.09.2020 EP 3428146**

54 Título: **Compuestos organolépticos novedosos**

30 Prioridad:

14.07.2017 US 201715649682

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

08.06.2021

73 Titular/es:

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

72 Inventor/es:

**WEISS, RICHARD A. y
NARULA, ANUBHAV P. S.**

74 Agente/Representante:

LEHMANN NOVO, María Isabel

ES 2 831 311 T3

Aviso: En el plazo de nueve meses a contar desde la fecha de publicación en el Boletín Europeo de Patentes, de la mención de concesión de la patente europea, cualquier persona podrá oponerse ante la Oficina Europea de Patentes a la patente concedida. La oposición deberá formularse por escrito y estar motivada; sólo se considerará como formulada una vez que se haya realizado el pago de la tasa de oposición (art. 99.1 del Convenio sobre Concesión de Patentes Europeas).

DESCRIPCIÓN

Compuestos organolépticos novedosos

5 Campo de la invención

La presente invención se refiere a nuevas entidades químicas y a la incorporación y al uso de nuevas entidades químicas como materiales de fragancia.

10 Antecedentes de la invención

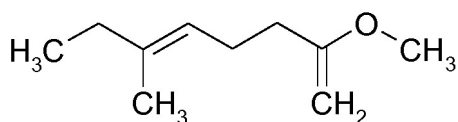
Existe una necesidad continua en la industria de las fragancias de proporcionar nuevos productos químicos para dar a los perfumistas y otras personas la capacidad de crear nuevas fragancias para perfumes, colonias y productos de cuidado personal. Los expertos en la técnica apreciarán cómo diferencias en la estructura química de la molécula pueden dar como resultado diferencias significativas en el olor, las notas y las características de una molécula. Se conocen derivados de metoxi-octadieno como materiales de fragancia por los documentos JPS57108032, EP0104602, CH609560 y DE2154370.

Estas variaciones y la necesidad constante de descubrir y utilizar los nuevos productos químicos en el desarrollo de nuevas fragancias permiten a los perfumistas aplicar los nuevos compuestos en la creación de nuevas fragancias.

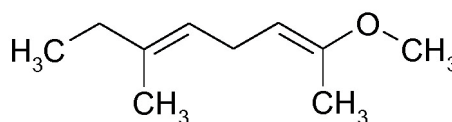
Sumario de la invención

La presente invención proporciona compuestos novedosos y su uso ventajoso inesperado para potenciar, mejorar o modificar la fragancia de perfumes, colonias, agua de tocador, productos para el cuidado de tejidos, productos personales y similares.

Más específicamente, una forma de realización de la presente invención se refiere a compuestos novedosos representados por la fórmula I, 2-metoxi-6-metil-octa-1,5-dieno; la fórmula II, 2-metoxi-6-metil-octa-2,5-dieno; y una mezcla de los mismos que presentan notas herbales, de brisa marina y de ozono inesperadas, y a un procedimiento para mejorar, potenciar o modificar una formulación de fragancia mediante la adición de una cantidad olfativamente aceptable de estos compuestos.



Fórmula I



Fórmula II

35 Otra forma de realización de la presente invención se refiere a una composición de fragancia que comprende los compuestos novedosos proporcionados anteriormente.

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

Otra forma de realización de la presente invención se refiere a un procedimiento para mejorar, potenciar o modificar una formulación de fragancia mediante la adición de una cantidad olfativamente aceptable de los compuestos novedosos proporcionados anteriormente.

45 Estas y otras formas de realización de la presente invención resultarán evidentes leyendo la memoria descriptiva siguiente.

Descripción detallada de la invención

50 Se ha descubierto de forma sorprendente e inesperada que pequeñas diferencias en las estructuras químicas de la presente invención pueden dar como resultado diferencias significativas en olores, notas y características. Específicamente, se ha encontrado que solo el 2-metoxi-6-metil-octa-1,5-dieno, el 2-metoxi-6-metil-octa-2,5-dieno, o su mezcla, poseen propiedades de fragancia deseables y útiles de intensidad elevada mientras que otros análogos cercanos muestran una intensidad mucho más débil, lo que hace que estos análogos sean inadecuados para su uso en fragancias. Así, la presente invención se refiere al descubrimiento sorprendente e inesperado de las propiedades de olor fuertes y particularmente deseables de 2-metoxi-6-metil-octa-1,5-dieno, 2-metoxi-6-metil-octa-2,5-dieno o una mezcla de los mismos.

60 Los expertos en la técnica reconocerán que, si es necesario, los productos isoméricos obtenidos tal como se ha

descrito anteriormente pueden separarse adicionalmente utilizando técnicas conocidas por los expertos en la técnica. Las técnicas adecuadas incluyen, por ejemplo, destilación y cromatografía tal como cromatografía líquida de alto rendimiento, denominada HPLC, particularmente con un cromatógrafo de gel de sílice, y el atrapamiento con cromatografía de gases conocido como atrapamiento GC. No obstante, los productos comerciales se ofrecen principalmente como mezclas isoméricas.

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

El uso de los compuestos de la presente invención puede aplicarse ampliamente en productos de perfumería actuales, incluida la preparación de perfumes y colonias, el perfumado de productos de cuidado personal tales como jabones, geles de ducha y productos para el cuidado del cabello, productos para el cuidado de tejidos, ambientadores de aire y preparaciones cosméticas. La presente invención también se puede utilizar para perfumar agentes de limpieza, tales como, pero sin limitación, detergentes, materiales lavavajillas, composiciones para fregar, limpiacristales y similares.

En estas preparaciones, los compuestos de la presente invención se pueden utilizar solos o en combinación con otras composiciones perfumantes, disolventes, coadyuvantes y similares. Los expertos en la técnica conocen la naturaleza y la variedad de los otros ingredientes que también pueden emplearse. Se pueden emplear muchos tipos de fragancias en la presente invención, siendo la única limitación la compatibilidad con los otros componentes que se empleen. Las fragancias adecuadas incluyen, pero sin limitación, frutas tales como almendra, manzana, cereza, uva, pera, piña, naranja, frambuesa; almizcle, esencias florales tales como de tipo lavanda, de tipo rosa, de tipo lirio, de tipo clavel. Otras esencias agradables incluyen esencias herbales y de bosques derivadas de pino, abeto y otros olores del bosque. Las fragancias también pueden derivarse de diversos aceites, tales como aceites esenciales, o de materiales vegetales tales como menta, hierbabuena y similares.

Se proporciona una lista de fragancias adecuadas en la patente de Estados Unidos N^o 4.534.891, cuyo contenido se incorpora como referencia como si se presentara en su totalidad. Otra fuente de fragancias adecuadas se encuentra en *Perfumes, Cosmetics and Soaps*, segunda edición, editado por W. A. Poucher, 1959. Entre las fragancias proporcionadas en este tratado se encuentran acacia, casia, chipre, ciclamen, helecho, gardenia, espinillo, heliotropo, madreselva, jacinto, jazmín, lila, lirio, magnolia, mimosa, narciso, heno recién cortado, azahar, orquídea, reseda, guisante de olor, trébol, nardo, vainilla, violeta, alhelí y similares.

Los compuestos de la presente invención pueden utilizarse en combinación con un compuesto de fragancia complementario. El término "compuesto de fragancia complementario", tal como se utiliza en el presente documento, se define como un compuesto de fragancia seleccionado del grupo que consiste en 2-[(4-metilfenil)metileno]heptanal (Acalea), éster alílico del ácido iso-amiloxiacético (glicolato de alilamilo), propano-1,3-dioato de (3,3-dimetilciclohexil)etileno (Applelide), (E/Z)-1-etoxi-1-deceno (Arctical), 2-etil-4-(2,2,3-trimetil-3-ciclo-penten-1-il)-2-buten-1-ol (Bacdanol), 2-metil-3-[(1,7,7-trimetilbicyclo[2.2.1]hept-2-il)oxi]exo-1-propanol (Bornafix), 1,2,3,5,6,7-hexahidro-1,1,2,3,3-pentametil-4H-inden-4-ona (Cashmeran), trimetilciclopentenilmetiloxabicyclooctano (Cassiffix), 1,1-dimetoxi-3,7-dimetil-2,6-octadieno (Citral DMA), 3,7-dimetil-6-octen-1-ol (citronelol), acetato de 3A,4,5,6,7,7A-hexahidro-4,7-metano-1H-inden-5/6-ilo (Cyclacet), propionato de 3A,4,5,6,7,7A-hexahidro-4,7-metano-1H-inden-5/6-ilo (Cyclaprop), butirato de 3A,4,5,6,7,7A-hexahidro-4,7-metano-1G-inden-5/6-ilo (ciclobutanato), 1-(2,6,6-trimetil-3-ciclohexen-1-il)-2-buten-1-ona (Delta Damascone), 3-(4-etilfenil)-2,2-dimetilpropanonitrilo (Fleuranyl), 3-(O/P-etilfenil)-2,2-dimetilpropionaldehído (Floralozone), tetrahidro-4-metil-2-(2-metilpropil)-2H-piran-4-ol (Floriffol), 1,3,4,6,7,8-hexahidro-4,6,6,7,8,8-hexametilciclopenta-gamma-2-benzopirano (Galaxolide), 1-(5,5-dimetil-1-ciclohexen-1-il)pent-4-en-1-ona (Galbascone), acetato de E/Z-3,7-dimetil-2,6-octadien-1-ilo (acetato de geranilo), α -metil-1,3-benzodioxol-5-propanal (Helional), 1-(2,6,6-trimetil-2-ciclohexen-1-il)-1,6-heptadien-3-ona (Hexalon), (Z)-2-hidroxibenzoato de 3-hexenilo (salicilato de hexenilo, CIS-3), 4-(2,6,6-trimetil-2-ciclohexen-1-il)-3-buten-2-ona (Ionone α), 1-(1,2,3,4,5,6,7,8-octahidro-2,3,8,8-tetrametil-2-naftalenil)-etan-1-ona (Iso E Super), 3-oxo-2-pentilciclopentanoacetato de metilo (Kharismal), 2,2,4-trimetil-4-fenil-butanonitrilo (Khusinil), 3,4,5,6,6-pentametilhept-3-en-2-ona (Koavone), 3/(4-hidroxil-4-metil-pentil)ciclohexeno-1-carboxaldehído (Lyril), 3-metil-4-(2,6,6-trimetil-2-ciclohexen-1-il)-3-buten-2-ona (Methyl Ionone γ), 1-(2,6,6-trimetil-2-ciclohexen-1-il)pent-1-en-3-ona (Methyl Ionone α Extra, Methyl Ionone N), 3-metil-4-fenilbutan-2-ol (Muguesia), ciclopentadec-4-en-1-ona (Musk Z4), 3,3,4,5,5-pentametil-11,13-dioxatriciclo[7.4.0.0<2,6>]tridec-2(6)-eno (Nebulone), acetato de 3,7-dimetil-2,6-octadien-1-ilo (acetato de nerilo), 3,7-dimetil-1,3,6-octatrieno (Ocimene), orto-toliletanol (Peomosa), 3-metil-5-fenilpentanol (fenoxanol), 1-metil-4-(4-metil-3-pentenil)ciclohex-3-eno-1-carboxaldehído (Precyclemon B), 4-metil-8-metilen-2-adamantanol (Prismantol), 2-etil-4-(2,2,3-trimetil-3-ciclopenten-1-il)-2-buten-1-ol (Sanjinol), 2-metil-4-(2,2,3-trimetil-3-ciclopenten-1-il)-2-buten-1-ol (Santaliff), terpineol, 2,4-dimetil-3-ciclohexeno-1-carboxaldehído (Triplal), decahidro-2,6,6,7,8,8-hexametil-2H-indeno[4,5-B]furano (Trisamber), acetato de 2-terc-butilciclohexilo (Verdox), acetato de 4-terc-butilciclohexilo (Vertenex), acetilcedreno (Vertofix), 3,6/4,6-dimetilciclohex-3-en-1-carboxaldehído (Vertoliff) y (3Z)-1-[(2-metil-2-propenil)oxi]-3-hexeno (Vivaldie).

Los términos "formulación de fragancia", "composición de fragancia" y "composición de perfume" significan lo mismo y se refieren a una composición de consumo que es una mezcla de compuestos que incluye, por ejemplo, alcoholes, aldehídos, cetonas, ésteres, éteres, lactonas, nitrilos, aceites naturales, aceites sintéticos y mercaptanos, que se mezclan de modo que los olores combinados de los componentes individuales produzcan una fragancia agradable o

deseada. La formulación de fragancia de la presente invención es una composición de consumo que comprende un compuesto de la presente invención. La formulación de fragancia de la presente invención comprende un compuesto de la presente invención y además un compuesto de fragancia complementario tal como se ha definido anteriormente.

5 El término "producto de fragancia" significa un producto de consumo que contiene un ingrediente de fragancia que
añade fragancia o enmascara el mal olor. Los productos de fragancia pueden incluir, por ejemplo, perfumes, colonias,
jabones en barra, jabones líquidos, geles de ducha, baños de espuma, cosméticos, productos para el cuidado de la
10 piel tales como cremas, lociones y productos de afeitado, productos para el cuidado del cabello para lavar con champú,
enjuagar, acondicionar, blanquear, colorear, teñir y estilizar, desodorantes y antitranspirantes, productos para el
cuidado femenino tales como tampones y toallas femeninas, productos para el cuidado del bebé tales como pañales,
baberos y toallitas, productos para el cuidado de la familia tales como papel higiénico, pañuelos faciales, pañuelos de
papel o toallas de papel, productos para tejidos tales como suavizantes y ambientadores de tejidos, productos para el
cuidado del aire tales como ambientadores de aire y sistemas de administración de fragancias, preparaciones
15 cosméticas, agentes de limpieza y desinfectantes tales como detergentes, materiales lavavajillas, composiciones para
fregar, limpiacristales y limpiadores de metales tales como limpiadores de ventanas, limpiadores de encimeras,
limpiadores de suelos y de alfombras, limpiadores de inodoros y aditivos blanqueadores, agentes de lavado tales como
agentes de lavado multiuso, de trabajo pesado y de lavado a mano o de tejidos finos que incluyen detergentes para
ropa y aditivos de enjuague, productos de higiene dental y bucal tales como pastas dentales, geles dentales, hilos
20 dentales, limpiadores de dentaduras postizas, adhesivos para dentaduras postizas, dentífricos, blanqueadores de
dientes y enjuagues bucales, productos para el cuidado de la salud y nutricionales y productos alimenticios tales como
productos de aperitivo y de bebida. El producto de fragancia de la presente invención es un producto de consumo que
contiene un compuesto de la presente invención. El producto de fragancia de la presente invención contiene un
compuesto de la presente invención y además un compuesto de fragancia complementario tal como se ha definido
anteriormente.

25 El término "mejorar" en la frase "mejorar, potenciar o modificar una formulación de fragancia" se entiende que significa
elevar la formulación de fragancia a un carácter más deseable. El término "potenciar" se entiende que significa
aumentar la eficacia de la formulación de la fragancia o proporcionar a la formulación de la fragancia un carácter
mejorado. El término "modificar" se entiende que significa proporcionar a la formulación de fragancia un cambio de
30 carácter.

El término "cantidad olfativamente aceptable" se entiende que significa la cantidad de un compuesto presente en una
formulación de fragancia en la que el compuesto contribuirá con sus características olfativas individuales. No obstante,
el efecto olfativo de la formulación de fragancia será la suma del efecto de cada uno de los ingredientes de la fragancia.
35 Así, el compuesto de la presente invención puede utilizarse para mejorar o potenciar las características de aroma de
la formulación de la fragancia, o para modificar la reacción olfativa aportada por otros ingredientes en la formulación.
La cantidad olfativamente aceptable puede variar en función de muchos factores, incluidos otros ingredientes, sus
cantidades relativas y el efecto olfativo que se desea.

40 La cantidad de los compuestos de la presente invención empleados en una formulación de fragancia varía de
aproximadamente el 0,005 a aproximadamente el 70 por ciento en peso, preferentemente del 0,005 a
aproximadamente el 50 por ciento en peso, de forma más preferida de aproximadamente el 0,5 a aproximadamente
el 25 por ciento en peso, y de forma incluso más preferida de aproximadamente el 1 a aproximadamente el 10 por
45 ciento en peso. Los expertos en la técnica podrán emplear la cantidad deseada para proporcionar el efecto y la
intensidad de fragancia deseados. Además de los compuestos de la presente invención, también se pueden utilizar
otros materiales junto con la formulación de la fragancia para encapsular y/o suministrar la fragancia. Algunos
materiales bien conocidos son, por ejemplo, pero sin limitación, polímeros, oligómeros y otros coadyuvantes tales
como tensioactivos, emulsionantes, lípidos, que incluyen grasas, ceras y fosfolípidos, aceites orgánicos, aceites
50 minerales, vaselina, aceites naturales, fijadores de perfumes, fibras, almidones, azúcares y materiales de superficies
sólidas tales como zeolita y sílice. Los polímeros preferidos pueden incluir poliacrilato, poliurea, poliuretano,
poliacrilamida, poliéster, poliéter, poliamida, poli(acrilato-co-acrilamida), almidón, sílice, gelatina y goma arábica,
alginato, quitosano, polilactida, poli(melamina-formaldehído), poli(urea-formaldehído), o una combinación de los
mismos.

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

60 Además, también se ha descubierto, sorprendentemente, que los compuestos de la presente invención proporcionan
un rendimiento superior de los ingredientes y poseen ventajas inesperadas en aplicaciones para contrarrestar malos
olores, tales como la transpiración corporal, el olor ambiental tal como moho y hongos, el cuarto de baño, etc. Los
compuestos de la presente invención eliminan sustancialmente la percepción de malos olores y/o previenen la
formación de dichos malos olores, por lo que pueden utilizarse con una gran diversidad de productos funcionales.

65 Se proporcionan en el presente documento ejemplos de los productos funcionales para ilustrar los diversos aspectos

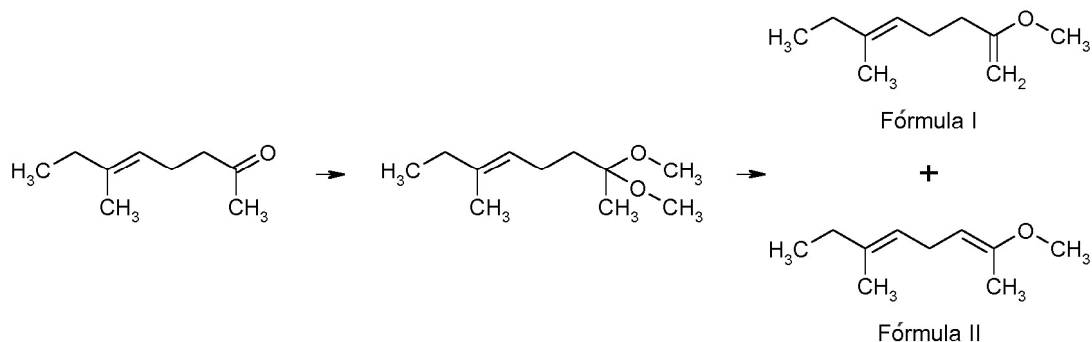
de la presente invención. No obstante, no pretenden limitar el alcance de la presente invención. Los productos funcionales pueden incluir, por ejemplo, una composición de ambientador (o desodorante) para habitaciones convencional, tal como pulverizaciones de ambientador para habitaciones, un aerosol u otro tipo de pulverización, difusores de fragancia, una mecha u otro sistema líquido, o un sólido, por ejemplo velas o una base de cera tal como en pomadas de olor y plásticos, polvos tales como en bolsitas o pulverizaciones secas o geles, tales como en barras de gel sólido, desodorantes para ropa que se aplican en aplicaciones de lavadora tales como en detergentes, polvos, líquidos, blanqueadores o suavizantes de tejidos, ambientadores para tejidos, pulverizaciones para ropa de cama, bloques para armarios, pulverizaciones de aerosol para armarios, o zonas de almacenamiento de ropa o en la limpieza en seco para superar las notas residuales de disolvente en la ropa, accesorios de baño tales como toallas de papel, papel higiénico, toallas sanitarias, toallitas, paños de baño desechables, pañales desechables y desodorantes para cubos de pañales, limpiadores tales como desinfectantes y limpiadores de inodoros, productos cosméticos tales como antitranspirantes y desodorantes, desodorantes corporales generales en forma de polvos, aerosoles, líquidos o sólidos, o productos para el cuidado del cabello tales como lacas para el cabello, acondicionadores, enjuagues, colorantes y tintes para el cabello, ondas permanentes, depilatorios, alisadores para el cabello, aplicaciones para el cuidado del cabello tales como pomadas, cremas y lociones, productos medicinales para el cuidado del cabello que contienen ingredientes tales como sulfuro de selenio, alquitrán de hulla o salicilatos, o champús, o productos para el cuidado de los pies tales como polvos, líquidos o colonias para los pies, lociones para después del afeitado y corporales, o jabones y detergentes sintéticos tales como barras, líquidos, espumas o polvos, control de olores tal como durante procesos de fabricación, tal como en la industria de acabado textil y la industria de la impresión (tintas y papel), control de efluentes tal como en procesos relacionados con la fabricación de pulpa de papel, corrales para ganado y procesamiento de carne, tratamiento de aguas residuales, bolsas de basura o eliminación de basura, o en el control de olores de productos tal como en productos textiles terminados, productos de caucho terminados o ambientadores para automóviles, productos agrícolas y para el cuidado de mascotas tales como efluentes de perreras y gallineros y productos para el cuidado de animales domésticos y mascotas tales como desodorantes, champús o agentes de limpieza, o materiales de camas para animales y en sistemas cerrados de aire a gran escala, tales como auditorios y accesos subterráneos y sistemas de transporte.

Por lo tanto, se observará que la composición de la invención es generalmente una en la que el agente que contrarresta el mal olor está presente junto con un vehículo por medio del cual o desde el cual el agente que contrarresta el mal olor se puede introducir en el espacio de aire en el que está presente el mal olor, o un sustrato sobre el que se ha depositado el mal olor. Por ejemplo, el vehículo puede ser un propulsor de aerosol tal como un clorofluorometano o un sólido tal como una cera, un material plástico, caucho, polvo inerte o un gel. En un ambientador de aire de tipo mecha, el vehículo es un líquido sustancialmente inodoro de baja volatilidad. En diversas aplicaciones, una composición de la invención contiene un agente tensioactivo o un desinfectante, mientras que en otras, el agente que contrarresta el mal olor está presente en un sustrato fibroso. En muchas composiciones de la invención también está presente un componente de fragancia que imparte una fragancia a la composición. Pueden emplearse todas las fragancias mencionadas anteriormente.

Se entiende que una cantidad eficaz en contrarrestar el mal olor significa la cantidad del agente que contrarresta el mal olor de la invención empleada en un producto funcional que es organolépticamente eficaz para hacer que disminuya un mal olor dado mientras reduce la intensidad combinada del nivel de olor, en el que el mal olor dado está presente en el espacio de aire o se ha depositado sobre un sustrato. La cantidad exacta de agente que contrarresta el mal olor empleada puede variar dependiendo del tipo de agente que contrarresta el mal olor, el tipo de vehículo empleado y el nivel deseado de capacidad para contrarrestar el mal olor. En general, la cantidad de agente que contrarresta el mal olor presente es la dosis ordinaria requerida para obtener el resultado deseado. Dicha dosis es conocida por los expertos en la técnica. En una forma de realización preferida, cuando se utiliza junto con productos funcionales sólidos o líquidos malolientes, por ejemplo, jabón y detergente, los compuestos de la presente invención pueden estar presentes en una cantidad que varía de aproximadamente el 0,005 a aproximadamente el 50 por ciento en peso, preferentemente de aproximadamente el 0,01 a aproximadamente el 20 por ciento en peso, y de forma más preferida de aproximadamente el 0,05 a aproximadamente el 5 por ciento en peso, y cuando se utilizan junto con productos funcionales gaseosos malolientes, los compuestos de la presente invención pueden estar presentes en una cantidad que varía de aproximadamente 0,1 a 10 mg por metro cúbico de aire.

Los siguientes se proporcionan como formas de realización específicas de la presente invención. Otras modificaciones de la presente invención serán fácilmente evidentes para los expertos en la técnica. Se entiende que dichas modificaciones se encuentran dentro del alcance de la presente invención. Tal como se utilizan en el presente documento, todos los porcentajes son porcentajes en peso a menos que se indique lo contrario, ppm se entiende que representa partes por millón, l se entiende que es litro, ml se entiende que es mililitro, g se entiende que es gramo, kg se entiende que es kilogramo, mol se entiende que es mol, psi se entiende que es libra fuerza por pulgada cuadrada y mmHg se entiende que es milímetros (mm) de mercurio (Hg). Se entiende que IFF, tal como se utiliza en los ejemplos, significa International Flavours & Fragrances Inc., Nueva York, NY, Estados Unidos.

Ejemplo I



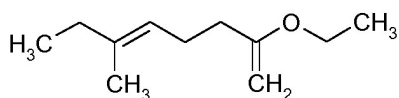
Preparación de 2-metoxi-6-metil-octa-1,5-dieno (fórmula I) y 2-metoxi-6-metil-octa-2,5-dieno (fórmula II): Se preparó en primer lugar 7,7-dimetoxi-3-metil-oct-3-eno (378 g) a partir de 6-metil-oct-5-en-2-ona (300 g) y trimetoximetano (CH(OCH₃)₃) (339 g) en presencia de clorhidrato (HCl) (3 g) a 15-35 °C durante aproximadamente 2 horas. A continuación, se prepararon 2-metoxi-6-metil-octa-1,5-dieno y 2-metoxi-6-metil-octa-2,5-dieno con una relación molar de aproximadamente 2:1 (280 g) a partir de 7,7-dimetoxi-3-metil-oct-3-eno (378 g) en presencia de ácido fosfórico (H₃PO₄) (2,1 g) y piridina (C₅H₅N) (4,2 g) a 190 °C durante 4-5 horas. El 2-metoxi-6-metil-octa-1,5-dieno es una mezcla de isómeros E y Z con una relación molar E/Z de aproximadamente 3:2. El 2-metoxi-6-metil-octa-2,5-dieno es una mezcla de isómeros (2E,5E), (2E,5Z), (2Z,5E) y (2Z,5Z) con una relación molar de aproximadamente 51:34:9:6.

La fórmula I obtenida en la preparación anterior poseía las características espectrales siguientes: RMN de ¹H (400 MHz, CDCl₃): 5,10 (m, 1H), 3,90 (s, 2H), 3,55 (s, 3H), 1,95-2,35 (m, 6H), 1,70 (s, 3H), 0,95-1,05 (m, 3H).

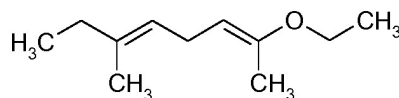
La fórmula II obtenida en la preparación anterior poseía las características espectrales siguientes: RMN de ¹H (400 MHz, CDCl₃): 5,10 (m, 1H), 4,30-4,45 (m, 1H), 3,55 (s, 3H), 2,65-2,80 (m, 2H), 2,00 (m, 2H), 1,70 (s, 3H), 1,65 (s, 3H), 0,95-1,05 (m, 3H).

La descripción de la mezcla de fórmula I y fórmula II indicó que tenía notas herbales fuertes, de brisa marina y de ozono.

Ejemplo II



Fórmula III



Fórmula IV

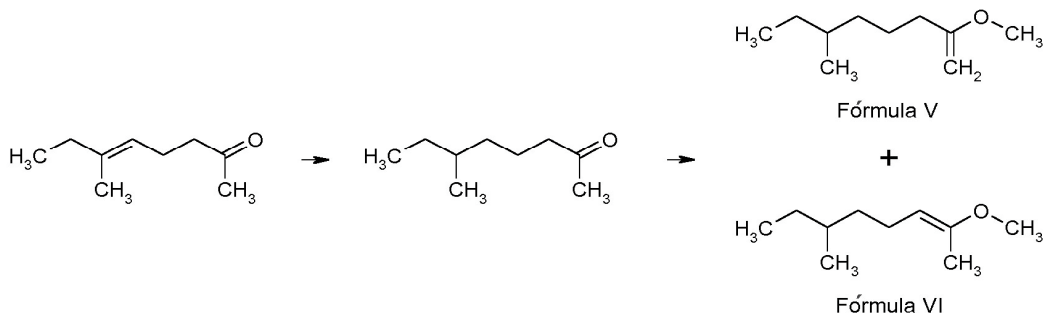
Preparación de 2-etoxi-6-metil-octa-1,5-dieno (fórmula III) y 2-etoxi-6-metil-octa-2,5-dieno (fórmula IV): Se prepararon 2-etoxi-6-metil-octa-1,5-dieno y 2-etoxi-6-metil-octa-2,5-dieno con una relación molar de aproximadamente 3:1 (276 g) de forma similar a anteriormente en el ejemplo I a partir de 6-metil-oct-5-en-2-ona (300 g) y trietiloximetano (CH(OCH₂CH₃)₃) (475 g). El 2-etoxi-6-metil-octa-1,5-dieno es una mezcla de isómeros E y Z con una relación molar E/Z de aproximadamente 3:2. El 2-etoxi-6-metil-octa-2,5-dieno es una mezcla de isómeros (2E,5E), (2E,5Z), (2Z,5E) y (2Z,5Z) con una relación molar de aproximadamente 21:14:9:6.

La fórmula III obtenida en la preparación anterior poseía las características espectrales siguientes: RMN de ¹H (400 MHz, CDCl₃): 5,15 (m, 1H), 3,85 (m, 2H), 3,70 (c, J = 7,0 Hz, 2H), 1,95-2,25 (m, 6H), 1,65 (s, 3H), 1,3 (t, J = 7,0 Hz, 3H), 1,0 (t, J = 7,2 Hz, 3H).

La fórmula IV obtenida en la preparación anterior poseía las características espectrales siguientes: RMN de ¹H (400 MHz, CDCl₃): 5,15 (m, 1H), 4,30-4,50 (m, 1H), 3,60-3,80 (m, 2H), 2,65-2,85 (m, 2H), 2,00 (m, 2H), 1,80 (s, 3H), 1,65 (s, 3H), 1,3 (t, J = 7,0 Hz, 3H), 1,0 (t, J = 7,2 Hz, 3H).

La descripción de la mezcla de fórmula III y fórmula IV indicó que tenía notas florales pero débiles.

Ejemplo III



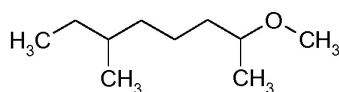
Preparación de 2-metoxi-6-metil-oct-1-eno (fórmula V) y 2-metoxi-6-metil-oct-2-eno (fórmula VI): Se hidrogenó 6-metil-oct-5-en-2-ona (220 g) con paladio sobre carbono (Pd/C) (1%) en atmósfera de hidrógeno (H₂) (200 psi) a 60 °C para proporcionar 6-metil-octan-2-ona (215 g). Siguiendo el mismo esquema de reacción que en el ejemplo I, se prepararon después 2-metoxi-6-metil-oct-1-eno y 2-metoxi-6-metil-oct-2-eno con una relación molar de aproximadamente 2:3 (154 g) a partir de 6-metil-octan-2-ona (215 g) y trimetoximetano (240 g). El 2-metoxi-6-metil-oct-2-eno es una mezcla de isómeros E y Z con una relación molar E/Z de aproximadamente 9:1.

La fórmula V obtenida en la preparación anterior poseía las características espectrales siguientes: RMN de ¹H (400 MHz, CDCl₃): 3,85 (s, 2 H), 3,50 (s, 3 H), 1,90-2,10 (m, 2 H), 1,10-1,60 (m, 7 H), 0,90 (m, 6 H).

La fórmula VI obtenida en la preparación anterior poseía las características espectrales siguientes: RMN de ¹H (400 MHz, CDCl₃): 4,35-4,45 (m, 1 H), 3,50 (s, 3 H), 2,00 (m, 2 H), 1,80 (s, 3 H), 1,10-1,60 (m, 5 H), 0,90 (m, 6 H).

La descripción de la mezcla de fórmula V y fórmula VI indicó que tenía notas florales pero débiles.

Ejemplo IV



Fórmula VII

Preparación de 2-metoxi-6-metil-octano (fórmula VII): Se hidrogenaron 2-metoxi-6-metil-oct-1-eno y 2-metoxi-6-metil-oct-2-eno preparados en el ejemplo III (300 g) con paladio sobre carbono (1%) en atmósfera de hidrógeno (200 psi) a 80 °C para proporcionar 2-metoxi-6-metil-octano (177 g).

La fórmula VII obtenida en la preparación anterior poseía las características espectrales siguientes: RMN de ¹H (400 MHz, CDCl₃): 3,30 (s, 3 H), 3,25 (m, 1 H), 1,20-1,55 (m, 7 H), 1,10 (d, J = 6,2 Hz, 3 H), 1,05-1,15 (m, 2 H), 0,80-0,90 (m, 6H).

La descripción de la fórmula VII indicó que tenía notas herbales, florales pero muy débiles.

Ejemplo VI

Las propiedades de fragancia de los compuestos anteriores (es decir, fórmula I-VII) se evaluaron utilizando una intensidad de olor de 0 a 10, en la que 0 = ninguna, 1 = extremadamente débil, 5 = moderada, 10 = extremadamente fuerte. Los compuestos de fórmulas III-VII no son según la invención. Las puntuaciones promedio se indican a continuación:

Compuesto	Perfil de olor	Intensidad
Mezcla de fórmulas I / II	Herbal fuerte, brisa marina y ozono	10
Mezcla de fórmulas III / IV	Floral pero débil	5
Mezcla de fórmulas V / VI	Floral pero débil	4
Mezcla de fórmula VII	Herbal, floral pero muy débil	3

La mezcla de fórmula I y fórmula II mostró olores fuertes y particularmente deseables, superiores a otros análogos cercanos. Estas propiedades ventajosas son inesperadas.

REIVINDICACIONES

1. Un compuesto seleccionado del grupo que consiste en:
 - 5 2-metoxi-6-metil-octa-1,5-dieno;
 - 2-metoxi-6-metil-octa-2,5-dieno; y
 - una mezcla de los mismos.
- 10 2. Una formulación de fragancia que contiene una cantidad olfativamente aceptable de un compuesto seleccionado del grupo que consiste en:
 - 15 2-metoxi-6-metil-octa-1,5-dieno;
 - 2-metoxi-6-metil-octa-2,5-dieno; y
 - una mezcla de los mismos, en la que la cantidad olfativamente aceptable es del 0,005 al 50 por ciento en peso de la formulación de fragancia.
- 20 3. La formulación de fragancia de la reivindicación 2, en la que la cantidad olfativamente aceptable es del 0,5 al 25 por ciento en peso de la formulación de fragancia.
- 25 4. La formulación de fragancia de la reivindicación 2, en la que la cantidad olfativamente aceptable es del 1 al 10 por ciento en peso de la formulación de fragancia.
5. La formulación de fragancia de la reivindicación 2 o de cualquiera de las reivindicaciones 3 a 4, que comprende además un material seleccionado del grupo que consiste en un polímero, un oligómero y un coadyuvante.
- 30 6. La formulación de fragancia de la reivindicación 5, en la que el polímero se selecciona del grupo que consiste en poliacrilato, poliurea, poliuretano, poli(acrilamida), poliéster, poliéter, poliamida, poli(acrilato-co-acrilamida), almidón, sílice, gelatina y goma arábiga, alginato, quitosano, polilactida, poli(melamina-formaldehído), poli(urea-formaldehído) y una combinación de los mismos.
- 35 7. Un procedimiento para mejorar, potenciar o modificar una formulación de fragancia mediante la adición de una cantidad olfativamente aceptable de un compuesto seleccionado del grupo que consiste en:
 - 40 2-metoxi-6-metil-octa-1,5-dieno;
 - 2-metoxi-6-metil-octa-2,5-dieno; y
 - una mezcla de los mismos, en el que la cantidad olfativamente aceptable es del 0,005 al 50 por ciento en peso de la formulación de fragancia.
- 45 8. El procedimiento de la reivindicación 7, en el que la cantidad olfativamente aceptable es del 0,5 al 25 por ciento en peso de la formulación de fragancia.
- 50 9. El procedimiento de la reivindicación 7, en el que la cantidad olfativamente aceptable es del 1 al 10 por ciento en peso de la formulación de fragancia.
10. Un producto de fragancia que contiene la formulación de fragancia de cualquiera de las reivindicaciones 2 a 6.
11. El producto de fragancia de la reivindicación 10, en el que el producto de fragancia se selecciona del grupo que consiste en un perfume, una colonia, agua de tocador, un producto cosmético, un producto de cuidado personal, un producto para el cuidado de tejidos, un producto de limpieza, un ambientador de aire, un jabón en barra, un jabón líquido, un gel de ducha, un baño de espuma, un producto para el cuidado de la piel, un producto para el cuidado del cabello, un desodorante, un antitranspirante, un producto para el cuidado femenino, un producto para el cuidado del bebé, un producto para el cuidado familiar, un producto para el cuidado del aire, un sistema de suministro de fragancias, un desinfectante, un agente de lavado, un producto de higiene dental y bucal, un producto para el cuidado de la salud y nutricional y un producto alimentario.
- 60 12. El producto de fragancia de la reivindicación 11, en el que el producto de limpieza se selecciona del grupo que consiste en un detergente, un material lavavajillas, una composición para fregar, un limpiacristales, un limpiador de metales, un limpiador de encimeras, un limpiador de suelos, un limpiador de alfombras, un limpiador de inodoros y un aditivo blanqueador.

13. Producto de fragancia según la reivindicación 11 o la reivindicación 12, en el que el agente de lavado se selecciona del grupo que consiste en un detergente para la ropa y un aditivo de enjuague.