

19



OFICINA ESPAÑOLA DE
PATENTES Y MARCAS

ESPAÑA



11 Número de publicación: **2 881 205**

51 Int. Cl.:

A61K 8/00 (2006.01)

C11B 9/00 (2006.01)

C07C 47/225 (2006.01)

12

TRADUCCIÓN DE PATENTE EUROPEA

T3

86 Fecha de presentación y número de la solicitud internacional: **18.12.2017 PCT/EP2017/083377**

87 Fecha y número de publicación internacional: **28.06.2018 WO18114844**

96 Fecha de presentación y número de la solicitud europea: **18.12.2017 E 17821576 (0)**

97 Fecha y número de publicación de la concesión europea: **09.06.2021 EP 3558213**

54 Título: **Olor a lirio de los valles**

30 Prioridad:

21.12.2016 EP 16205933

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

29.11.2021

73 Titular/es:

**FIRMENICH SA (100.0%)
7, Rue de la Bergère
1242 Satigny, CH**

72 Inventor/es:

CHAPUIS, CHRISTIAN

74 Agente/Representante:

GONZÁLEZ PECES, Gustavo Adolfo

ES 2 881 205 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

Olor a lirio de los valles

Campo técnico

- 5 La presente invención se refiere al campo de la perfumería. Más concretamente, se trata de la utilización como ingrediente perfumante del compuesto de fórmula (I) definido a continuación, que es un ingrediente perfumante útil de tipo floral y de melocotón blanco. Por lo tanto, siguiendo lo mencionado aquí, la presente invención comprende el compuesto de la invención como parte de una composición perfumante o de un producto de consumo perfumante.

Técnica anterior

- 10 Uno de los ingredientes más buscados en el campo de la perfumería son los que dan una impresión floral y, en particular, un olor a lirio de los valles. Dicha nota es muy apreciada y se utiliza en multitud de productos de consumo perfumados. Desde hace décadas, se han realizado muchos esfuerzos para obtener compuestos que posean este olor floral blanco tan complejo, sobre todo desde que el uso de Lilial® (2-metil-3-[4-(2-metil-2-propanil)fenil]propanal, marca comercial de Givaudan-Roure SA, Vernier, Suiza), que representa uno de los ingredientes perfumantes más valiosos con una connotación de lirio de los valles y acuosa, se ha visto limitado por diversas razones.

Así pues, es necesario desarrollar nuevos ingredientes perfumantes que confieran una nota de olor floral lo más parecida posible al olor natural de la flor del lirio de los valles.

- 20 US 2013/0090390 informa como un compuesto que imparte dichas propiedades olfativas 3-(4-isopropilciclohex-1-en-1-il)propanal. En particular, el (R)-3-(4-isopropilciclohex-1-en-1-il)propanal confiere una nota de lirio de los valles, floral, dulce, acuosa, empolvada y similar al ozono, mientras que el (S)-3-(4-isopropilciclohex-1-en-1-il)propanal es menos preferido y confiere una nota de lirio de los valles, afrutada, verde, acuosa y aldehídica. Dicho documento también menciona el 3-(4-isopropilciclohex-1-en-1-il)-2-metilpropanal sin hacer ninguna distinción entre los olores de cada diastereoisómero. Sin embargo, este compuesto, a pesar de su similitud estructural con el 3-(4-isopropilciclohex-1-en-1-il)propanal, confiere un olor aldehídico, dulce, acuoso y floral de tipo ciclamen, carente de notas de lirio de los valles. Este documento no se pronuncia sobre la estereoquímica de esta molécula dejando suponer que el olor corresponde al de una mezcla que comprende los cuatro diastereoisómeros.

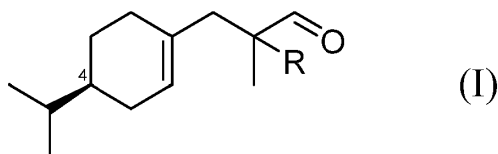
La presente invención proporciona un novedoso ingrediente de perfumería que imparte una nota de lirio de los valles, utilizando el compuesto de fórmula (I) que también posee una connotación de melocotón blanco. Nunca se han mencionado las propiedades organolépticas del compuesto de fórmula (I).

- 30 El documento de la técnica anterior mencionado anteriormente no informa ni sugiere ninguna propiedad organoléptica del compuesto de fórmula (I), ni ningún uso de dicho compuesto en el campo de la perfumería.

Sumario de la invención

- 35 La invención se refiere al compuesto de fórmula (I) que imparte, además de la nota de olor a lirio de los valles, una nota de olor a melocotón blanco y su uso como ingrediente perfumante. La combinación de ambos olores es muy rara.

Así, una primera realización de la presente invención es un compuesto de fórmula



en forma de cualquiera de sus estereoisómeros o como mezcla de los mismos, en el que el carbono 4 del grupo ciclohexenilo tiene una configuración S absoluta y R representa un átomo de hidrógeno o un grupo metilo.

- 40 Una realización objeto de la presente invención es un procedimiento para conferir, potenciar, mejorar o modificar las propiedades de olor de una composición perfumante o de un artículo perfumado, cuyo procedimiento comprende añadir a dicha composición o artículo una cantidad efectiva de al menos un compuesto de fórmula (I) como se ha definido anteriormente.

Otra realización de la presente invención es una composición perfumante que comprende

- 45 i) al menos un compuesto de fórmula (I), como se ha definido anteriormente;

ii) al menos un ingrediente seleccionado del grupo formado por un portador de perfumería y una base de perfumería; y

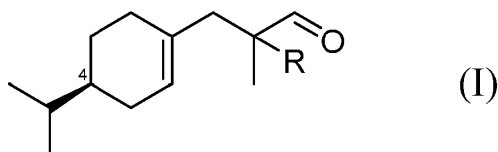
iii) opcionalmente, al menos un adyuvante de perfumería.

5 Una última realización de la presente invención es un producto de consumo perfumado que comprende al menos un compuesto de fórmula (I) o una composición como la definida anteriormente.

Descripción de la invención

Sorprendentemente, se ha descubierto ahora que el compuesto de fórmula (I), que tiene una configuración S absoluta en el carbono que lleva el grupo isopropilo, posee una nota de olor muy interesante con connotación de lirio de los valles que es particularmente apreciada. Esos compuestos tampoco se han divulgado nunca.

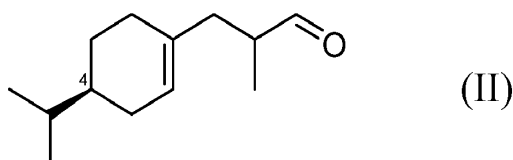
10 Un primer objeto de la presente invención es un compuesto de fórmula



15 en forma de uno cualquiera de sus estereoisómeros o como mezcla de los mismos, en el que el carbono 4 del grupo ciclohexenilo tiene una configuración S absoluta y R representa un átomo de hidrógeno o un grupo metilo. Dicho compuesto puede utilizarse como ingrediente perfumante, por ejemplo para impartir notas de olor del tipo lirio de los valles con una connotación de melocotón blanco.

20 En aras de la claridad, por la expresión "cualquiera de sus estereoisómeros", o similares, se entiende el significado normal que entiende un experto en la materia, es decir, que los compuestos de la invención pueden ser puros o estar en forma de mezcla de diastereoisómeros, siempre que, por supuesto, el carbono 4 del grupo ciclohexenilo tenga una configuración S absoluta. El compuesto de la invención puede ser (R)-3-((S)-4-isopropilciclohex-1-en-1-il)-2-metilpropanal, (S)-3-((S)-4-isopropilciclohex-1-en-1-il)-2-metilpropanal o una mezcla de ellos. Preferentemente, el compuesto de la invención puede estar en forma de una mezcla que comprende (R)-3-((S)-4-isopropilciclohex-1-en-1-il)-2-metilpropanal en una cantidad comprendida entre el 35 % en peso y el 65 % en peso y (S)-3-((S)-4-isopropilciclohex-1-en-1-il)-2-metilpropanal en una cantidad comprendida entre el 35 % en peso y el 65 % en peso.

Según una cualquiera de las realizaciones anteriores, el compuesto de la invención es de fórmula



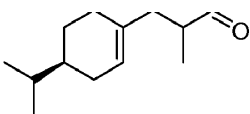
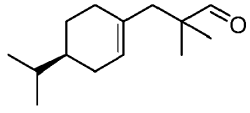
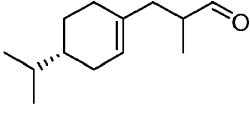
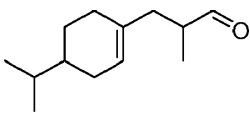
25 en forma de cualquiera de sus estereoisómeros o como mezcla de los mismos, en el que el carbono 4 del grupo ciclohexenilo tiene una configuración S absoluta.

30 Como ejemplo específico de los compuestos de la invención, se puede citar, 3-((S)-4-isopropilciclohex-1-en-1-il)-2-metilpropanal que tiene un potente olor a lirio de los valles y acuoso típico de lillial® que comprende un toque a hesperidio y lactónico de melocotón blanco que es una combinación rara para los ingredientes de perfumería. Dicho compuesto se caracteriza por un olor que tiene la dualidad de lirio de los valles y notas acuáticas como Lillial®, comprendiendo también connotaciones petalinas y aterciopeladas. El isómero 3-((R)-4-isopropilciclohex-1-en-1-il)-2-metilpropanal es menos potente y posee una nota de salida aldehídica-metálica, mientras que el aspecto floral con la dualidad acuosa y de lirio de los valles está menos presente, lo que lo hace menos interesante desde el punto de vista organoléptico. Además, una mezcla que comprende 3-((S)-4-isopropilciclohex-1-en-1-il)-2-metilpropanal y 3-((R)-4-isopropilciclohex-1-en-1-il)-2-metilpropanal en una proporción de 1 a 1, que debe corresponder al 3-(4-isopropilciclohex-1-en-1-il)-2-metilpropanal divulgado US 2013/0090390, es menos fuerte y difusivo que el compuesto de la invención y pierde su frescura y su ciclamen floral volviéndose más graso-aldehídico y metálico.

40 Como otro ejemplo específico de los compuestos de la invención, se puede citar, el (S)-3-(4-isopropil-1-ciclohexen-1-il)-2,2-dimetilpropanal que posee un olor similar al 3-((S)-4-isopropilciclohex-1-en-1-il)-2-metilpropanal siendo un poco menos potente.

Las propiedades organolépticas de los compuestos de la invención y del compuesto de la técnica anterior se resumen en la Tabla 1.

Cuadro 1 : Compuestos y sus propiedades olfativas

Estructura y nombre del compuesto	Notas de olor
	lirio de los valles, acuático, hesperidio y melocotón blanco lactónico
3-((S)-4-isopropilciclohex-1-en-1-il)-2-metilpropanal	
	lirio de los valles, melocotón blanco acuoso y lactónico
3-((S)-4-isopropilciclohex-1-en-1-il)-2,2-dimetilpropanal	
	aldehídico-metálico, menos floral-muguet, menos potente
3-((R)-4-isopropilciclohex-1-en-1-il)-2-metilpropanal	
Compuesto de la técnica anterior	
	graso-aldehídico y metálico menos fuerte y difusivo
3-(4-isopropilciclohex-1-en-1-il)-2-metilpropanal	

5 Cuando se compara el olor de los compuestos de la invención con el del compuesto de la técnica anterior, es decir, 3-(4-isopropilciclohex-1-en-1-il)-2-metilpropanal como se informa en US 2013/0090390, el compuesto de la invención se distingue por una nota claramente más potente y difusiva que tiene un olor a sandía y un aspecto lactónico característico que recuerda al melocotón blanco y por carecer de la nota aldehídica característica del compuesto o compuestos de la técnica anterior. Además, el compuesto de la invención, al contrario de lo que ocurre en la técnica anterior, además de una nota acuosa de lirio de los valles, muestra un olor que se alía con una textura de piel de melocotón como aterciopelada y pétrea. Los olores del compuesto de la invención también carecen, o no poseen, notas dulces significativas que son características de los compuestos de la técnica anterior. Dichas diferencias hacen que los compuestos de la invención y los de la técnica anterior sean cada uno de ellos adecuados para diferentes usos, es decir, para impartir diferentes impresiones organolépticas.

10 Como se ha mencionado anteriormente, la invención se refiere al uso de un compuesto de fórmula (I) como ingrediente perfumante. En otras palabras, se trata de un procedimiento o proceso para conferir, potenciar, mejorar o modificar las propiedades olfativas de una composición perfumante o de un artículo perfumado o de una superficie, cuyo procedimiento comprende añadir a dicha composición o artículo una cantidad efectiva de al menos un compuesto de fórmula (I), por ejemplo para impartir su nota típica.

15 Por "uso de un compuesto de fórmula (I)" debe entenderse aquí también el uso de cualquier composición que contenga un compuesto (I) y que pueda emplearse ventajosamente en la industria de la perfumería.

20 Dichas composiciones, que de hecho pueden emplearse ventajosamente como ingredientes perfumantes, son también un objeto de la presente invención.

Por lo tanto, otro objeto de la presente invención es una composición perfumante que comprende:

- i) como ingrediente perfumante, al menos un compuesto de la invención como el definido anteriormente;
- ii) al menos un ingrediente seleccionado del grupo formado por un portador de perfumería y una base de perfumería; y
- 5 iii) opcionalmente, al menos un adyuvante de perfumería.

Por "portador de perfumería" se entiende un material prácticamente neutro desde el punto de vista de la perfumería, es decir, que no altera significativamente las propiedades organolépticas de los ingredientes perfumantes. Dicho portador puede ser un líquido o un sólido.

10 Como portador líquido se puede citar, como ejemplos no limitativos, un sistema emulsionante, es decir, un sistema de disolvente y de tensioactivo, o un disolvente comúnmente utilizado en perfumería. Una descripción detallada de la naturaleza y el tipo de disolventes utilizados habitualmente en perfumería no puede ser exhaustiva. Sin embargo, se pueden citar como ejemplos no limitativos disolventes como el butilenglicol o el propilenglicol, el glicerol, el dipropilenglicol y su monoéter, el triacetato de 1,2,3-propanetriilo, el glutarato de dimetilo, el adipato de dimetilo 1,3-diacetilopropan-2-il acetato, ftalato de dietilo, miristato de isopropilo, benzoato de bencilo, alcohol bencílico, 2-(2etoxietoxi)-1-etano, citrato de trietilo o sus mezclas, que son los más utilizados. Para las composiciones que comprenden a la vez un portador de perfumería y una base de perfumería, otros portadores de perfumería adecuados, además de los especificados anteriormente, pueden ser también el etanol, las mezclas de agua/etanol, el limoneno u otros terpenos, las isoparafinas como las conocidas bajo la marca Isopar® (origen: Exxon Chemical) o éteres de glicol y ésteres de glicol como los conocidos bajo la marca Dowanol® (origen: Dow Chemical Company), o aceites de ricino hidrogenados como los conocidos bajo la marca Cremophor® RH 40 (origen: BASF).

20 Por portador sólido se entiende un material al que se puede unir química o físicamente la composición perfumante o algún elemento de la misma. En general, estos portadores sólidos se emplean para estabilizar la composición, o para controlar la tasa de evaporación de las composiciones o de algunos ingredientes. El uso del portador sólido es de uso corriente en la técnica y un experto en la materia sabe cómo alcanzar el efecto deseado. Sin embargo, a modo de ejemplo no limitativo de portadores sólidos, se pueden citar gomas o polímeros absorbentes o materiales inorgánicos, como polímeros porosos, ciclodextrinas, materiales a base de madera, geles orgánicos o inorgánicos, arcillas, talco de yeso o zeolitas.

25 Como otros ejemplos no limitantes de portadores sólidos, se pueden citar los materiales de encapsulación. Ejemplos de estos materiales pueden ser materiales formadores de pared y plastificantes, como mono, di o trisacáridos, almidones naturales o modificados, hidrocoloides, derivados de la celulosa, acetatos de polivinilo, polivinilalcoholes, proteínas o pectinas, o incluso los materiales citados en textos de referencia como H. Scherz, Hydrokolloide: Stabilisatoren, Dickungs- und Geliermittel in Lebensmitteln, Band 2 der Schriftenreihe Lebensmittelchemie, Lebensmittelqualität, Behr's Verlag GmbH & Co., Hamburg, 1996. La encapsulación es un proceso bien conocido por un experto en la materia, y puede realizarse, por ejemplo, mediante técnicas como el secado por pulverización, la aglomeración o, sin embargo, la extrusión; o consiste en una encapsulación de recubrimiento, incluyendo la coacervación y la técnica de coacervación compleja.

30 Como otros ejemplos no limitantes de portadores sólidos, se pueden citar en particular las cápsulas con núcleo de concha con resinas de tipo aminoplástico, poliamida, poliéster, poliurea o poliuretano o una mezcla de las mismas (todas dichas resinas son bien conocidas por un experto en la materia) utilizando técnicas como el proceso de separación de fases inducido por polimerización, polimerización interfacial, coacervación o en conjunto (dichas técnicas han sido descritas todas ellas en la técnica anterior), opcionalmente en presencia de un estabilizador polimérico o de un copolímero catiónico.

35 Las resinas pueden producirse por policondensación de un aldehído (por ejemplo, formaldehído, 2,2-dimetoxietanal, glioxal, ácido glioxílico o glicolaldehído y mezclas de los mismos) con una amina, como la urea, la benzoguanamina, el glicolurilo, la melamina, la melamina de metilol, la melamina de metilol metilado, el guanazol y similares, así como sus mezclas. Alternativamente, se pueden utilizar resinas preformadas de poliaminas alquiladas como las disponibles comercialmente bajo la marca Urac® (origen: Cytec Technology Corp.), Cymel® (origen: Cytec Technology Corp.), Urecoll® o Luracoll® (origen: BASF).

40 Otras resinas son las producidas por la policondensación de un polioliol, como el glicerol, y un poliisocianato, como un trímero de diisocianato de hexametileno, un trímero de diisocianato de isofoforona o diisocianato de xilileno o un Biuret de diisocianato de hexametileno o un trímero de diisocianato de xilileno con trimetilolpropano (conocido con el nombre comercial de Takenate®, origen: Mitsui Chemicals), entre ellos un trímero de diisocianato de xilileno con trimetilolpropano y un Biuret de diisocianato de hexametileno.

45 Algunas de las publicaciones seminales relacionadas con la encapsulación de perfumes mediante la policondensación de amino resinas, concretamente resinas a base de melamina con aldehídos incluyen artículos como los publicados por K. Dietrich et al. en Acta Polymerica, 1989, vol. 40, páginas 243, 325 y 683 así como

- en 1990, vol. 41, página 91. Dichos artículos ya describen los diversos parámetros que afectan a la preparación de dichas microcápsulas de núcleo concha siguiendo procedimientos de la técnica anterior que también se detallan y ejemplifican en la literatura de patentes. US 4'396'670, al Wiggins Teape Group Limited es un ejemplo temprano pertinente de esto último. Desde entonces, muchos otros autores han enriquecido la literatura en este campo y sería imposible abarcar aquí todos los desarrollos publicados, pero el conocimiento general en tecnología de encapsulación es muy significativo. Otras publicaciones más recientes de interés, que revelan usos adecuados de dichas microcápsulas, están representadas, por ejemplo, por el artículo de H.Y.Lee et al. en Journal of Microencapsulation, 2002, vol. 19, páginas 559-569 y la publicación de la patente internacional WO 01/41915 o también el artículo de S. Bône et al. en Chimia, 2011, vol. 65, páginas 177-181.
- Por "base de perfumería" se entiende aquí una composición que comprende al menos un co-ingrediente perfumante. Dicho co-ingrediente perfumante no es de fórmula (I). Además, por "coingrediente perfumante" se entiende aquí un compuesto que se utiliza en una preparación o composición perfumante para impartir un efecto hedónico. En otras palabras, dicho co-ingrediente, para ser considerado como perfumante, debe ser reconocido por un experto en la materia como capaz de impartir o modificar de forma positiva o agradable el olor de una composición, y no sólo como poseedor de un olor.
- La naturaleza y el tipo de los co-ingredientes perfumantes presentes en la base no justifican una descripción más detallada aquí, que en cualquier caso no sería exhaustiva, pudiendo el experto seleccionarlos en función de sus conocimientos generales y según el uso o la aplicación previstos y el efecto organoléptico deseado. En términos generales, estos co-ingredientes perfumantes pertenecen a clases químicas tan variadas como los alcoholes, las lactonas, los aldehídos, las cetonas, los ésteres, los éteres, los acetatos, los nitrilos, los terpenoides, los compuestos heterocíclicos nitrogenados o sulfurosos y los aceites esenciales, y dichos co-ingredientes perfumantes pueden ser de origen natural o sintético.
- En particular, se pueden citar los co-ingredientes perfumantes que se utilizan comúnmente en las formulaciones de perfumes, tales como:
- Ingredientes aldehídicos: decanal, dodecanal, 2-metil-undecanal, 10-undecenal, octanal y/o nonenal;
 - Ingredientes aromáticos-herbales: aceite de eucalipto, alcanfor, eucaliptol, mentol y/o alfa-pineno;
 - Ingredientes balsámicos: cumarina, etil vainillina y/o vainillina;
 - Ingredientes cítricos: dihidromircenol, citral, aceite de naranja, acetato de linalilo, nitrilo de citronelilo, terpenos de naranja, limoneno, acetato de 1-P-menten-8-ilo y/o 1,4(8)-P-mentadieno;
 - Ingredientes florales: Dihidrojasmonato de metilo, linalol, citronelol, feniletanol, 3-(4-terc-butilfenil)-2-metilpropanal, aldehído hexilcinámico, acetato de bencilo, salicilato de bencilo, tetrahidro-2-isobutil-4-metil-4(2H)-piranol, beta ionona, 2-(metilamino)benzoato de metilo, (E)-3-metil-4-(2,6,6-trimetil-2-ciclohexen-1-il)-3-buten-2-ona, salicilato de hexilo, 3,7-dimetil-1,6-nonadien-3-ol, 3-(4-isopropilfenil)-2-metilpropanal, acetato de verdilo, geraniol, P-menth-1-en-8-ol, acetato de 4-(1,1-dimetiletil)-1-ciclohexilo, acetato de 1,1-dimetil-2-feniletilo, 4-ciclohexil-2-metil-2-butanol, salicilato de amilo, dihidrojasmonato de metilo alto cis, 3-metil-5-fenil-1-pentanol, propionato de verdilo, acetato de geraniol, tetrahidro linalol, cis-7-P-mentanol, propil (S)-2-(1,1-dimetilpropoxi)propanoato, 2-metoxinaftaleno, 2,2,2-tricloro-acetato de 1-feniletilo, 4/3-(4-hidroxi-4-metilpentilo)-3-ciclohexeno-1-carbaldehído, aldehído amilcinámico, 4-fenil-2-butanona, acetato de isononilo, acetato de 4-(1,1-dimetilétilo)-1-ciclohexilo, isobutirato de verdilo y/o mezcla de isómeros de metiliononas;
 - Ingredientes afrutados: gamma undecalactona, 4-decanolida, 2-metil-pentanoato de etilo, acetato de hexilo, 2-metilbutanoato de etilo, gamma nonalactona, heptanoato de alilo, isobutirato de 2-fenoxietilo, 2-metil-1,3-dioxolano-2-acetato de etilo y/o dicarboxilato de 1,4-ciclohexano;
 - Ingredientes verdes: 2,4-dimetil-3-ciclohexeno-1-carbaldehído, acetato de 2-terc-butil-1-ciclohexilo, acetato de estirililo, acetato de alilo (2-metilbutoxi), 4-metil-3-decen-5-ol, éter de difenilo, (Z)-3-hexen-1-ol y/o 1-(5,5-dimetil-1-ciclohexen-1-il)-4-penten-1-ona;
 - Ingredientes del almizcle: 1,4-dioxa-5,17-cicloheptadecanediona, pentadecenolida, 3-metil-5-ciclopentadecen-1-ona, 1,3,4,6,7,8-hexahidro-4,6,6,7,8,8-hexametil-ciclopenta-g-2-benzopirano, (1S,1'R)-2-[1-(3',3'-dimetil-1'-ciclohexil)etoxi]-2-metilpropil propanoato, pentadecanolide y/o (1S,1'R)-[1-(3',3'-dimetil-1'-ciclohexil)etoxicarbonil]propanoato de metilo;
 - Ingredientes leñosos: 1-(octahidro-2,3,8,8-tetrametil-2-naftalenil)-1-etanona, aceite de pachuli, fracciones terpénicas del aceite de pachuli, (1'R,E)-2-etil-4-(2',2',3'-trimetil-3'-ciclopenten-1'-il)-2-buten-1-ol, 2-etil-4-(2,2,3-trimetil-3-ciclopenten-1-il)-2-buten-1-ol, metil cedril cetona, 5-(2,2,3-trimetil-3-ciclopentenil)-3-metilpentan-2-ol, 1-(2,3,8,8-tetrametil-1,2,3,4,6,7,8,8a-octahidronaftaleno-2-il)etan-1-ona y/o acetato de isobornilo;

- Otros ingredientes (por ejemplo, ámbar, polvo picante o acuoso): dodecahydro-3a,6,6,9a-tetrametil-nafto[2,1-b]furano y cualquiera de sus estereoisómeros, heliotropina, aldehído anísico, eugenol, aldehído cinámico, aceite de clavo, 3-(1,3-benzodioxol-5-il)-2-metilpropanal y/o 3-(3-isopropil-1-fenil)butanal.

5 Una base de perfumería según la invención puede no limitarse a los co-ingredientes perfumantes mencionados anteriormente, y muchos otros de estos co-ingredientes se enumeran en cualquier caso en textos de referencia como el libro de S. Arctander, *Perfume and Flavor Chemicals*, 1969, Montclair, New Jersey, USA o sus versiones más recientes, o en otras obras de naturaleza similar, así como en la abundante literatura de patentes en el campo de la perfumería. También se entiende que dichos co-ingredientes pueden ser también compuestos conocidos por liberar de forma controlada diversos tipos de compuestos perfumantes.

10 Por "adyuvante de perfumería" se entiende aquí un ingrediente capaz de impartir un beneficio adicional como un color, una resistencia particular a la luz, estabilidad química, etc. Una descripción detallada de la naturaleza y el tipo de adyuvante comúnmente utilizado en la composición de perfumería no puede ser exhaustiva, pero hay que mencionar que dichos ingredientes son bien conocidos por un experto en la materia. Se pueden citar como ejemplos específicos no limitantes los siguientes: agentes de viscosidad (por ejemplo, tensioactivos, espesantes, gelificantes y/o modificadores reológicos), agentes estabilizadores (por ejemplo, conservantes, antioxidantes, agentes térmicos/luminosos y/o amortiguadores o quelantes, como el BHT), agentes colorantes (por ejemplo, tintes y/o pigmentos), conservantes (por ejemplo, agentes antibacterianos o antimicrobianos o antifúngicos o antiirritantes), abrasivos, , agentes refrescantes de la piel, fijadores, repelentes de insectos, ungüentos, vitaminas y mezclas de los mismos.

20 Se entiende que un experto en la materia es perfectamente capaz de diseñar formulaciones óptimas para el efecto deseado mediante la mezcla de los componentes mencionados de una composición perfumante, simplemente aplicando los conocimientos estándar de la técnica, así como mediante metodologías de ensayo y error.

25 Una composición de la invención que consiste en al menos un compuesto de fórmula (I) y al menos un portador de perfumería consiste en una realización particular de la invención, así como una composición de perfumería que comprende al menos un compuesto de fórmula (I), al menos un portador de perfumería, al menos una base de perfumería y, opcionalmente, al menos un adyuvante de perfumería.

Según una realización particular, las composiciones mencionadas anteriormente comprenden más de un compuesto de fórmula (I) y permiten al perfumista preparar acordes o perfumes que posean la tonalidad de olor de varios compuestos de la invención, creando así un nuevo bloque de construcción para fines de creación.

30 En aras de la claridad, se entiende también que cualquier mezcla resultante directamente de una síntesis química, por ejemplo, un medio de reacción sin una purificación adecuada, en la que el compuesto de la invención participaría como producto inicial, intermedio o final, no podría considerarse como una composición perfumante según la invención en la medida en que dicha mezcla no proporciona el compuesto inventivo en una forma adecuada para la perfumería. Por lo tanto, las mezclas de reacción no purificadas están generalmente excluidas de la presente invención a menos que se especifique lo contrario.

35 Los compuestos de la invención también pueden utilizarse ventajosamente en todos los campos de la perfumería moderna, es decir, la perfumería fina o funcional, para impartir o modificar positivamente el olor de un producto de consumo al que se añade dicho compuesto (I). En consecuencia, otro objeto de la presente invención consiste en un producto de consumo perfumado que comprende, como ingrediente perfumante, al menos un compuesto de fórmula (I), como se ha definido anteriormente.

El compuesto de la invención puede añadirse como tal o como parte de una composición perfumante de la invención.

45 En aras de la claridad, el término "producto de consumo perfumado" designa un producto de consumo que proporciona al menos un efecto perfumado agradable a la superficie o el espacio en el que se aplica (por ejemplo, la piel, el cabello, los textiles o las superficies del hogar). En otras palabras, un producto de consumo perfumado según la invención es un producto de consumo perfumado que comprende una formulación funcional, así como opcionalmente agentes beneficiosos adicionales, correspondientes al producto de consumo deseado y una cantidad olfativa eficaz de al menos un compuesto de la invención. En aras de la claridad, dicho producto de consumo perfumado es un producto no comestible.

50 La naturaleza y el tipo de los constituyentes del producto de consumo perfumado no justifican una descripción más detallada aquí, que en cualquier caso no sería exhaustiva, pudiendo el experto seleccionarlos en base a sus conocimientos generales y según la naturaleza y el efecto deseado de dicho producto.

55 Entre los ejemplos no limitativos de productos de consumo perfumados adecuados se incluyen un perfume, como un perfume fino, un splash o agua de perfume, una colonia o una loción para el afeitado o para después del afeitado; un producto para el cuidado de los tejidos, como un detergente líquido o sólido, un suavizante, un potenciador del aroma líquido o sólido, un refrescante para tejidos, un agua de planchado, un papel, un blanqueador, un limpiador de

- alfombras, un producto para el cuidado de las cortinas; un producto para el cuidado del cuerpo, como un producto para el cuidado del cabello (por ejemplo, un champú, un preparado para colorear o una laca para el cabello, un producto para el cuidado del color, un producto para dar forma al cabello, un producto para el cuidado dental), un desinfectante, un producto para el cuidado íntimo; un preparado cosmético (por ejemplo, una crema o loción para la piel, una crema evanescente o un desodorante o antitranspirante (por ejemplo un spray o roll on), un depilador, un producto para el bronceado o el sol o para después del sol, un producto para las uñas, un limpiador de la piel, un maquillaje); o un producto para el cuidado de la piel (por ejemplo un jabón, una espuma, un aceite o un gel de ducha o de baño, o un producto de higiene o de cuidado de los pies o de las manos); un producto para el cuidado del aire, como un ambientador o un ambientador en polvo "listo para usar" que pueda utilizarse en el espacio doméstico (habitaciones, frigoríficos, armarios, zapatos o coche) y/o en un espacio público (salones, hoteles, centros comerciales, etc.); o un producto para el cuidado del hogar, como un eliminador de moho, un producto para el cuidado de los muebles, una toallita, un detergente para platos o un detergente para superficies duras (por ejemplo, suelos, baños, sanitarios o ventanas); un producto para el cuidado del cuero; un producto para el cuidado del coche, como un pulidor, una cera o un limpiador de plásticos.
- 15 Algunos de los productos de consumo perfumados mencionados anteriormente pueden representar un medio agresivo para los compuestos de la invención, por lo que puede ser necesario proteger estos últimos de la descomposición prematura, por ejemplo, mediante la encapsulación o la unión química con otra sustancia química que sea adecuada para liberar el ingrediente de la invención ante un estímulo externo adecuado, como una enzima, la luz, el calor o un cambio de pH.
- 20 Las proporciones en las que los compuestos según la invención pueden incorporarse a los diversos productos o composiciones mencionados varían dentro de una amplia gama de valores. Estos valores dependen de la naturaleza del artículo a perfumar y del efecto organoléptico deseado, así como de la naturaleza de los co-ingredientes en una base dada cuando los compuestos según la invención se mezclan con co-ingredientes perfumantes, disolventes o aditivos comúnmente utilizados en la técnica.
- 25 Por ejemplo, en el caso de las composiciones perfumantes, las concentraciones típicas son del orden del 0,001 % al 10 % en peso, o incluso más, de los compuestos de la invención en base al peso de la composición a la que se incorporan. En el caso de un producto de consumo perfumado, las concentraciones típicas son del orden del 0,0001 % al 1 % en peso, o incluso más, de los compuestos de la invención basados en el peso del producto de consumo al que se incorporan.
- 30 Los compuestos de la invención pueden prepararse según un procedimiento como el descrito a continuación.

Ejemplos

- La invención se describirá ahora con más detalle mediante los siguientes ejemplos, en los que las abreviaturas tienen el significado habitual en la técnica, las temperaturas se indican en grados centígrados (°C); los datos espectrales de RMN se registraron en CDCl₃ (si no se indica lo contrario) con un equipo de 360 o 400 MHz para ¹H y ¹³C, los desplazamientos químicos δ se indican en ppm con respecto al TMS como patrón, las constantes de acoplamiento J se expresan en Hz.

Ejemplo 1

Síntesis de los compuestos de fórmula (I)

a) Preparación del 3-((S)-4-isopropilciclohex-1-en-1-il)-2-metilpropanoato de etilo (Compuesto A)

- 40 Alcohol (5S)-5-isopropil-2-metilciclohexano-1-ol obtenido a partir de (-)-(S)-limoneno según US 2013/0090390 (18,2 g, 0,118 mol), ortopionato de etilo (71,2 ml, 0,355 mmol) y ácido píválico (1,18 g, 0,011 mol) se calentó a 120°C durante 1 h, y después a 150° durante 2 h. Después de destilar el EtOH y el exceso de ortopionato de etilo, la mezcla fría se extrajo con Et₂O, se lavó con NaOH 15% acuoso, luego H₂O hasta la neutralidad, se secó, se concentró y se destiló de bulbo a bulbo para obtener el Compuesto A en un rendimiento del 79,3% como una
- 45 mezcla 2:3 de estereoisómeros (Bp. 118°C/2,4 mbar, α_D²⁰ = -55,4 neta).
IR: 2958, 1736, 1458, 1374, 1176.
¹H-NMR: mayor 5,41 (brs, 1H); 4,11(q, J = 7,2, 2H); 2,64-2,53(m, 1H); 2,35-2,28 (m, 1H); 2,04-1,89(m, 4H); 1,79-1,68 (m, 2H); 1,51-1,39(m, 1H); 1,24(t, J = 7,2, 3H); 1,21-1,14 (m, 2H); 1,09 (d, J = 7,2, 3H); 0,88 (d, J = 6,7, 3H); 0,87 (d, J = 6,7, 3H); menor 5,41 (brs, 1H); 4,10(q, J = 7,2, 2H); 2,64-2,53(m, 1H); 2,35-2,28(m, 1H); 2,04-1,89(m, 4H); 1,79-1,68(m, 2H); 1,51-1,39(m, 1H); 1,24(t, J = 7,2, 3H); 1,21-1,14 (m, 2H); 1,10 (d, J = 7,2, 3H); 0,88(d, J = 6,7, 3H); 0,87 (d, J = 6,7, 3H).
- 50 ¹³C-NMR: mayor 176,8 (s); 134,8 (s); 123,3 (d); 60,1 (t); 42,0 (t); 40,1 (d); 37,9 (d); 32,2 (d); 29,0(t); 28,7(t); 26,4 (t); 20,0 (q); 19,7 (q); 16,6 (q); 14,3 (q); menor 176,8 (s); 134,8 (s); 123,3 (d); 60,1 (t); 42,0 (t); 40,1 (d); 38,1 (d); 32,2 (d); 29,0 (t); 28,7 (t); 26,5 (t); 20,0 (q); 19,7 (q); 16,9 (q); 14,3 (q). MS: mayor 238 (11, M+), 192 (33), 164 (10), 149 (12), 137 (62), 121 (46), 109 (21), 107 (20), 102 (100), 95 (46), 93 (47), 81 (79), 79 (52), 74 (41), 67 (29), 55 (30), 41 (52), 29 (27); menor 238 (10, M+), 192 (31), 164 (10), 149 (13), 137 (62), 121 (46), 109 (20), 107 (18), 102 (100), 95 (46), 93 (45), 81 (80), 79 (48), 74 (43), 67 (28), 55 (29), 41 (47), 29 (33).

b) Preparación de 3-((S)-4-Isopropilciclohex-1-en-1-il)-2-metilpropan-1-ol (Compuesto B)

Una solución del compuesto A (21,06g, 88,5 mmol) en Et₂O (17,7 ml) se añadió gota a gota a una suspensión de LiAlH₄ (2,52g, 66,36 mmol) en Et₂O (26,3 ml). Después de 1h, H₂O (2,5 ml), NaOH (2,5 ml) 15% acuoso y luego H₂O (7,5 ml) se añadieron sucesivamente y la mezcla resultante se filtró sobre *Celite* y se concentró. La destilación de bulbo a bulbo proporcionó el compuesto B en un rendimiento del 66-88% como una mezcla de 56:44 de estereoisómeros (Bp 91°C/1 mbar, $\alpha_D^{20} = -72,2$, puro).

IR: 3333, 2956, 1464, 1435, 1380, 1360, 1036.

¹H-NMR: 5.43 (brs, 1H); 3,53-3,39(m, 2H); 2,07-1,94 (m, 5H); 1,88-1,72 (m, 5H); 1,51-1,42 (m, 1H); 1,47 (brs, 1 OH); 1,30-1,13(m, 3H); 0,89(d, J = 6,7, 3H); 0,87(d, J = 6,7, 3H).

¹³C-NMR: mayor 136,3 (s); 122,8 (d); 68,6 (t); 42,3 (t); 40,2 (d); 33,6 (d); 32,3 (d); 29,0 (2t); 26,5 (t); 20,0 (q); 19,7 (q); 16,6 (q); menor 136,3 (s); 122,8 (d); 68,4 (t); 42,4(t); 40,2 (d); 33,6 (d); 32,3 (d); 29,0 (2t); 26,5 (t); 20,0 (q); 19,7 (q); 17,1 (q).

MS: 196 (11, M+), 165 (11), 138 (50), 135 (38), 123 (17), 121 (13), 109 (32), 107 (29), 95 (65), 93 (88), 91 (34), 83 (52), 81 (64), 79 (89), 77 (39), 69 (51), 67 (59), 65 (13), 58 (45), 55 (49), 53 (23), 43 (46), 41 (100), 39 (35), 31 (58), 27 (35).

c) Preparación de 3-((S)-4-Isopropilciclohex-1-en-1-il)-2-metilpropana (Compuesto C)

Se agitó durante 2 horas una suspensión del compuesto B (9,95 g, 50,8 mmol), PCC (16,4 g, 76,15 mmol) y *Celite* (24,6 g) en CH₂Cl₂ (112 ml). La mezcla se filtró sobre SiO₂ (10 g), se concentró, se diluyó con Et₂O y se lavó con HCl 15% acuoso, luego NaHCO₃ y H₂O, se secó, se concentró y se destiló de bulbo a bulbo para obtener el compuesto C en un rendimiento del 90% como una mezcla de 56:44 de estereoisómeros (Bp. 75°C/0,22 mbar, $\alpha_D^{20} = -68,1$, puro).

IR:2958, 1728, 1457, 1440, 1386.

¹H-NMR: mayor 9,62 (d, J = 3,3, 1H); 5,44 (brs, 1H); 2,55-2,45 (m, 1H); 2,41-2,33 (m, 1H); 2,06-1,90 (m, 4H); 1,80-1,69(m, 2H); 1,51-1,41 (m, 1H); 1,27-1,16(m, 2H); 1,04 (d, J = 6,8, 3H); 0,89 (d, J = 6,8, 3H); 0,87 (d, J = 6,8, 3H); menor 9,61 (d, J = 2,3, 1H); 5,44 (brs, 1H); 2,55-2,45 (m, 1H); 2,41-2,33 (m, 1H); 2,06-1,90 (m, 4H); 1,80-1,69(m, 2H); 1,51-1,41 (m, 1H); 1,27-1,16 (m, 2H); 1,045 (d, J = 6,8, 3H); 0,89 (d, J = 6,8, 3H); 0,87 (d, J = 6,8, 3H).

¹³C-NMR: mayor 205,4 (d) ; 134,0 (s); 123,9 (d); 44,5 (d); 40,1(d); 38,9(t); 32,2 (d); 29,0 (2t); 26,3(t); 20,0(q); 19,7(q); 13,2 (q); menor 205,4(d); 134,1 (s); 123,9 (d); 44,4 (d); 40,1(d); 38,9(t); 32,2 (d); 29,0 (2t); 26,4(t); 20,0 (q); 19,7 (q); 13,5(q) MS: 194 (14, M+), 152 (30), 136 (23), 133 (18), 123 (23), 121 (18), 109 (35), 95 (40), 93 (100), 91 (44), 81 (84), 79 (52), 77 (40), 69 (22), 67 (50), 65 (13), 55 (35), 53 (21), 43 (38), 41 (82), 39 (33), 29 (33), 27 (34).

d) Preparación de 3-((S)-4-Isopropilciclohex-1-en-1-il)-2,2-dimetilpropanal (Compuesto D)

El compuesto C (7,3 g, 37,6 mmol.) se añadió gota a gota a una solución de *t*BuOK(5,05 g, 45,1 mmol.) en *t*BuOH(37,6 ml) por debajo de 35°C. A continuación, se añadió Mel (2,81 ml, 45,1 mmol.) y después de 2 h, la mezcla se diluyó con Et₂O, se extrajo con H₂O hasta neutralidad, se secó (Na₂SO₄), se concentró y se destiló de bulbo a bulbo para obtener el compuesto D en un rendimiento del 69%. Bp: 80°C/0,38 mbar. $\alpha_D^{20} = -63,3$; $[\alpha]_D^{20} = -78,3$, c = 2,52, CHCl₃.

IR: 2958, 2917, 2872, 2839, 2694, 1727, 1466, 1436, 1385, 1366, 908, 875, 819, 776, 752.

¹H-NMR: 9.53(s, 1H); 5,40 (brs, 1H); 2,17(qAB, J = 14,3, 2H); 2,05-1,99(m, 1H); 1,93-1,69(m, 4H); 1,44(oct, J = 6,6, 1H); 1,23-1,11(m, 2H); 1,03(s, 6H); 0,87(d, J = 6,6, 3H); 0,86(d, J = 6,6, 3H).

¹³C-NMR: 206,6 (d); 133,7(s); 125,8(d); 46,4(s); 46,0(t); 39,8(d); 32,2 (d); 31,0(t); 29,1 (t); 26,5(t); 22,2(q); 21,5(q); 19,9(q); 19,6(q).

MS : 208 (9, M+), 193 (11), 152 (50), 137 (18), 124 (19), 121 (15), 109 (25), 95 (58), 93 (60), 91 (25), 81 (100), 79 (35), 77 (23), 72 (18), 70 (54), 67 (32), 55 (22), 43 (31), 41 (40).

Ejemplo 2**45 Síntesis de 3-((R)-4-isoprociclohex-1-en-1-il)-2-metilpropanal (fuera del ámbito de la invención)**

El 3-((R)-4-isopropilciclohex-1-en-1-il)-2-metilpropanal se preparó siguiendo el procedimiento descrito en el ejemplo 1 a partir de (5R)-5-isopropil-2-metilciclohexan-1-ol obtenido a partir de (+)-(R)-limoneno según US 2013/0090390. Se obtuvo 3-((R)-4-isopropilciclohex-1-en-1-il)-2-metilpropanal con un rendimiento similar al del 3-((S)-4-isopropilciclohex-1-en-1-il)-2-metilpropanal ($\alpha_D^{20} = +78,6$, puro).

50 Ejemplo 3**Preparación de una composición perfumante**

Se preparó una composición perfumante para suavizante de telas, mezclando los siguientes ingredientes:

ES 2 881 205 T3

Partes en peso	Ingrediente
Acetato de bencilo	600
Acetato de carbinol	100
Acetato de (Z)-3-hexen-1-ol	20
Alcohol cinámico	100
Aldehído anísico	40
C 12 Aldehído	10
Aldehído hexilcinámico	1400
Allyl amyl glycolate	40
Antranilato de metilo	20
Gamma undecalactona	100
Nitrilo citronelado	20
Acetato de verdeo	200
Propionato de verdeo	100
Damascone alfa	10
Dartanol® ¹⁾	140
Dihidromircenol	400
Óxido de difenilo	100
Eugenol	100
Habanolide® ²⁾	1000
Hedione® ³⁾	1000
Fentilol	1000
Rosinol ⁴⁾	40
Salicilato de amilo	1200
Terpineol	1000
Verdox™ ⁵⁾	200
Aceite esencial de ylang	60
	9000

Partes en peso	Ingrediente
1)	(1'R,E)-2-ethyl-4-(2',2',3'-trimethyl-3'-cyclopenten-1'-yl)-2-buten-1-ol; origen: Firmenich SA, Ginebra, Suiza
2)	Pentadecenolida; origen: Firmenich SA, Ginebra, Suiza
3)	Dihidrojasmonato de metilo; origen: Firmenich SA, Ginebra, Suiza
4)	Acetato de 2,2,2-tricloro-1-feniletilo; origen: Firmenich SA, Ginebra, Suiza
5)	Acetato de 2-terc-butil-1-ciclohexilo; origen: International Flavors & Fragrances, Estados Unidos

La adición de 1000 partes en peso de 3-((S)-4-isopropilciclohex-1-en-1-il)-2-metilpropanal a la composición descrita anteriormente impartió a esta última una connotación claramente fresca de ciclamen y lirio de los valles y confirió una frescura más acuosa a su nota de salida y de fondo.

- 5 Cuando, en lugar del compuesto de la invención, se utilizó la misma cantidad de 3-((R)-4-isopropilciclohex-1-en-1-il)-2-metilpropanal, la composición adquirió una connotación ligeramente más graso-aldehídica pero también más metálica. El efecto observado es bastante débil y no positivo.

- 10 Cuando en lugar del compuesto de la invención, la misma cantidad de Mugoxal® (3-(4-tert-butil-1-ciclohexen-1-il)propanal; origen: Firmenich SA, Ginebra, Suiza), la composición adquirió una connotación de flor blanca de lirio de los valles claramente elegante y chispeante, pero desprovista de la nota de melocotón blanco lactónico.

Cuando en lugar del compuesto de la invención, la misma cantidad de (-)-(S)-3-(4-isopropilciclohex-1-en-1-il)propanal reportada en US 2013/0090390, el resultado fue totalmente diferente ya que la composición adquirió una connotación aldehídica claramente limpia, cítrica-limón y mandarina que es clásica en este tipo de notas. Dicho compuesto aporta una nota aldehídica-cítrica en lugar de una nota floral.

- 15 Cuando en lugar del compuesto de la invención se utilizó la misma cantidad de (+)-2-metil-3-[4-(2-metil-2-propanil)-1-ciclohexen-1-il]propanal, la composición adquirió una connotación de lirio de los valles que recuerda a Lillal® pero desprovista de la nota lactónica de melocotón blanco.

Ejemplo 4

Preparación de un suavizante que comprende el compuesto de la invención

- 20 Tabla 1: Composición de la formulación del suavizante

Ingrediente	Concentración [% en peso]
Bis[etil (sebo)]-2-hidroxiethyl amonio metil sulfato ¹⁾	12,20
1,2-benzotiazolina-3-ona ²⁾	0,04
CaCl ₂ (solución acuosa al 10%)	0,40
Agua	87,36
1) Stepanex VL90 A Diester Quat; Origen: Stepan	
2) Proxel GXL; Origen: Arco	

- 25 El suavizante se preparó ponderando bis[etil (sebo)]-2-hidroxiethyl amonio metil sulfato que se calentó a 65°C. A continuación, se colocó agua y 1,2-benzotiazolina-3-ona en el reactor y se calentó a 65°C bajo agitación. A la mezcla anterior se añadió bis[etil (sebo)]-2-hidroxiethyl amonio metil sulfato. La mezcla se agitó 15 minutos y se añadió CaCl₂. A continuación, se añadió del 0,5 al 2% en peso, en relación con el peso total del suavizante, de la composición de la invención del ejemplo 3. La mezcla se agitó durante 15 minutos y se enfrió a temperatura ambiente bajo agitación (medida de la viscosidad: resultado 35 +/- 5 mPa. (velocidad de cizallamiento 106 seg-1)).

Ejemplo 5**Preparación de un detergente líquido que comprende el compuesto de la invención**

Tabla 2: Composición de la formulación del detergente líquido

Ingredientes	Concentración [% en peso]
Sulfonato de sodio de C14-17 alquilos ¹⁾	7
Ácidos grasos, C12-18 y C18-insaturados ²⁾	7,5
Éter poliglicólico de alcohol graso C12/14 con 7 mol de EO ³⁾	17
Trietanolamina	7,5
Propilenglicol	11
Ácido cítrico	6,5
Hidroxido de potasio	9,5
Properase L ⁴⁾	0,2
Puradax EG L ⁴⁾	0,2
Purastar ST L ⁴⁾	0,2
Acrilatos/metacrilato de esteta 20 Crosspolymer estructurador ⁵⁾	6
Agua desionizada	27,4
1) Hostapur SAS 60; Origen: Clariant 2) Edenor K 12-18; Origen: Cognis 3) Genapol LA 070; Origen: Clariant 4) Origen: Genencor International 5) Aculyn 88; Origen: Dow Chemical	

5 El detergente líquido se preparó añadiendo del 0,5 al 1,5% en peso, en relación con el peso total del detergente líquido, de la composición de la invención del ejemplo 3 en la formulación de detergente líquido no perfumado de la Tabla 2 bajo agitación suave.

Ejemplo 6**Preparación de un champú isotrópico transparente que comprende la composición de la invención**

Tabla 3: Composición de la formulación del champú isotrópico transparente

Fases	Ingredientes	Concentración [% en peso]
A	Agua desionizada	44,4
	Poliquaternio-10 ¹⁾	0,3
	Glicerina 85% ¹⁾	1
	DMDM Hidantoína ¹⁾	0,2
B	Sulfato de sodio y laureth ⁴⁾	28
	Cocamidopropil Betaína ⁵⁾	3,2

Fases	Ingredientes	Concentración [% en peso]
	Cocoamphodiacetate disódico ⁶⁾	4
	Etoxi (20)Alcohol estearílico ⁶⁾	1
c	Sulfato de sodio y laureth ⁴⁾	3
	Glyceryl Laureate ⁷⁾	0,2
D	Agua desionizada	1
	Metilparabeno de sodio ⁸⁾	0,1
E	Cloruro de sodio 10% sol acuoso.	15
	Ácido cítrico 10% sol. acuoso hasta pH 5,5-6	q.s.
1) Polímero Ucare JR-400, Origen: Noveon 2) Origen: Schweizerhall 3) Glydant, Origen: Lonza 4) Texapon NSO IS, Origen: Cognis 5) Tego Betain F 50, Origen: Evonik 6) Amphotensid GB 2009, Origen: Zschimmer & Schwarz 7) Monomuls 90 L-12, Origen: Gruenau 8) Nipagin Monosódico, Origen: NIPA		

5 El champú se preparó dispersando en agua Polyquaternium-10. Los demás ingredientes de la fase A se mezclaron por separado añadiendo uno tras otro mientras se mezclaba bien después de cada adición. Esta premezcla se añadió a la dispersión de Polyquaternium-10 y se mezcló durante otros 5 minutos. A continuación, se añadieron la fase B premezclada y la fase C premezclada (Monomuls 90L-12 se calentó hasta fundirse en Texapon NSO IS) mientras se agitaba. La fase D y la fase E se añadieron mientras se agitaba. El pH se ajustó con una solución de ácido cítrico hasta que se alcanzó el pH: 5.5 - 6,0, lo que da lugar a una fórmula de champú no perfumada.

10 El champú perfumado se preparó añadiendo del 0,4 al 0,8% en peso, en relación con el peso total del champú, de la composición de la invención del ejemplo 3 en la formulación de champú no perfumado de la Tabla 3 bajo agitación suave.

Ejemplo 7

Preparación de un gel de ducha estructurado que comprende la composición de la invención

Tabla 4: Composición de la formulación del gel de ducha

Ingredientes	Cantidad (% en peso)
AGUA desionizada	49,350
EDTA tetrasódico ¹⁾	0,050
Copolímero de acrilatos ²⁾	6,000
Sulfato de sodio C12-C15 Pareth ³⁾	35,000
Solución acuosa de hidróxido de sodio al 20%	1,000
Cocamidopropil Betaína ⁴⁾	8,000

Ingredientes	Cantidad (% en peso)
Metilcloroisotiazolinona y metilisotiazolinona ⁵⁾	0,100
Ácido cítrico (40%)	0,500
1) EDETA B POWDER; marca y origen: BASF 2) POLÍMERO CARBOPOL AQUA SF-1; marca y origen: NOVEON 3) ZETESOL AO 328 U; marca y origen: ZSCHIMMER & SCHWARZ 4) TEGO-BETAIN F 50; marca y origen: GOLDSCHMIDT 5) KATHON CG; marca y origen: ROHM Y HASS	

El gel de ducha se preparó añadiendo del 0,5 al 1,5% en peso, en relación con el peso total del gel de ducha, de la composición de la invención del ejemplo 3 en la formulación de gel de ducha no perfumada de la Tabla 4 bajo agitación suave.

5 Ejemplo 8

Preparación de un gel de ducha transparente que comprende la composición de la invención

Tabla 5: Composición de la formulación del gel de ducha transparente

Ingredientes	Concentración (% en peso)
AGUA desionizada	52,40
EDTA tetrasódico ¹⁾	0,10
Benzoato de sodio	0,50
Propilenglicol	2,00
Sulfato de sodio C12-C15 Pareth ²⁾	35,00
Cocamidopropil Betaína ³⁾	8,00
Poliquaternio-7 ⁴⁾	0,20
Ácido cítrico (40%)	1,00
Cloruro de sodio	0,80
1) EDETA B POWDER; marca y origen: BASF 2) ZETESOL AO 328 U; marca y origen: ZSCHIMMER & SCHWARZ 3) TEGO-BETAIN F 50; marca y origen: GOLDSCHMIDT 4) MERQUAT 550; marca y origen: LUBRIZOL	

10 El gel de ducha transparente se preparó añadiendo del 0,5 al 1,5% en peso, en relación con el peso total del gel de ducha, de la composición de la invención del ejemplo 3 en la formulación del gel de ducha sin perfumar de la Tabla 5 bajo agitación suave.

Ejemplo 9

Preparación de un gel de ducha lechoso que comprende la composición de la invención

Tabla 6: Composición de la formulación del gel de ducha lechoso

AGUA desionizada	50,950
EDTA tetrasódico	0,050
Benzoato de sodio	0,500
Glicerina 86%	3,500
Sulfato de sodio y laureth	27,000
Poliquaternio-7	1,000
Coco- Betaina	6,000
Trioleato de metilglucosa PEG-120	1,000
Ácido cítrico (40%)	1,000
Distearato de glicol & Laureth-4 & Cocamidopropyl Betaine	3,000
Cloruro de sodio 20%	5,000
Aceite de ricino hidrogenado PEG-40	1,000
1) EDETA B POWDER; marca y origen: BASF 2) Texapon NSO IS; marca y origen: COGNIS 3) MERQUAT 550; marca y origen: LUBRIZOL 4) DEHYTON AB-30; marca y origen: COGNIS 5) GLUCAMATE LT; marca y origen: LUBRIZOL 6) EUPERLAN PK 3000 AM; marca y origen: COGNIS	

El gel de ducha transparente se preparó añadiendo del 0,5 al 1,5% en peso, en relación con el peso total del gel de ducha, de la composición de la invención del ejemplo 3 en la formulación del gel de ducha sin perfumar de la Tabla 6 bajo agitación suave.

5 Ejemplo 10

Preparación de un champú nacarado que comprende la composición de la invención

Tabla 7: Composición de la formulación del champú isotrópico nacarado

Fases	Ingredientes	peso)
A	Agua desionizada	45,97
	EDTA tetrasódico	0,05
	Cloruro de hidroxipropiltrimonio guar	0,05
	Polyquaternium-10	0,075
B	NaOH 10% sol acuoso.	0,3

Fases	Ingredientes	Concentración (% en peso)
C	Lauril sulfato de amonio ⁴⁾	34
	Sulfato de amonio y laureth ⁵⁾	9,25
	Cocamidopropil betaína ⁶⁾	2
	Dimeticona (&) C12-13 Pareth-4 (&) C12-13 Pareth-23 (&) Ácido salicílico ⁷⁾	2,5
D	Alcohol cetílico ⁸⁾	1,2
	Cocamida MEA ⁹⁾	1,5
	Distearato de glicol ¹⁰⁾	2
E	Metilcloroisotiazolinona y metilisotiazolinona ¹¹⁾	0,1
	D-Pantenol 75% ¹²⁾	0,1
	Agua desionizada	0,3
F	Cloruro de sodio 25% sol acuoso.	0,6

1) EDETA B Polvo, Origen: BASF
2) Jaguar C14 S, Origen: Rhodia
3) Polímero Ucare JR-400, Origen: Noveon
4) Sulfetal LA B-E, Origen: Zschimmer & Schwarz
5) Zetesol LA, Origen: Zschimmer & Schwarz
6) Tego Betain F 50, Origen: Evonik
7) Xiameter MEM-1691, Origen: Dow Corning
8) Lanette 16, Origen: BASF
9) Comperlan 100, Origen: Cognis
10) Cutina AGS, Origen: Cognis
11) Kathon CG, Origen: Rohm & Haas
12) D-Pantenol, Origen: Roche

5 El champú se preparó mediante la dispersión en agua de EDTA tetrasódico, cloruro de hidroxipropiltrimonio guar y policuamato 10. Se añadió una solución de NaOH al 10% (Fase B) una vez que la Fase A era homogénea. A continuación, se añadió la fase C premezclada y se calentó la mezcla a 75°C. Se añadieron los ingredientes de la fase D y se mezclaron hasta que fueron homogéneos. La mezcla se enfrió. A 45°C, se añadieron los ingredientes de la fase E mientras se mezclaba. La viscosidad final se ajustó con una solución de NaCl al 25% y el pH de 5,5-6 se ajustó con una solución de NaOH al 10%.

10 El champú nacarado perfumado se preparó añadiendo del 0,4 al 0,8% en peso, en relación con el peso total del champú, de la composición de la invención del ejemplo 3 en la formulación de champú no perfumado de la Tabla 7 bajo agitación suave.

Ejemplo 11

Preparación de un gel de ducha estructurado que comprende la composición de la invención

Tabla 8: Composición de la formulación del gel de ducha lechoso

Ingredientes	Cantidad (% en peso)
AGUA desionizada	49,350

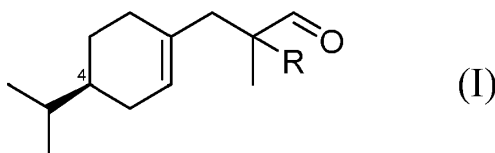
ES 2 881 205 T3

Ingredientes	Cantidad (% en peso)
EDTA tetrasódico ¹⁾	0,050
Copolímero de acrilatos ²⁾	6,000
Sulfato de sodio C12-C15 Pareth ³⁾	35,000
Solución acuosa de hidróxido de sodio al 20%	1,000
Cocamidopropil Betaína ⁴⁾	8,000
Metilcloroisotiazolinona y metilisotiazolinona ⁵⁾	0,100
Ácido cítrico (40%)	0,500
1) EDETA B POWDER; marca y origen: BASF 2) POLÍMERO CARBOPOL AQUA SF-1; marca y origen: NOVEON 3) ZETESOL AO 328 U; marca y origen: ZSCHIMMER & SCHWARZ 4) TEGO-BETAIN F 50; marca y origen: GOLDSCHMIDT 5) KATHON CG; marca y origen: ROHM Y HASS	

El gel de ducha transparente se preparó añadiendo del 0,5 al 1,5% en peso, en relación con el peso total del gel de ducha, de la composición de la invención del ejemplo 3 en la formulación del gel de ducha sin perfumar de la Tabla 8 bajo agitación suave.

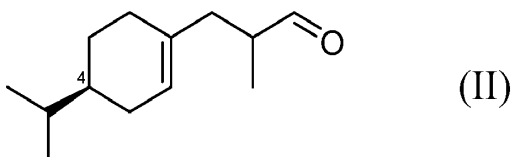
REIVINDICACIONES

1. Un compuesto de fórmula



- 5 en forma de uno cualquiera de sus estereoisómeros o como mezcla de los mismos, y en el que el carbono 4 del grupo ciclohexenilo tiene una configuración S absoluta y R representa un átomo de hidrógeno o un grupo metilo.

2. El compuesto según la reivindicación 1, **caracterizado porque**, el compuesto de fórmula (I) es de fórmula



- 10 en forma de cualquiera de sus estereoisómeros o como mezcla de los mismos, y en el que el carbono 4 del grupo ciclohexenilo tiene una configuración S absoluta.

3. Un procedimiento para conferir, potenciar, mejorar o modificar las propiedades olfativas de una composición perfumante o de un artículo perfumado, cuyo procedimiento comprende añadir a dicha composición o artículo una cantidad eficaz de al menos un compuesto de fórmula (I) como se define en las reivindicaciones 1 a 2.

4. Uso como ingrediente perfumante de un compuesto de fórmula (I) como se define en las reivindicaciones 1 a 2.

- 15 5. Una composición perfumante que comprende

i) al menos un compuesto de fórmula (I), como se define en las reivindicaciones 1 a 2;

ii) al menos un ingrediente seleccionado del grupo formado por un portador de perfumería y una base de perfumería; y

iii) opcionalmente, al menos un adyuvante de perfumería.

- 20 6. Un producto de consumo perfumado que comprende al menos un compuesto de fórmula (I), como se define en las reivindicaciones 1 a 2 o una composición como se define en la reivindicación 5.

- 25 7. El producto de consumo perfumado según la reivindicación 6, **caracterizado porque** el producto es un perfume, un producto para el cuidado de los tejidos, un producto para el cuidado del cuerpo, un preparado cosmético, un producto para el cuidado de la piel, un producto para el cuidado del aire o un producto para el cuidado del hogar.

- 30 8. El producto de consumo perfumado según la reivindicación 7, **caracterizado porque** el producto de consumo de perfumería es un perfume fino, un splash o agua de perfume, una colonia, una loción de afeitado o para después del afeitado, un detergente líquido o sólido, un suavizante de telas, un refrescante de telas, un agua de planchado, un papel, un blanqueador, un limpiador de alfombras, un producto para el cuidado de las cortinas, un champú, un preparado colorante, un producto para el cuidado del color, un producto para dar forma al cabello, un producto para el cuidado dental, un desinfectante, un producto para el cuidado íntimo, una laca para el cabello, una crema evanescente, un desodorante o antitranspirante, un depilador, un producto para el bronceado o el sol, un producto para las uñas, un limpiador de la piel, un maquillaje, un jabón perfumado, una espuma, un aceite o un gel para la ducha o el baño, o un producto para el cuidado de los pies o de las manos,
- 35 un producto de higiene, un ambientador, un ambientador en polvo "listo para usar", un eliminador de moho, un producto para el cuidado de los muebles, una toallita, un detergente para vajilla o para superficies duras, un producto para el cuidado del cuero o un producto para el cuidado del automóvil.