

19



OFICINA ESPAÑOLA DE
PATENTES Y MARCAS

ESPAÑA



11 Número de publicación: **2 995 786**

51 Int. Cl.:

C07C 39/06 (2006.01)

C07C 39/08 (2006.01)

12

TRADUCCIÓN DE PATENTE EUROPEA

T3

86 Fecha de presentación y número de la solicitud internacional: **12.06.2018** **PCT/EP2018/065463**

87 Fecha y número de publicación internacional: **20.12.2018** **WO18229033**

96 Fecha de presentación y número de la solicitud europea: **12.06.2018** **E 18729153 (9)**

97 Fecha y número de publicación de la concesión europea: **02.10.2024** **EP 3606898**

54 Título: **Composiciones que comprenden hidroquinona y catecol, procedimiento para preparar estas composiciones**

30 Prioridad:

13.06.2017 FR 1755272

45 Fecha de publicación y mención en BOPI de la traducción de la patente:
11.02.2025

73 Titular/es:

SPECIALTY OPERATIONS FRANCE (100.00%)
9 rue des Cuirassiers Immeuble Silex 2 Solvay
69003 Lyon, FR

72 Inventor/es:

GAREL, LAURENT

74 Agente/Representante:

LEHMANN NOVO, María Isabel

ES 2 995 786 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

Composiciones que comprenden hidroquinona y catecol, procedimiento para preparar estas composiciones

5 CAMPO TÉCNICO

La presente invención se refiere a composiciones que comprenden hidroquinona y/o catecol, así como a un procedimiento para preparar estas composiciones mediante hidroxilación de fenol.

10 TÉCNICA ANTERIOR

Los compuestos aromáticos hidroxilados son compuestos importantes en la síntesis orgánica. Con el tiempo se han desarrollado diferentes rutas para sintetizar estos productos, en particular mediante la hidroxilación del fenol en presencia de un catalizador. La reacción de hidroxilación del fenol conduce a la obtención de dos isómeros, a saber, 1,4-dihidroxibenceno o hidroquinona (HQ) y 1,2-dihidroxibenceno o catecol (PC), que son compuestos con un alto potencial industrial. La hidroquinona es un producto utilizado en muchos campos de aplicación como inhibidor de polimerización, antioxidante en elastómeros o como intermediario de síntesis. Otro campo de aplicación es la fotografía. El catecol es un producto muy utilizado en particular como intermediario en la síntesis de moléculas que pueden utilizarse en diversas aplicaciones tales como farmacia, agroquímica, perfumería o industria alimentaria. Se puede citar el documento WO 1998/02500 que describe composiciones que comprenden al menos un derivado de catecol, un disolvente aromático y un alcohol. Estas composiciones se utilizan como inhibidores de la polimerización. Estas composiciones permanecen líquidas a temperaturas de hasta -50 °C y permiten así evitar el uso de líneas industriales controladas termostáticamente. El documento US 5679223 describe un procedimiento para purificar una mezcla que comprende catecol, 3-metilcatecol y 4-metilcatecol.

Dado este amplio campo de explotación, es necesario producir estos productos a escala industrial y disponer de procedimientos de fabricación optimizados.

Convencionalmente, la hidroquinona y el catecol se producen por hidroxilación del fenol con peróxido de hidrógeno, en presencia de un catalizador ácido, ácido prótico fuerte (por ejemplo en el documento FR 2 071 464) o un catalizador sólido con propiedades ácidas como por ejemplo la zeolita TS-1 (FR 2 489 816), una zeolita de tipo silicalita de titanio MEL (EP 1 131 264), una titañozeolita de tipo MFI (EP 1 123 159) o incluso una zeolita MCM-22 (FR 2 856 681).

Uno de los desafíos de estos procedimientos es optimizar de manera general la productividad de la reacción para poder satisfacer la demanda de hidroquinona y catecol. Los parámetros optimizados podrán ser en particular los rendimientos de la reacción, la relación entre hidroquinona y catecol, o la eficiencia energética de la reacción.

Para responder a este problema general de productividad, numerosos documentos informan sobre condiciones de reacciones específicas. Por ejemplo, la naturaleza del disolvente o disolventes usados para la reacción se describe en la publicación científica de Thangaraj et al., Indian Journal of Chemistry, Vol.33A, marzo de 1994, páginas 255-258, así como en la solicitud patente EP 3 048 091 y en la patente US5426244.

Al final de tal reacción de hidroxilación, se obtiene generalmente una mezcla que comprende hidroquinona y catecol, en proporciones variables, así como diferentes subproductos tales como resorcinol, pirogalol, etc. Según el conocimiento de los inventores, la formación de subproductos indeseables derivados del disolvente o de los disolventes nunca se ha estudiado en el contexto de una reacción de hidroxilación del fenol. Ahora bien, la presencia de estos subproductos puede influir en la eficacia de la propia reacción, pero también en los procedimientos de purificaciones posteriores.

50 BREVE DESCRIPCIÓN DE LA INVENCION

Es mérito de la compañía solicitante haber identificado una nueva composición de hidroquinona y/o catecol que contiene determinados subproductos cuya naturaleza y porcentajes están controlados.

Así, un primer objeto de la presente invención es una composición que comprende al menos un compuesto seleccionado entre hidroquinona y catecol, caracterizada por que comprende además entre 0,1 y 10 000 ppm de al menos un compuesto seleccionado entre 2-(alcoxi)fenol, 4-(alcoxi)fenol, 2-(alquil)fenol, 4-(alquil)fenol, (alquil)catecol, (alquil)hidroquinona y alcoxibenceno, en el que el grupo alcoxi se selecciona entre terc-butoxi e isopropoxi, y el grupo alquilo se selecciona entre terc-butilo e isopropilo.

Preferiblemente, un objeto de la presente invención es una composición que comprende al menos un compuesto seleccionado entre hidroquinona y catecol, caracterizada por que comprende además entre 0,1 y 10 000 ppm de al menos un compuesto seleccionado entre 2-(terc-butoxi)fenol, 4-(terc-butoxi)fenol, 2-(terc-butil)fenol, 4-(terc-butil)fenol, (terc-butil)catecol, (terc-butil)hidroquinona y terc-butoxibenceno.

Según otro aspecto, un objeto de la presente invención es una composición que comprende al menos un compuesto seleccionado entre la hidroquinona y el catecol, caracterizada por que comprende además entre 0,1 y 10 000 ppm de al menos un compuesto seleccionado entre el 2-(isopropoxi)fenol, 4-(isopropoxi)fenol, 2-isopropilfenol, 4-isopropilfenol, isopropilcatecol, isopropilhidroquinona e isopropilbenceno.

Otro aspecto de esta invención se refiere a un procedimiento para preparar una composición que comprende al menos un compuesto seleccionado entre hidroquinona y catecol según la invención, caracterizado por que comprende una etapa (a) de reacción del fenol con peróxido de hidrógeno en presencia de un catalizador, en un disolvente que comprende un alcohol, o una mezcla de alcoholes, seleccionado entre isopropanol, 2,2-dimetilpropanol y terc-butanol.

DESCRIPCIÓN DETALLADA

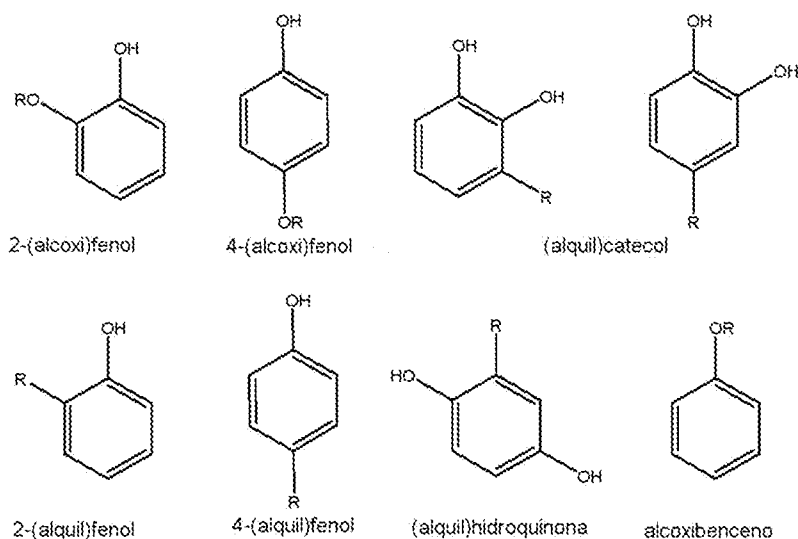
En el contexto de la presente invención, y salvo que se indique lo contrario, la expresión "comprendido entre... y..." incluye los límites. A menos que se indique lo contrario, los porcentajes y ppm son porcentajes y ppm en masa.

En el contexto de la presente invención, y salvo que se indique lo contrario, la expresión "alquilo" representa una cadena lineal o ramificada que comprende de 1 a 6 átomos de carbono.

En el contexto de la presente invención, y salvo que se indique lo contrario, la expresión "alcoxi" representa un grupo alquilo unido a un átomo de oxígeno: R-O.

En el contexto de la presente invención, y a menos que se indique lo contrario, el término "ppm" significa "partes por millón". Esta unidad representa una fracción de masa: 1 ppm = 1 mg/kg.

Un primer aspecto de la presente invención es una composición que comprende al menos un compuesto seleccionado entre hidroquinona y catecol, caracterizada por que comprende además entre 0,1 y 10 000 ppm de al menos un compuesto seleccionado entre 2-(alcoxi)fenol, 4-(alcoxi)fenol, 2-(alquil)fenol, 4-(alquil)fenol, (alquil)catecol, (alquil)hidroquinona y alcoxibenceno, en el que el grupo alcoxi se selecciona entre terc-butoxi e isopropoxi, y el grupo alquilo se selecciona entre terc-butilo e isopropilo.



Preferiblemente, la composición que comprende al menos un compuesto seleccionado entre hidroquinona y catecol se caracteriza por que comprende además al menos un compuesto seleccionado entre 2-(alcoxi)fenol, 4-(alcoxi)fenol, 2-(alquil)fenol, 4-(alquil)fenol, (alquil)catecol y (alquil)hidroquinona en una cantidad:

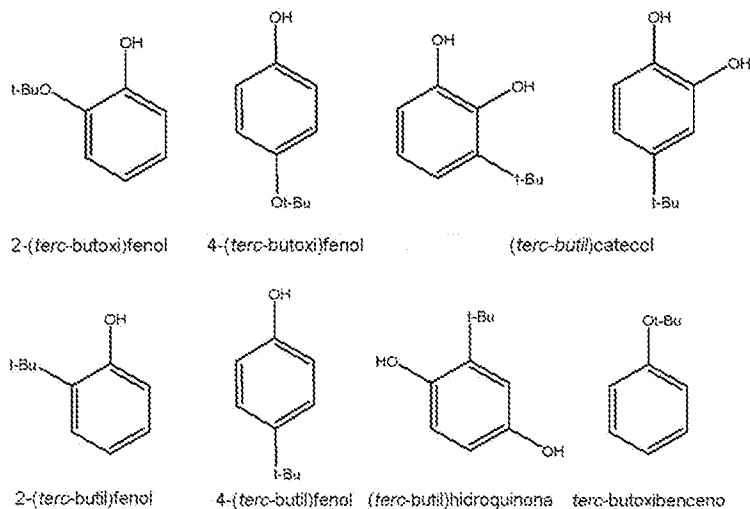
- mayor o igual a 0,5 ppm, preferiblemente una cantidad mayor o igual a 1 ppm e incluso más preferiblemente una cantidad mayor o igual a 10 ppm; y/o
- menor o igual a 500 ppm, preferiblemente una cantidad menor o igual a 300 ppm e incluso más preferiblemente una cantidad menor o igual a 100 ppm.

Además, la composición según la presente invención puede comprender una cantidad mayor o igual a 1 ppm, preferentemente una cantidad mayor o igual a 10 ppm y aún más preferentemente una cantidad mayor o igual a 100 ppm de alcoxibenceno. La composición según la presente invención también puede tener una cantidad menor o igual a 10 000 ppm, preferentemente una cantidad menor o igual a 5 000 ppm y aún más preferentemente una cantidad menor o igual a 1 000 ppm de alcoxibenceno.

Según un aspecto particular, la composición según la presente invención no comprende un disolvente aromático.

En el marco de la presente invención, también es posible que durante la reacción se formen derivados de tipo dialcoxilados, dialquilados o alquilados y alcoxilados. Se pueden citar, de manera no limitativa, derivados de tipo 2,3-dialcoxifenol, 2,6-dialcoxifenol, 2,3-dialquilfenol, 2,6-dialquilfenol, 2-alcoxi-6-alquilfenol o 2-alcoxi-3-alquilfenol.

Ventajosamente, un objeto de la presente invención se refiere a una composición que comprende al menos un compuesto seleccionado entre hidroquinona y catecol, caracterizada por que comprende además entre 0,1 y 10 000 ppm de al menos un compuesto seleccionado entre 2-(*terc*-butoxi)fenol, 4-(*terc*-butoxi)fenol, 2-(*terc*-butil)fenol, 4-(*terc*-butil)fenol, (*terc*-butil)catecol, (*terc*-butil)hidroquinona y *terc*-butoxibenceno.

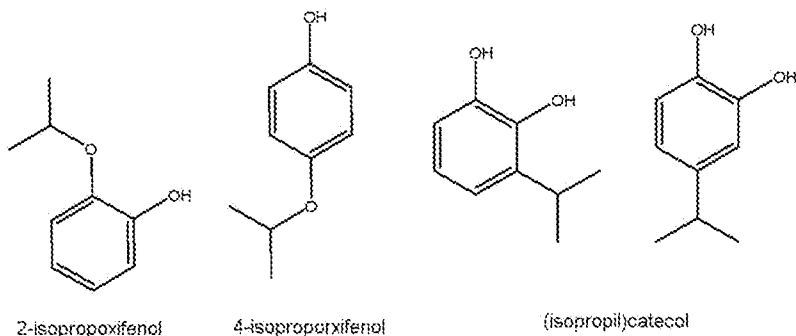


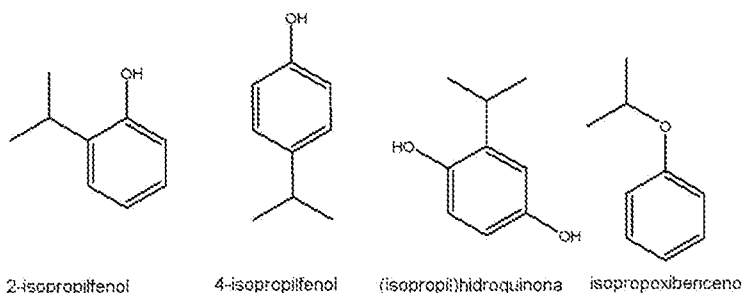
Preferiblemente, la composición que comprende al menos un compuesto seleccionado entre hidroquinona y catecol se caracteriza por que comprende además al menos un compuesto seleccionado entre 2-(*terc*-butoxi)fenol, 4-(*terc*-butoxi)fenol, 2-(*terc*-butoxi)fenol, 4-(*terc*-butil)fenol, (*terc*-butil)catecol y (*terc*-butil)hidroquinona en una cantidad:

- mayor o igual a 0,5 ppm, preferiblemente una cantidad mayor o igual a 1 ppm e incluso más preferiblemente una cantidad mayor o igual a 10 ppm; y/o
- menor o igual a 500 ppm, preferiblemente una cantidad menor o igual a 300 ppm e incluso más preferiblemente una cantidad menor o igual a 100 ppm.

Además, la composición según la presente invención puede comprender una cantidad mayor o igual a 1 ppm, preferentemente una cantidad mayor o igual a 10 ppm y aún más preferentemente una cantidad mayor o igual a 100 ppm de *terc*-butoxibenceno. La composición según la presente invención también puede tener una cantidad menor o igual a 10 000 ppm, preferentemente una cantidad menor o igual a 5 000 ppm y aún más preferentemente una cantidad menor o igual a 1 000 ppm de *terc*-butoxibenceno.

Ventajosamente, un objeto de la presente invención se refiere a una composición que comprende al menos un compuesto seleccionado entre la hidroquinona y el catecol, caracterizada por que comprende además entre 0,1 y 10 000 ppm de al menos un compuesto seleccionado entre el 2-(isopropoxi)fenol, 4-(isopropoxi)fenol, 2-isopropilfenol, 4-isopropilfenol, isopropilcatecol, isopropilhidroquinona e isopropilbenceno.





Preferiblemente, la composición que comprende al menos un compuesto seleccionado entre hidroquinona y catecol se caracteriza por que comprende además al menos un compuesto seleccionado entre 2-(isopropoxi)fenol, 4-(isopropoxi)fenol, 2-isopropilfenol, 4-isopropilfenol, isopropilcatecol, isopropilhidroquinona en una cantidad:

- mayor o igual a 0,5 ppm, preferiblemente una cantidad mayor o igual a 1 ppm e incluso más preferiblemente una cantidad mayor o igual a 10 ppm; y/o
- menor o igual a 500 ppm, preferiblemente una cantidad menor o igual a 300 ppm e incluso más preferiblemente una cantidad menor o igual a 100 ppm.

Además, la composición según la presente invención puede comprender una cantidad mayor o igual a 1 ppm, preferentemente una cantidad mayor o igual a 10 ppm y aún más preferentemente una cantidad mayor o igual a 100 ppm de isopropilbenceno. La composición según la presente invención también puede tener una cantidad menor o igual a 10 000 ppm, preferentemente una cantidad menor o igual a 5000 ppm y aún más preferentemente una cantidad menor o igual a 1000 ppm de isopropilbenceno.

Un aspecto de la presente invención se refiere a una composición que comprende:

- al menos 80 % de hidroquinona, preferiblemente al menos 90 % de hidroquinona, más preferiblemente al menos 99 % de hidroquinona, y
- una cantidad mayor o igual a 0,1 ppm, preferentemente una cantidad mayor o igual a 1 ppm y aún más preferentemente una cantidad mayor o igual a 10 ppm de al menos un compuesto seleccionado entre 2-(alcoxi)fenol, 4-(alcoxi)fenol, (alquil)catecol y (alquil)hidroquinona.

Ventajosamente, la cantidad de al menos un compuesto seleccionado entre 2-(alcoxi)fenol, 4-(alcoxi)fenol, (alquil)catecol y (alquil)hidroquinona puede ser menor o igual a 1000 ppm, preferentemente menor o igual a 500 ppm e incluso más preferentemente menor o igual a 100 ppm.

Según otro aspecto, la invención se refiere a una composición que comprende:

- al menos 80 % de catecol, preferiblemente al menos 90 % de catecol, más preferiblemente al menos 99 % de catecol, y
- una cantidad mayor o igual a 0,1 ppm, preferentemente una cantidad mayor o igual a 1 ppm y aún más preferentemente una cantidad mayor o igual a 10 ppm de al menos un compuesto seleccionado entre 2-(alquil)fenol y 4-(alquil)fenol.

Ventajosamente, la cantidad de al menos un compuesto seleccionado entre 2-(alquil)fenol y 4-(alquil)fenol puede ser menor o igual a 1000 ppm, preferentemente menor o igual a 500 ppm e incluso más preferentemente menor o igual a 100 ppm.

Ventajosamente, la presente invención se refiere a una composición que comprende:

- al menos 80 % de hidroquinona, preferiblemente al menos 90 % de hidroquinona, más preferiblemente al menos 99 % de hidroquinona, y
- una cantidad mayor o igual a 0,1 ppm, preferentemente una cantidad mayor o igual a 1 ppm y aún más preferentemente una cantidad mayor o igual a 10 ppm de al menos un compuesto seleccionado entre 2-(*terc*-butoxi)fenol, 4-(*terc*-butoxi)fenol, (*terc*-butil)catecol y (*terc*-butil)hidroquinona.

Ventajosamente, la cantidad de al menos un compuesto seleccionado entre 2-(*terc*-butoxi)fenol, 4-(*terc*-butoxi)fenol, (*terc*-butil)catecol y (*terc*-butil)hidroquinona puede ser menor o igual a 1000 ppm, preferiblemente menor o igual a 500 ppm e incluso más preferiblemente menor o igual a 100 ppm.

Según otro aspecto, la invención se refiere a una composición que comprende:

- al menos 80 % de catecol, preferiblemente al menos 90 % de catecol, más preferiblemente al menos 99 % de catecol, y

- una cantidad mayor o igual a 0,1 ppm, preferentemente una cantidad mayor o igual a 1 ppm y aún más preferentemente una cantidad mayor o igual a 10 ppm de al menos un compuesto seleccionado entre 2-(*terc*-butil)fenol y 4-(*terc*-butil)fenol.

Ventajosamente, la cantidad de al menos un compuesto seleccionado entre 2-(*terc*-butil)fenol y 4-(*terc*-butil)fenol puede ser menor o igual a 1000 ppm, preferentemente menor o igual a 500 ppm e incluso más preferentemente menor o igual a 100 ppm.

Ventajosamente, la presente invención se refiere a una composición que comprende:

- al menos 80 % de hidroquinona, preferiblemente al menos 90 % de hidroquinona, más preferiblemente al menos 99 % de hidroquinona, y

- una cantidad mayor o igual a 0,1 ppm, preferentemente una cantidad mayor o igual a 1 ppm y aún más preferentemente una cantidad mayor o igual a 10 ppm de al menos un compuesto seleccionado entre 2-(isopropoxi)fenol, 4-(isopropoxi)fenol, isopropilcatecol, isopropilhidroquinona.

Ventajosamente, la cantidad de al menos un compuesto seleccionado entre 2-(isopropoxi)fenol, 4-(isopropoxi)fenol, isopropilcatecol, isopropilhidroquinona puede ser menor o igual a 1000 ppm, preferentemente menor o igual a 500 ppm y aún más preferentemente menor o igual a 100 ppm.

Según otro aspecto, la invención se refiere a una composición que comprende:

- al menos 80 % de catecol, preferiblemente al menos 90 % de catecol, más preferiblemente al menos 99 % de catecol, y

- una cantidad mayor o igual a 0,1 ppm, preferentemente una cantidad mayor o igual a 1 ppm y aún más preferentemente una cantidad mayor o igual a 10 ppm de al menos un compuesto seleccionado entre 2-isopropilfenol y 4-isopropilfenol.

Ventajosamente, la cantidad de al menos un compuesto seleccionado entre 2-isopropilfenol y 4-isopropilfenol puede ser menor o igual a 1000 ppm, preferentemente menor o igual a 500 ppm y aún más preferentemente menor o igual a 100 ppm.

Las composiciones objeto de la presente invención son particularmente interesantes ya que cumplen con un requisito para el control de un procedimiento industrial. La presencia y el contenido de los subproductos mencionados son compatibles, por un lado, con un procedimiento de hidroxilación de fenol de alta productividad que ofrece una amplia ventana operativa de producción de PC y HQ, y por otro lado, con procedimientos de purificación, que permiten controlar los costes generales del procedimiento.

Otro aspecto de la presente invención se refiere a un procedimiento para preparar una composición que comprende al menos un compuesto seleccionado entre hidroquinona y catecol según la invención, caracterizado por que comprende una etapa (a) de reacción del fenol con peróxido de hidrógeno en presencia de un catalizador, en un disolvente que comprende un alcohol, o una mezcla de alcoholes, seleccionado entre isopropanol, 2,2-dimetilpropanol y *terc*-butanol.

La etapa (a) corresponde a una hidroxilación del fenol. Este procedimiento permite la síntesis de hidroquinona (HQ) y catecol (PC). Ventajosamente, el procedimiento según la invención permite controlar la relación PC/HQ. La relación molar PC/HQ es menor o igual a 1, preferiblemente menor o igual a 0,7.

El peróxido de hidrógeno (H₂O₂) utilizado en la presente invención puede estar en disolución en agua. Se puede utilizar cualquier dilución de H₂O₂ en agua. En este procedimiento, se puede utilizar una concentración habitual de 30 % en agua, pero también se puede utilizar una disolución acuosa que tiene una mayor concentración en agua tal cual o en

forma diluida con un disolvente inerte que se puede seleccionar entre alcoholes, preferiblemente metanol, etanol, isopropanol, butanol, *terc*-butanol. El peróxido de hidrógeno se puede añadir de una sola vez. También se puede añadir peróxido de hidrógeno en porciones a la reacción durante un período de tiempo determinado.

5 Según el procedimiento de la presente invención, la reacción se lleva a cabo en presencia de un catalizador, preferiblemente un catalizador heterogéneo. El catalizador puede ser una zeolita que comprende titanio. Estas zeolitas pueden tener una estructura de la familia MFI o de la familia MEL. El catalizador puede ser una titanosilicalita. La composición de titanosilicalita según la presente invención puede estar representada mediante la siguiente estructura: $(\text{SiO}_2)_x(\text{TiO}_2)_{(1-x)}$. El valor de $x/(1-x)$ puede estar comprendido entre 5 y 1000, preferiblemente entre 10 y 500. La titanosilicalita se puede preparar según métodos conocidos por los expertos en la técnica, se puede citar, por ejemplo, el procedimiento del documento US 4,410,501. El catalizador puede ser preferentemente TS-1, TS-2, Ti-MWW, Ti-MCM68, más preferentemente el catalizador es TS-1.

15 La cantidad de catalizador utilizada en la presente invención es generalmente mayor o igual a 0,1 % en masa con respecto al fenol, preferiblemente mayor o igual a 0,4 % en masa. La cantidad de catalizador utilizada en la presente invención es generalmente menor o igual a 30 % en masa, preferiblemente menor o igual a 20 % en masa.

20 En el procedimiento según la invención, el disolvente comprende un alcohol o una mezcla de alcoholes, el alcohol se selecciona entre isopropanol, 2,2-dimetilpropanol y *terc*-butanol. Dicho alcohol se puede utilizar solo o con un codisolvente. Ventajosamente, el codisolvente se puede seleccionar entre agua.

Ventajosamente, la relación másica entre el alcohol usado en la reacción y el codisolvente puede estar comprendida entre 1:99 y 90:10, preferiblemente comprendida entre 3:97 y 80:20.

25 La cantidad de alcohol utilizada representa entre 1 y 90 % en peso, preferentemente entre 3 y 50 % en peso con respecto a la masa total de líquido en la reacción.

30 La cantidad de agua utilizada puede ser la cantidad de agua proporcionada por la disolución acuosa de peróxido de hidrógeno. La cantidad de codisolvente representa entre 5 y 90 % en peso, preferentemente entre 8 y 90 % en peso, más preferentemente entre 8 y 85 % en peso con respecto a la masa total de líquido en la reacción.

35 Preferiblemente, en el procedimiento según la invención, el disolvente comprende *terc*-butanol. El *terc*-butanol se puede utilizar solo o con un codisolvente. El codisolvente se puede seleccionar ventajosamente entre agua, acetona, acetonitrilo, 1,4-dioxano o un alcohol de fórmula $\text{R}'\text{-OH}$, o sus mezclas, en la que R' representa una cadena alquilo lineal o ramificada que comprende de 1 a 6 átomos de carbonos, preferentemente el alcohol se selecciona entre metanol, etanol, isopropanol, *n*-propanol, *n*-butanol. Ventajosamente, la relación másica entre el *terc*-butanol usado en la reacción y el codisolvente puede estar comprendida entre 1:99 y 90:10, preferiblemente comprendida entre 3:97 y 80:20.

40 La cantidad de *terc*-butanol utilizada representa entre 1 y 90 % en peso, preferentemente entre 3 y 50 % en peso con respecto a la masa total de líquido en la reacción.

45 La cantidad de agua utilizada puede ser la cantidad de agua proporcionada por la disolución acuosa de peróxido de hidrógeno. La cantidad de codisolvente representa entre 5 y 90 % en peso, preferentemente entre 8 y 90 % en peso, más preferentemente entre 8 y 85 % en peso con respecto a la masa total de líquido en la reacción.

La temperatura de reacción puede ser mayor o igual a 30 °C, preferiblemente mayor o igual a 40 °C. La temperatura de reacción puede ser menor o igual a 130 °C, preferiblemente menor o igual a 100 °C.

50 Este procedimiento se puede llevar a cabo de forma continua, semicontinua o por lotes.

Al final de la etapa (a), se puede obtener ventajosamente la composición según la invención que comprende al menos un compuesto seleccionado entre la hidroquinona y el catecol, caracterizada por que comprende además entre 0,1 y 10 000 ppm de al menos un compuesto seleccionado entre 2-(alcoxi)fenol, 4-(alcoxi)fenol, 2-(alquil)fenol, 4-(alquil)fenol, (alquil)catecol, (alquil)hidroquinona y alcoxibenceno.

60 Preferiblemente, al final de la etapa (a), se puede obtener ventajosamente la composición según la invención que comprende al menos un compuesto seleccionado entre hidroquinona y catecol, caracterizada por que comprende además entre 0,1 y 10 000 ppm de al menos un compuesto seleccionado entre 2-(*terc*-butoxi)fenol, 4-(*terc*-butoxi)fenol, 2-(*terc*-butil)fenol, 4-(*terc*-butil)fenol, (*terc*-butil)catecol, (*terc*-butil)hidroquinona y *terc*-butoxibenceno.

65 Preferiblemente, al final de la etapa (a), se puede obtener ventajosamente la composición según la invención que comprende al menos un compuesto seleccionado entre la hidroquinona y el catecol, caracterizada por que comprende además entre 0,1 y 10 000 ppm de al menos un compuesto seleccionado entre el 2-(isopropoxi)fenol, 4-(isopropoxi)fenol, 2-isopropilfenol, 4-isopropilfenol, isopropilcatecol, isopropilhidroquinona e isopropilbenceno.

Según una realización de la presente invención, el procedimiento descrito anteriormente puede comprender además una etapa (b) de purificación de la composición obtenida en la etapa (a). La selección del método de purificación no está particularmente limitada. El método de purificación utilizado se puede seleccionar en particular entre extracción líquido/líquido, destilación, cristalización o una combinación de estos métodos.

Según otra realización de la presente invención, el procedimiento según la invención puede comprender además una etapa (c) de separación de la hidroquinona y del catecol.

Así, al final de la etapa (c), se puede obtener:

- por un lado una composición que comprende al menos 80 % de hidroquinona y entre 0,1 y 1000 ppm de al menos un compuesto seleccionado entre 2-(alcoxi)fenol, 4-(alcoxi)fenol, (alquil)catecol y (alquil)hidroquinona.

- y por otra parte una composición que comprende al menos 80 % de catecol y entre 0,1 y 1000 ppm de al menos un compuesto seleccionado entre 2-(alquil)fenol y 4-(alquil)fenol.

Preferiblemente, al final de la etapa (c), se puede obtener:

- por un lado una composición que comprende al menos 80 % de hidroquinona y entre 0,1 y 1000 ppm de al menos un compuesto seleccionado entre 2-(*terc*-butoxi)fenol, 4-(*terc*-butoxi)fenol, (*terc*-butil)catecol y (*terc*-butil)hidroquinona.

- y por otra parte una composición que comprende al menos 80 % de catecol y entre 0,1 y 1.000 ppm de al menos un compuesto seleccionado entre 2-(*terc*-butil)fenol y 4-(*terc*-butil)fenol.

Preferiblemente, al final de la etapa (c), se puede obtener:

- por un lado una composición que comprende al menos 80 % de hidroquinona y entre 0,1 y 1000 ppm de al menos un compuesto seleccionado entre 2-(isopropoxi)fenol, 4-(isopropoxi)fenol, isopropilcatecol y la isopropilhidroquinona.

- y por otra parte una composición que comprende al menos 80 % de catecol y entre 0,1 y 1000 ppm de al menos un compuesto seleccionado entre 2-isopropilfenol y 4-isopropilfenol.

Eventualmente, el método según la presente invención puede comprender al menos una etapa (d) de conformación de los productos obtenidos en la etapa (c). La elección del método para dar forma a los productos obtenidos al final de la etapa (c) no está limitada. Los productos obtenidos según el procedimiento de la invención pueden así estar cristalizados o en forma de un polvo amorfo. Los productos obtenidos según el procedimiento de la invención pueden presentarse en forma de escamas, perlas, bolitas, pastillas, amorfas o cristalizadas.

REIVINDICACIONES

- 5 1. Composición que comprende al menos un compuesto seleccionado entre hidroquinona y catecol, caracterizada por que comprende además entre 0,1 y 10 000 ppm de al menos un compuesto seleccionado entre 2-(alcoxi)fenol, 4-(alcoxi)fenol, 2-(alquil)fenol, 4-(alquil)fenol, (alquil)catecol, (alquil)hidroquinona y alcoxibenceno, en el que el grupo alcoxi se selecciona entre *terc*-butoxi e isopropoxi, y el grupo alquilo se selecciona entre *terc*-butilo e isopropilo.
- 10 2. Composición según la reivindicación 1, caracterizada por que comprende además al menos un compuesto seleccionado entre 2-(alcoxi)fenol, 4-(alcoxi)fenol, 2-(alquil)fenol, 4-(alquil)fenol, (alquil)catecol y (alquil)hidroquinona en una cantidad:
 - mayor o igual a 0,5 ppm, preferiblemente una cantidad mayor o igual a 1 ppm e incluso más preferiblemente una cantidad mayor o igual a 10 ppm; y/o
 - menor o igual a 500 ppm, preferiblemente una cantidad menor o igual a 300 ppm e incluso más preferiblemente una cantidad menor o igual a 100 ppm.
- 15 3. Composición según una cualquiera de las reivindicaciones 1 a 2, que comprende al menos 80 % de hidroquinona y entre 0,1 y 1000 ppm de al menos un compuesto seleccionado entre 2-(alcoxi)fenol, 4-(alcoxi)fenol, (alquil)catecol y (alquil)hidroquinona.
- 20 4. Composición según una cualquiera de las reivindicaciones 1 a 3, que comprende al menos 80 % de catecol y entre 0,1 y 1000 ppm de al menos un compuesto seleccionado entre 2-(alquil)fenol y 4-(alquil)fenol.
- 25 5. Composición según la reivindicación 1, que comprende al menos un compuesto seleccionado entre hidroquinona y catecol, caracterizada por que comprende además entre 0,1 y 10 000 ppm de al menos un compuesto seleccionado entre 2-(*terc*-butoxi)fenol, 4-(*terc*-butoxi)fenol, 2-(*terc*-butil)fenol, 4-(*terc*-butil)fenol, (*terc*-butil)catecol, (*terc*-butil)hidroquinona y *terc*-butoxibenceno.
- 30 6. Composición según la reivindicación 1, que comprende al menos un compuesto seleccionado entre la hidroquinona y el catecol, caracterizada por que comprende además entre 0,1 y 10 000 ppm de al menos un compuesto seleccionado entre 2-(isopropoxi)fenol, 4-(isopropoxi)fenol, 2-isopropilfenol, 4-isopropilfenol, isopropilcatecol, isopropilhidroquinona e isopropilbenceno.
- 35 7. Procedimiento de preparación de una composición que comprende al menos un compuesto seleccionado entre la hidroquinona y el catecol definida según cualquiera de las reivindicaciones 1 a 6, caracterizado por que comprende una etapa (a) de reacción del fenol con peróxido de hidrógeno en presencia de un catalizador, en un disolvente que comprende un alcohol, o una mezcla de alcoholes, caracterizado por que el disolvente se selecciona entre isopropanol, 2,2-dimetilpropanol y *terc*-butanol.
- 40 8. Procedimiento según una cualquiera de las reivindicaciones 7, caracterizado por que comprende además al menos una etapa (b) de purificación de la composición obtenida en la etapa (a).
- 45 9. Procedimiento según la reivindicación 8, caracterizado por que comprende además una etapa (c) de separación de la hidroquinona y del catecol, opcionalmente, al menos una etapa (d) de conformación de los productos purificados obtenidos en la etapa (c), pudiendo los productos obtenidos en etapa (d) estar cristalizados o en forma de un polvo amorfo.
- 50 10. Procedimiento según una cualquiera de las reivindicaciones 7 a 9, caracterizado por que el catalizador es un catalizador heterogéneo, preferentemente una zeolita que comprende titanio, preferentemente TS-1, TS-2, Ti-MWW, Ti-MCM68, más preferentemente TS-1.
11. Procedimiento según una cualquiera de las reivindicaciones 7 a 10, caracterizado por que el disolvente comprende un alcohol, o una mezcla de alcoholes, preferentemente seleccionado entre isopropanol, 2,2-dimetilpropanol y *terc*-butanol, en presencia de un codisolvente seleccionado entre agua y un alcohol seleccionado entre metanol, etanol, isopropanol, *n*-propanol, *n*-butanol.