

【公報種別】特許法第17条の2の規定による補正の掲載

【部門区分】第3部門第2区分

【発行日】平成30年11月1日(2018.11.1)

【公表番号】特表2017-530126(P2017-530126A)

【公表日】平成29年10月12日(2017.10.12)

【年通号数】公開・登録公報2017-039

【出願番号】特願2017-516116(P2017-516116)

【国際特許分類】

C 0 7 D 309/10 (2006.01)

A 6 1 Q 13/00 (2006.01)

A 6 1 K 8/49 (2006.01)

A 6 1 Q 19/10 (2006.01)

A 6 1 Q 19/00 (2006.01)

A 6 1 Q 11/00 (2006.01)

A 6 1 K 47/22 (2006.01)

C 1 1 D 3/50 (2006.01)

C 1 1 B 9/00 (2006.01)

【F I】

C 0 7 D 309/10 C S P

A 6 1 Q 13/00 1 0 1

A 6 1 K 8/49

A 6 1 Q 19/10

A 6 1 Q 19/00

A 6 1 Q 11/00

A 6 1 K 47/22

C 1 1 D 3/50

C 1 1 B 9/00 U

C 1 1 B 9/00 G

【手続補正書】

【提出日】平成30年9月20日(2018.9.20)

【手続補正1】

【補正対象書類名】特許請求の範囲

【補正対象項目名】全文

【補正方法】変更

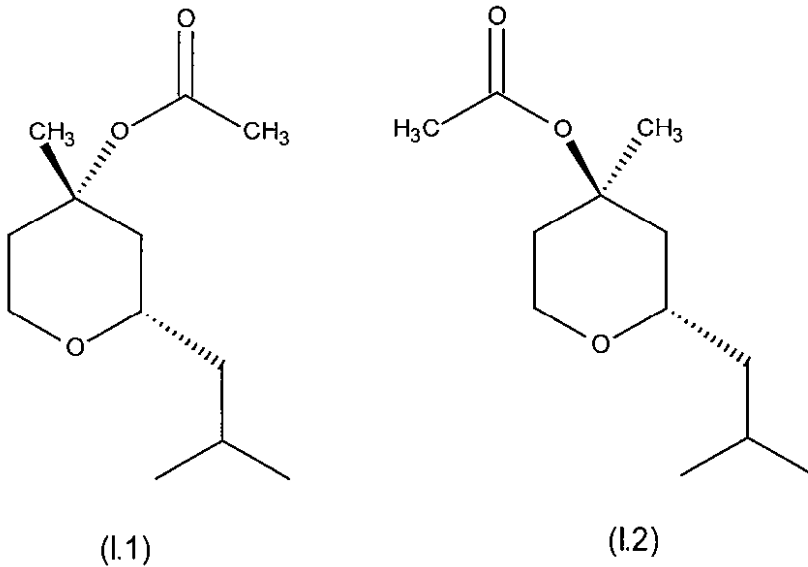
【補正の内容】

【特許請求の範囲】

【請求項1】

異性体として純粋な式(1.1)のcis-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート若しくは異性体として純粋な式(1.2)のtrans-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート又はcis-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート(1.1)とtrans-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート(1.2)の異性体混合物

## 【化1】



の、香料化合物としての使用であって、  
異性体混合物を使用する場合、

*cis*-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート(I.1)及び*trans*-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート(I.2)の全重量に対する*cis*-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート(I.1)の重量分率が90重量%~100重量%未満の範囲、又は

*cis*-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート(I.1)及び*trans*-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート(I.2)の全重量に対する*trans*-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート(I.2)の重量分率が90重量%~100重量%未満の範囲である使用。

## 【請求項2】

香料、洗剤及び洗浄剤、化粧品組成物、ボディケア組成物、衛生用品、口腔及び歯科衛生用製品、香りディスペンサー及びフレグランスから選択される組成物中での、請求項1に記載の使用。

## 【請求項3】

アイリス様香、ベルガモット様香、酢酸リナリル様香、木質香又はコショウ/ナツメグ様香の香りを生み出すための、異性体として純粋な式(I.1)の*cis*-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート、又は*cis*-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート(I.1)及び*trans*-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート(I.2)の全重量に対する*cis*-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート(I.1)の重量分率が90重量%~100重量%未満の範囲である異性体混合物の、請求項1又は2に記載の使用。

## 【請求項4】

ジャスミン様香、レザー様香又は強いフルーツ様香の香りを生み出すための、異性体として純粋な式(I.2)の*trans*-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート、又は*cis*-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート(I.1)及び*trans*-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート(I.2)の全重量に対する*trans*-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート(I.2)の重量分率が90重量%~100重量%未満の範囲である異性体混合物の、請求項1又は2に記載の使用。

## 【請求項5】

式(I.1)の化合物を、立体異性体として純粋な形態で、又は(2*S*,4*S*)-及び(2*R*,4*R*)-異性体混合物として使用する、請求項1~4のいずれか一項に記載の使用。

## 【請求項6】

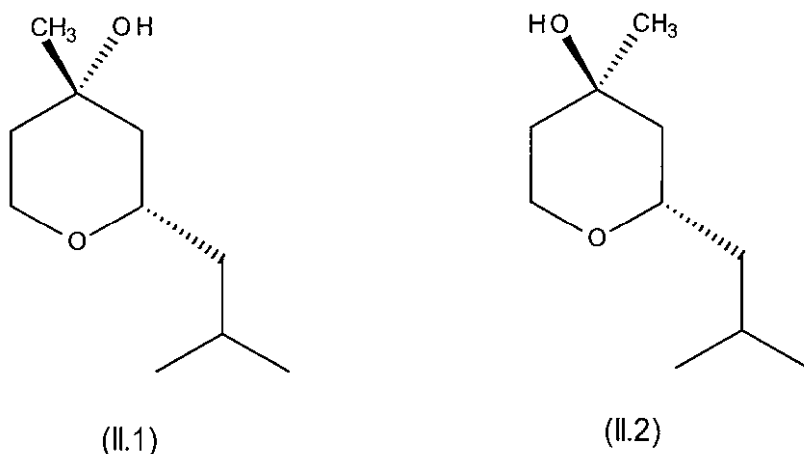
式(1.2)の化合物を、立体異性体として純粋な形態で、又は(2S,4R)-及び(2R,4S)-異性体混合物として使用する、請求項1~5のいずれか一項に記載の使用。

【請求項7】

異性体として純粋な式(1.1)のcis-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート若しくは異性体として純粋な式(1.2)のtrans-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート、又は(1.1)及び(1.2)の全重量に対する異性体混合物中の(1.1)の重量分率又は(1.2)の重量分率が90重量%~100重量%未満の範囲である(1.1)及び(1.2)の異性体混合物を製造するための方法であって、

i) cis-2-(2-メチルプロピル)-4-ヒドロキシ-4-メチルテトラヒドロピラン(II.1)とtrans-2-(2-メチルプロピル)-4-ヒドロキシ-4-メチルテトラヒドロピラン(II.2)の異性体混合物

【化2】



を式 $\text{CH}_3\text{C}(=\text{O})-\text{X}$ (式中、XはCl、Br又は $\text{CH}_3\text{C}(=\text{O})\text{O}$ である)の化合物と反応させ、  
ii) 場合により、ステップi)で得られた反応混合物を分離にかけて、異性体として純粋な(1.1)若しくは異性体として純粋な(1.2)又は(1.1)及び(1.2)の異性体混合物を含む少なくとも1つの画分を生成させ、(1.1)及び(1.2)の全重量に対する異性体混合物中の(1.1)の重量分率又は(1.2)の重量分率が90重量%~100重量%未満の範囲である方法。

【請求項8】

異性体として純粋な式(1.1)のcis-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート、又はcis-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート(1.1)及びtrans-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート(1.2)の全重量に対するcis-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート(1.1)の重量分率が90重量%~100重量%未満の範囲であるcis-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート(1.1)とtrans-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート(1.2)の異性体混合物。

【請求項9】

異性体として純粋な式(1.2)のtrans-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート、又はcis-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート(1.1)及びtrans-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート(1.2)の全重量に対するtrans-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート(1.2)の重量分率が90重量%~100重量%未満の範囲であるcis-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート(1.1)とtrans-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート(1.2)の異性体混合物。

【請求項10】

a) 異性体として純粋な式(1.1)のcis-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート若しくは異性体として純粋な式(1.2)のtrans-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート、或いはcis-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート(1.1)及びtrans-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-

イル)アセテート(1.2)の全重量に対するcis-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート(1.1)の重量分率が90重量%~100重量%未満の範囲である、又はcis-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート(1.1)及びtrans-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート(1.2)の全重量に対するtrans-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート(1.2)の重量分率が90重量%~100重量%未満の範囲であるcis-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート(1.1)とtrans-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート(1.2)の異性体混合物、

b)場合により、化合物(1.1)及び(1.2)とは異なる少なくとも1種の異なる香料化合物、並びに

c)場合により少なくとも1種の希釈剤を含み、

但し、組成物が少なくとも1つの成分b)又はc)を含む、フレグランス又は香料物質組成物。

【請求項11】

組成物の全重量に対して0.1~70重量%、好ましくは1~50重量%の重量分率で成分a)を含む、請求項10に記載の組成物。

【請求項12】

アイリス様香、ベルガモット様香、酢酸リナリル様香、木質香又はコショウ/ナツメグ様香で製品に香気又は風味を付与する且つ/又はそれを強化するための方法であって、製品を、感覚刺激的に有効な量の、異性体として純粋な式(1.1)のcis-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート、又はcis-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート(1.1)及びtrans-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート(1.2)の全重量に対するcis-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート(1.1)の重量分率が90重量%~100重量%未満の範囲である異性体混合物と接触させる方法。

【請求項13】

ジャスミン様香、レザー様香又は強いフルーツ様香で製品に香気又は風味を付与する且つ/又はそれを強化するための方法であって、製品を、感覚刺激的に有効な量の、異性体として純粋な式(1.2)のtrans-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート、又はcis-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート(1.1)及びtrans-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート(1.2)の全重量に対するtrans-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート(1.2)の重量分率が90重量%~100重量%未満の範囲である異性体混合物と接触させる方法。

【請求項14】

感覚刺激的に有効な量の、請求項1~6のいずれか一項に記載の異性体として純粋な式(1.1)のcis-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート若しくは異性体として純粋な式(1.2)のtrans-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート又はcis-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート(1.1)とtrans-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート(1.2)の異性体混合物を含む、或いは感覚刺激的に有効な量の、請求項10又は11に記載のフレグランス又は香料物質組成物を含む、香り付けされ又は芳香化された製品。

【請求項15】

香りディスペンサー及びフレグランス香料、洗剤及び洗浄剤、化粧品組成物、ボディケア組成物、衛生用品、口腔及び歯科衛生用製品、香りディスペンサー、フレグランス、医薬組成物及び作物保護組成物から選択される、請求項14に記載の製品。

【請求項16】

酢酸リナリルを含むフレグランス若しくは香料物質組成物又は酢酸リナリルで芳香化若しくは香り付けされた製品中の酢酸リナリルの部分的又は完全な置き換えのための、異性体として純粋な式(1.1)のcis-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセ



- a) 異性体として純粋な式(1.1)のcis-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート若しくは異性体として純粋な式(1.2)のtrans-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート、又は、cis-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート(1.1)とtrans-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート(1.2)の全重量に対するcis-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート(1.1)の重量分率が90重量%~100重量%未満の範囲である、或いはcis-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート(1.1)及びtrans-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート(1.2)の全重量に対するtrans-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート(1.2)の重量分率が90重量%~100重量%未満の範囲である、cis-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート(1.1)とtrans-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート(1.2)の異性体混合物、
- b) 場合により、化合物(1.1)及び(1.2)とは異なる少なくとも1種の異なる香料化合物、並びに
- c) 場合により少なくとも1種の希釈剤を含み、但し、少なくとも1つの成分b)又はc)を含む、フレグランス又は香味剤化合物を提供する。

【手続補正4】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0016

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0016】

本発明は、さらに、ジャスミン様香、レザー様香又は強いフルーツ様香で製品に香気又はフレーバーを付与する且つ/又はそれを強化する方法であって、前記製品を、感覚刺激的に有効な量の、異性体として純粋な式(1.2)のtrans-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート、又はcis-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート(1.1)及びtrans-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート(1.2)の全重量に対するtrans-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート(1.2)の重量分率が90重量%~100重量%未満の範囲である異性体混合物と接触させる、方法を提供する。

【手続補正5】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0019

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0019】

本発明は以下の利点を有する：

- 異性体として純粋な又は異性体として高度に濃縮されたcis-又はtrans-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテートで、非常に有利な嗅覚的特性を提供する香料化合物として、特にフレグランスとして使用するために、新規な化合物を提供する。異性体として純粋な式(1.1)のcis-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート、及び少なくとも90重量%のcis-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテートの重量分率を有する異性体混合物は、フローラル及びシトラス様香、例えばアイリス様香、ベルガモット様香、酢酸リナリル様香(酢酸リナリルは、ラベンダー油及びベルガモット油中の主成分の1つである)、木質香又はコショウ/ナツメグ香などで香りを生み出すのに適している。異性体として純粋な式(1.2)のtrans-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート、及び少なくとも90重量%のtrans-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテートの重量分率を有する異性体混合物は、ジャスミン様香、レザー様香又は強いフルーツ様香の香りを生み出すのに適して

いる。これらの香気特性は、欧州特許第0383446号による混合物に帰属するものとは大幅に異なる。

- 異性体として純粋な又は異性体として高度に濃縮されたcis-又はtrans-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテートは、他の着香剤との相乗効果の結果としての多面的 (facet-rich) な感覚プロファイルの提供を可能にする。したがって、例えば異性体として純粋な又は異性体として高度に濃縮されたcis-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテートを2-置換4-ヒドロキシ-4-メチルテトラヒドロピランと組み合わせると、ベルガモット及びフルーツの特徴を有するフローラルな組成物に適した香気プロファイルが得られる。異性体として純粋な又は異性体として高度に濃縮されたcis-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテートと酢酸リナリルの組合せについては、同様に非常に多面的な香気プロファイルをもたらす。

- 異性体として純粋な又は異性体として高度に濃縮されたcis-又はtrans-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテートの製造は、容易に、2-イソブチル-4-ヒドロキシ-4-メチルテトラヒドロピランの製造に組み込むことができる。この製造は、例えば2-イソブチル-4-ヒドロキシ-4-メチルテトラヒドロピランから出発して、エステル化、続くエステル化生成物の分別蒸留によって実施される。

【手続補正6】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0056

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0056】

フレグランス又はフレーバー組成物

本発明は、さらに、

- a) 異性体として純粋な式(1.1)のcis-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート若しくは異性体として純粋な式(1.2)のtrans-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート、或いはcis-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート(1.1)及びtrans-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート(1.2)の全重量に対するcis-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート(1.1)の重量分率が90重量%~100重量%未満の範囲である、又はcis-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート(1.1)及びtrans-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート(1.2)の全重量に対するtrans-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート(1.2)の重量分率が90重量%~100重量%未満の範囲である、cis-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート(1.1)とtrans-(2-イソブチル-4-メチルテトラヒドロピラン-4-イル)アセテート(1.2)の異性体混合物、
  - b) 場合により、化合物(1.1)及び(1.2)とは異なる少なくとも1種の異なる香料化合物、並びに
  - c) 場合により少なくとも1種の希釈剤、
- を含み、但し、該組成物が少なくとも1つの成分b)又はc)を含む、フレグランス又はフレーバー組成物を提供する。