

19



OFICINA ESPAÑOLA DE
PATENTES Y MARCAS

ESPAÑA



11 Número de publicación: **2 948 107**

51 Int. Cl.:

C07C 41/02 (2006.01)
C08G 65/00 (2006.01)
C07C 41/01 (2006.01)
C07C 43/178 (2006.01)
C08G 65/26 (2006.01)
C08G 65/325 (2006.01)
C08G 65/34 (2006.01)

12

TRADUCCIÓN DE PATENTE EUROPEA

T3

- 86 Fecha de presentación y número de la solicitud internacional: **28.08.2015** **PCT/US2015/047397**
87 Fecha y número de publicación internacional: **03.03.2016** **WO16033437**
96 Fecha de presentación y número de la solicitud europea: **28.08.2015** **E 15836695 (5)**
97 Fecha y número de publicación de la concesión europea: **29.03.2023** **EP 3186217**

54 Título: **Poliéteres, poliaminas, politioéteres y métodos para su fabricación**

30 Prioridad:

29.08.2014 US 201462043943 P

45 Fecha de publicación y mención en BOPI de la
traducción de la patente:
31.08.2023

73 Titular/es:

P2 SCIENCE, INC. (100.0%)
4 Research Drive
Woodbridge, CT 06525, US

72 Inventor/es:

FOLEY, PATRICK y
YANG, YONGHUA

74 Agente/Representante:

ELZABURU, S.L.P

ES 2 948 107 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

Poliéteres, poliaminas, politioéteres y métodos para su fabricación

Solicitudes relacionadas

5 Esta solicitud reivindica el beneficio y la prioridad de la solicitud de patente provisional de EE. UU. N.º 62/043,943, presentada el 29 de agosto de 2014, titulada, "Poliéteres, poliaminas, politioéteres y métodos para su fabricación".

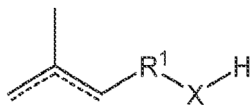
Antecedentes de la invención

10 Los compuestos poliméricos, y específicamente los poliéteres, poliaminas y politioéteres, han encontrado uso como lubricantes, emolientes, humectantes y tensioactivos. Los compuestos de la invención se pueden usar en formulaciones de productos químicos cosméticos o especiales y, en algunos casos, se pueden usar como alternativas de origen natural de los polímeros de silicona. El documento JP2008050415 describe un método para producir el polímero basado en terpeno y/o alilfenol que implica polimerizar el compuesto basado en terpeno que tiene un doble enlace carbono-carbono, y/o el alilfenol, o una mezcla del compuesto basado en terpeno que tiene el doble enlace carbono-carbono y/o el alilfenol, con otro compuesto insaturado adicionalmente polimerizable en una solución acuosa básica de peróxido de hidrógeno con calentamiento.

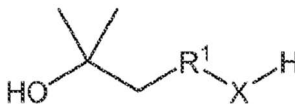
15 Se desean nuevos planteamientos de polimerización que permitan el uso de diferentes materiales de partida y la incorporación de nuevos grupos funcionales. Los polímeros se formulan en varias aplicaciones de productos químicos especiales, incluido para el cuidado personal, para alterar y mejorar la función del producto. La funcionalidad del polímero depende de su tamaño y composición, y son muy deseadas composiciones nuevas y renovables ya que tienen el potencial de mejorar el rendimiento de la aplicación.

Sumario de la invención

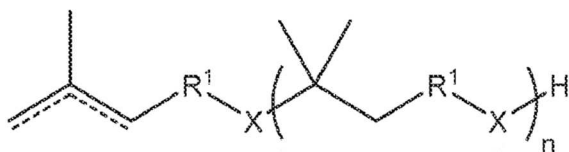
20 La invención presenta un método para producir un compuesto de Fórmula I o una de sus sales. El método incluye hacer reaccionar un compuesto de Fórmula II o Fórmula III:

**Fórmula II,**

o

**Fórmula III,**

25 con un ácido de Lewis o de Bronsted (p. ej., ácido metanosulfónico) para obtener un compuesto de Fórmula I o una de sus sales:

**Fórmula I**

en donde,

30 R¹ es un enlace, alquilo C₁-C₁₂ opcionalmente sustituido, alquenilo C₂-C₁₂ opcionalmente sustituido o alquinilo C₂-C₁₂ opcionalmente sustituido;

X es O, NH o S;

uno de los  es un doble enlace y el otro  es un enlace sencillo; y

35 n es un número entero entre 1 y 10 000. Los catalizadores de ácido de Lewis adecuados incluyen moléculas basadas en estaño, zinc, aluminio y boro, así como muchos ácidos de Lewis de tipo lantánido y actínido. Los ácidos de Bronsted adecuados incluyen ácido sulfúrico, ácido clorhídrico, ácido metanosulfónico, ácido tósico, ácido fosfórico, ácido trifluoroacético y ácido tricloroacético.

5

Otras características y ventajas de la invención serán evidentes a partir de la siguiente descripción detallada y reivindicaciones.

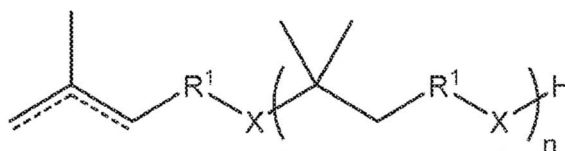
Breve descripción de los dibujos

10 La figura 1 es un espectro de RMN ^1H de policitronelol.

Descripción detallada de la invención

15

El presente método de la invención presenta un compuesto según la Fórmula I:



Fórmula I

20 o una de sus sales, en donde,

R¹ es un enlace, alquilo C₁-C₁₂ opcionalmente sustituido, alquenilo C₂-C₁₂ opcionalmente sustituido o alquinilo C₂-C₁₂ opcionalmente sustituido;

X es O, NH o S;

uno de los es un doble enlace y el otro es un enlace sencillo; y

25 n es un número entero entre 1 y 10 000.

En algunas realizaciones, X es O.

En algunas realizaciones, X es NH.

En algunas realizaciones, X es S.

En algunas realizaciones, R¹ es alquilo C₁-C₁₂ lineal o alquilo C₃-C₁₂ ramificado opcionalmente sustituido.

30 En algunas realizaciones, R¹ es alquilo C₁-C₁₂ lineal o alquilo C₃-C₁₂ ramificado no sustituido.

En algunas realizaciones, R¹ es alquilo C₁-C₁₂ lineal no sustituido.

En algunas realizaciones, R¹ es alquilo C₃-C₁₂ ramificado no sustituido.

En algunas realizaciones, R¹ es alqueno C₂-C₁₂ lineal o alqueno C₃-C₁₂ ramificado opcionalmente sustituido.

En algunas realizaciones, R¹ es alqueno C₂-C₁₂ lineal o alqueno C₃-C₁₂ ramificado no sustituido.

35 En algunas realizaciones, R¹ es alqueno C₂-C₁₂ lineal no sustituido.

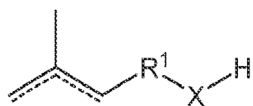
En algunas realizaciones, R¹ es alquenilo C₃-C₁₂ ramificado no sustituido.

En algunas realizaciones, n es mayor que 1 (p. ej., entre 2 y aproximadamente 100, entre aproximadamente 100 y aproximadamente 1000, entre aproximadamente 1000 y aproximadamente 5000, entre aproximadamente 5000 y aproximadamente 10 000).

En algunas realizaciones, n es 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9 o 10.

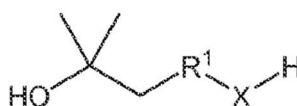
En algunas realizaciones, n es 2 o 3.

La invención presenta un método para producir un compuesto de Fórmula I o una de sus sales. El método incluye hacer reaccionar un compuesto de Fórmula II o Fórmula III:



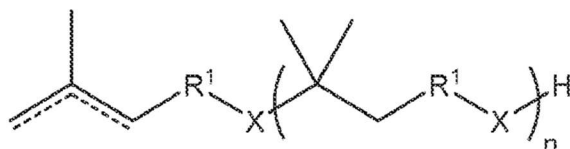
Fórmula II,

o



Fórmula III,

con ácido metanosulfónico para obtener un compuesto de Fórmula I o una de sus sales:



Fórmula I

en donde,

- 10 R^1 es un enlace, alquilo C_1 - C_{12} opcionalmente sustituido, alqueno C_2 - C_{12} opcionalmente sustituido o alquino C_2 - C_{12} opcionalmente sustituido;

X es O, NH o S;

uno de los  es un doble enlace y el otro  es un enlace sencillo; y

n es un número entero entre 1 y 10 000.

- 15 En algunas realizaciones, la reacción de un compuesto de Fórmula II o Fórmula III con ácido metanosulfónico comprende una etapa de incubación, etapa de inactivación, una etapa de separación de fases y una etapa de destilación.

En algunas realizaciones, la etapa de incubación se produce a temperatura ambiente.

En algunas realizaciones, la etapa de incubación se produce durante cuatro días.

- 20 En algunas realizaciones, la etapa de destilación se produce a 85°C.

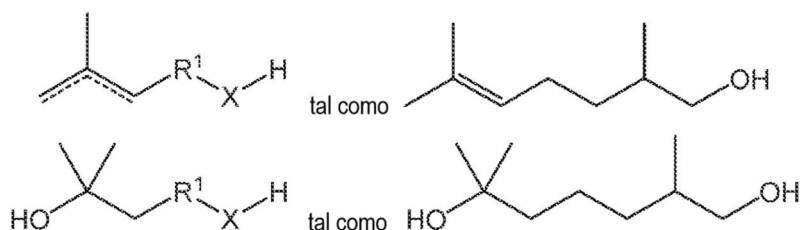
En algunas realizaciones, la etapa de destilación se produce a 1.5 mbar.

- 25 En algunas realizaciones, un compuesto de fórmula II (p. ej., citrionelol) se combina con ácido metanosulfónico y se agita (p. ej., a temperatura ambiente) (p. ej., durante cuatro días). El progreso de la reacción se vigila (p. ej., por RMN 1H). A continuación, la reacción se inactiva (p. ej., añadiendo NaOH 1 M). Se añade un disolvente polar (p. ej., acetato de etilo) y se separan las fases. A continuación, la fase orgánica se lava (p. ej., con salmuera). A continuación, se separa el disolvente polar (p. ej., por evaporación). Posteriormente, se aplica destilación al vacío (p. ej., utilizando un sistema de destilación de película fina de recorrido corto) (p. ej., a 85°C) (p. ej., a 1.5 mbar) para separar el material de partida sin reaccionar y los productos químicos de bajo punto de ebullición. Finalmente, se determina el peso molecular medio y el rendimiento del producto polimérico. Nagai describió métodos para la formación de éteres a partir de citrionelol utilizando éterato de trifluoruro de boro. Nagai, Bill, *Chem. Soc. Jap.* 49(1), 265-269 (1976).
- 30

El procedimiento descrito en el presente documento se puede aplicar utilizando muchas combinaciones diferentes de alcoholes olefínicos, lo que da como resultado una gran variedad de nuevas composiciones de materia. Además, los alcoholes olefínicos se pueden hidroxilar o alcoxilar en el carbono más sustituido de la olefina y usarse como un equivalente funcional de la olefina. Por ejemplo, el Esquema 2 muestra equivalentes funcionales para este procedimiento, donde R^1 es como se define en la Fórmula I anterior.

35

Esquema 2



Los ejemplos no limitantes de alcoholes olefínicos adecuados para los procedimientos descritos en el presente documento incluyen los representados en la Tabla 1 a continuación, así como sus análogos sustituidos y/o insaturados y equivalentes funcionales. Uno de los es un doble enlace y el otro es un enlace simple.

5

Tabla 1

10 Varias de las moléculas de la Tabla 1 anterior pueden derivarse de recursos renovables tales como terpenos (p. ej., ácido citronélico y/o citronelenos) o ácidos grasos o alcoholes de aceites vegetales insaturados. Cuando estas moléculas se obtienen a partir de ácidos grasos o alcoholes insaturados, la metátesis de los ácidos grasos o alcoholes con una olefina adecuada tal como isobutileno o 2,3-dimetilbuteno, o la ozonólisis reductora seguida de olefinación tipo Wittig, pueden producir materiales de partida adecuados. La metátesis de ácidos grasos o alcoholes también puede dar lugar a olefinas internas que luego pueden experimentar isomerización de olefinas para producir

15 compuestos del tipo descritos en la Tabla 1. En general, las olefinas y los correspondientes equivalentes funcionales también pueden prepararse añadiendo especies organometálicas a ésteres, llevando a cabo olefinaciones de aldehídos de tipo Wittig o Horner-Wadsworth-Emmons, o llevando a cabo reacciones de metátesis en precursores de olefina adecuados.

20 Los polímeros obtenidos a partir de este procedimiento pueden poseer grupos terminales alcohol y olefínicos, como se indica en la Fórmula I. Estos grupos alcohol y olefínicos se pueden usar para hacer crecer más el polímero y añadir funcionalidad adicional. Los métodos para preparar y hacer crecer polímeros olefínicos incluyen polimerización por radicales libres, polimerización por metátesis, polimerización aniónica y/o polimerización catiónica. La Tabla 2 a continuación incluye polímeros representativos que pueden obtenerse mediante los procedimientos descritos en el presente documento, donde n es como se define en la Fórmula I anterior.

25

Tabla 2

Número de compuesto	Estructura
101	<chem>H(OCC(C)CCC)nOCC(C)CC=C(C)C</chem>

Definiciones

Los detalles de una o más realizaciones de la invención se exponen en la siguiente descripción adjunta. A menos que se defina de otro modo, todos los términos técnicos y científicos utilizados en el presente documento tienen el mismo significado que comúnmente entiende un experto en la técnica a la que pertenece esta invención. En caso de conflicto, prevalecerá la presente memoria descriptiva.

A menos que se indique lo contrario, debe entenderse que la terminología utilizada en el presente documento tiene el propósito de describir realizaciones particulares únicamente y no pretende ser limitativa. En esta memoria descriptiva y en las reivindicaciones que siguen, se hará referencia a una serie de términos, que se definirán para tener las definiciones expuestas a continuación.

Como se usa en el presente documento, las formas singulares "un", "una" y "el", "la" incluyen referentes plurales a menos que el contexto dicte claramente lo contrario. Así, por ejemplo, la referencia a "un reaccionante" no solo incluye un solo reaccionante sino también una combinación o mezcla de dos o más reaccionantes diferentes, la referencia a "un sustituyente" incluye un solo sustituyente así como dos o más sustituyentes, y similares.

Como se usa en el presente documento, las frases "por ejemplo", "tal como" o "incluido" pretenden introducir ejemplos que aclaran más la materia general. Estos ejemplos se proporcionan solo como una ayuda para comprender la descripción y no pretenden ser limitativos de ninguna manera. Además, tal como se usan en el presente documento, los términos "puede", "opcional", "opcionalmente" o "puede opcionalmente" significan que la circunstancia descrita posteriormente puede ocurrir o no, de modo que la descripción incluye casos en los que ocurre la circunstancia y casos donde no ocurre. Por ejemplo, la frase "opcionalmente presente" significa que un objeto puede estar presente o no y, por lo tanto, la descripción incluye casos en donde el objeto está presente y casos en donde el objeto no está presente.

Como se usa en el presente documento, la frase "que tiene la fórmula" o "que tiene la estructura" no pretende ser limitativa y se usa de la misma manera que se usa comúnmente el término "que comprende".

"Isomería" significa compuestos que tienen fórmulas moleculares idénticas pero difieren en la secuencia de enlace de sus átomos o en la disposición de sus átomos en el espacio. Los isómeros que difieren en la disposición de sus átomos en el espacio se denominan "estereoisómeros". Los estereoisómeros que no son imágenes especulares entre sí se denominan "diastereoisómeros", y los estereoisómeros que son imágenes especulares entre sí no superponibles se denominan "enantiómeros" o, a veces, isómeros ópticos. Una mezcla que contiene cantidades iguales de formas enantioméricas individuales de quiralidad opuesta se denomina "mezcla racémica".

Un átomo de carbono unido a cuatro sustituyentes no idénticos se denomina "centro quiral".

"Isómero quiral" significa un compuesto con al menos un centro quiral. Los compuestos con más de un centro quiral pueden existir como un diastereoisómero individual o como una mezcla de diastereoisómeros, denominada "mezcla diastereoisomérica". Cuando está presente un centro quiral, un estereoisómero puede caracterizarse por la configuración absoluta (R o S) de ese centro quiral. La configuración absoluta se refiere a la disposición en el espacio de los sustituyentes unidos al centro quiral. Los sustituyentes unidos al centro quiral en consideración se clasifican según la *Regla de secuencia* de Cahn, Ingold y Prelog. (Cahn et al., *Angew. Chem. Inter. Edit.* 1966, 5, 385; fe de erratas 511; Cahn et al., *Angew. Chem.* 1966, 78, 413; Cahn e Ingold, *J. Chem. Soc.* 1951 (Londres), 612; Cahn et al., *Experientia* 1956, 12, 81; Cahn, *J. Chem. Educ.* 1964, 41, 116). En algunas fórmulas de la presente solicitud, uno o más centros quirales se identifican mediante un asterisco colocado junto al carbono quiral. En otras fórmulas, no se identifica ningún centro quiral, pero los isómeros quirales, sin embargo, están cubiertos por estas fórmulas.

"Isómero geométrico" significa los diastereoisómeros que deben su existencia a la rotación impedida alrededor de dobles enlaces. Estas configuraciones se diferencian en sus nombres por los prefijos cis y trans, o Z y E, que indican que los grupos están en el mismo lado o en el lado opuesto del doble enlace en la molécula según las reglas de Cahn-Ingold-Prelog.

Algunos compuestos de la presente invención pueden existir en una forma tautomérica que también se pretende que esté abarcada dentro del alcance de la presente invención. "Tautómeros" se refiere a compuestos cuyas estructuras

difieren notablemente en la disposición de los átomos, pero que existen en un equilibrio fácil y rápido. Debe entenderse que los compuestos de la invención pueden representarse como diferentes tautómeros. También debe entenderse que cuando los compuestos tienen formas tautoméricas, se pretende que todas las formas tautoméricas estén dentro del alcance de la invención, y la denominación de los compuestos no excluye ninguna forma tautomérica. Además, aunque puede estar descrito un tautómero, la presente invención incluye todos los tautómeros de los presentes compuestos.

Como se usa en el presente documento, el término "sal" puede incluir sales de adición de ácido que incluyen hidrocioruros, hidrobromuros, fosfatos, sulfatos, hidrogenosulfatos, alquilsulfonatos, arilsulfonatos, acetatos, benzoatos, citratos, maleatos, fumaratos, succinatos, lactatos y tartratos; cationes de metales alcalinos tales como Na^+ , K^+ , Li^+ , sales de metales alcalinotérreos tales como Mg^{2+} o Ca^{2+} , o sales de aminas orgánicas, o sales de fosfonio orgánicas.

El término "alquilo", como se usa en el presente documento, se refiere a un grupo hidrocarburo saturado, monovalente o bivalente, ramificado o no ramificado, que típicamente, aunque no necesariamente, contiene de 1 a aproximadamente 12 átomos de carbono, tal como metilo, etilo, *n*-propilo, isopropilo, *n*-butilo, isobutilo, *t*-butilo, octilo y similares.

El término "alqueno", como se usa en el presente documento, se refiere a un grupo hidrocarburo insaturado, monovalente o bivalente, ramificado o no ramificado, que típicamente, aunque no necesariamente, contiene de 2 a aproximadamente 12 átomos de carbono y 1-10 dobles enlaces carbono-carbono, tal como etileno, *n*-propileno, isopropileno, *n*-butileno, isobutileno, *t*-butileno, octileno y similares.

El término "alquino", como se usa en el presente documento, se refiere a un grupo hidrocarburo insaturado, monovalente o bivalente, ramificado o no ramificado, que típicamente, aunque no necesariamente, contiene de 2 a aproximadamente 12 átomos de carbono y 1-6 triples enlaces carbono-carbono, tal como etino, propino, butino, pentino, hexino, heptino, octino y similares.

Por "sustituido" como en "alquilo sustituido", "alqueno sustituido", "alquino sustituido" y similares, se entiende que en el alquilo, alqueno, alquino u otro resto, al menos un átomo de hidrógeno unido a un átomo de carbono se reemplaza por uno o más sustituyentes que no son hidrógeno, p. ej., por un grupo funcional.

Los ejemplos de grupos funcionales incluyen, sin limitación: halógeno, hidroxilo, sulfhidrilo, alcoxi $\text{C}_1\text{-C}_{24}$, alquenoiloxi $\text{C}_2\text{-C}_{24}$, alquinoiloxi $\text{C}_2\text{-C}_{24}$, ariloxi $\text{C}_5\text{-C}_{20}$, acilo (incluyendo alquil($\text{C}_2\text{-C}_{24}$)-carbonilo (-CO-alquilo) y aril($\text{C}_6\text{-C}_{20}$)-carbonilo (-CO-arilo)), aciloxi (-O-acilo), alcoxi($\text{C}_2\text{-C}_{24}$)-carbonilo (-CO-O-alquilo), ariloxi($\text{C}_6\text{-C}_{20}$)-carbonilo (-CO-O-arilo), halocarbonilo (-CO)-X donde X es halógeno, carbonato de alquilo $\text{C}_2\text{-C}_{24}$ (-O-(CO)-O-alquilo), carbonato de arilo $\text{C}_6\text{-C}_{20}$ (-O-(CO)-O-arilo), carboxi (-COOH), carboxilato (-COO⁻), carbamoilo (-CO-NH₂), alquil($\text{C}_1\text{-C}_{24}$)-carbamoilo monosustituido (-CO-NH(alquilo $\text{C}_1\text{-C}_{24}$)), alquilcarbamoilo disustituido (-CO-N(alquilo $\text{C}_1\text{-C}_{24}$)₂), arilcarbamoilo monosustituido (-CO-NH-arilo), tiocarbamoilo (-CS-NH₂), carbamido (-NH-CO-NH₂), ciano (-C≡N), isociano (-N≡C⁻), cianato (-O-C≡N), isocianato (-O-N≡C⁻), isotiocianato (-S-C≡N), azido (-N=N=N⁻), formilo (-CO-H), tioformilo (-CS-H), amino (-NH₂), amino mono y disustituido con alquilo $\text{C}_1\text{-C}_{24}$, amino mono y disustituido con arilo $\text{C}_5\text{-C}_{20}$, alquil($\text{C}_2\text{-C}_{24}$)-amido (-NH-CO-alquilo), aril($\text{C}_5\text{-C}_{20}$)-amido (-NH-CO-arilo), imino (-CR=NH donde R = hidrógeno, alquilo $\text{C}_1\text{-C}_{24}$, arilo $\text{C}_5\text{-C}_{20}$, alcarilo $\text{C}_6\text{-C}_{20}$, aralquilo $\text{C}_6\text{-C}_{20}$, etc.), alquilimino (-CR=N(alquilo), donde R = hidrógeno, alquilo, arilo, alcarilo, etc.), arilimino (-CR=N(arilo), donde R = hidrógeno, alquilo, arilo, alcarilo, etc.), nitro (-NO₂), nitroso (-NO), sulfo (-SO₂-OH), sulfonato (-SO₂-O⁻), alquilsulfanilo $\text{C}_1\text{-C}_{24}$ (-S-alquilo; también denominado "alquiltio"), arilsulfanilo (-S-arilo; también denominado "ariltio"), alquilsulfonilo $\text{C}_1\text{-C}_{24}$ (-SO₂-alquilo), arilsulfonilo $\text{C}_5\text{-C}_{20}$ (-SO₂-arilo), alquilsulfonilo $\text{C}_1\text{-C}_{24}$ (-SO₂-alquilo), arilsulfonilo $\text{C}_5\text{-C}_{20}$ (-SO₂-arilo), fosfono (-P(O)(OH)₂), fosfonato (-P(O)(O⁻)₂), fosfinato (-P(O)(O⁻)), fosfo (-PO₂), -fosfino (-PH₂), fosfino mono y disustituido con alquilo $\text{C}_1\text{-C}_{24}$, fosfino mono y disustituido con arilo $\text{C}_5\text{-C}_{20}$; y los restos hidrocarbilo tales como alquilo $\text{C}_1\text{-C}_{24}$ (que incluye alquilo $\text{C}_1\text{-C}_{18}$, que incluye además alquilo $\text{C}_1\text{-C}_{12}$, y que incluye además alquilo $\text{C}_1\text{-C}_6$), alqueno $\text{C}_2\text{-C}_{24}$ (que incluye alqueno $\text{C}_2\text{-C}_{18}$, que incluye además alqueno $\text{C}_2\text{-C}_{12}$, y que incluye además alqueno $\text{C}_2\text{-C}_6$), alquino $\text{C}_2\text{-C}_{24}$ (que incluye alquino $\text{C}_2\text{-C}_{18}$, que incluye además alquino $\text{C}_2\text{-C}_{12}$, y que incluye además alquino $\text{C}_2\text{-C}_6$), arilo $\text{C}_5\text{-C}_{20}$ (que incluye arilo $\text{C}_5\text{-C}_{20}$ y que incluye además arilo $\text{C}_5\text{-C}_{12}$) y aralquilo $\text{C}_6\text{-C}_{30}$ (que incluye aralquilo $\text{C}_6\text{-C}_{20}$), y que incluye además aralquilo $\text{C}_6\text{-C}_{12}$). Además, los grupos funcionales antes mencionados pueden, si un grupo particular lo permite, estar sustituidos adicionalmente con uno o más grupos funcionales adicionales o con uno o más restos hidrocarbilo tales como los específicamente enumerados anteriormente. Por ejemplo, el grupo alquilo o alqueno puede estar ramificado. Por ejemplo, el "sustituyente" es un grupo alquilo, p. ej., un grupo metilo.

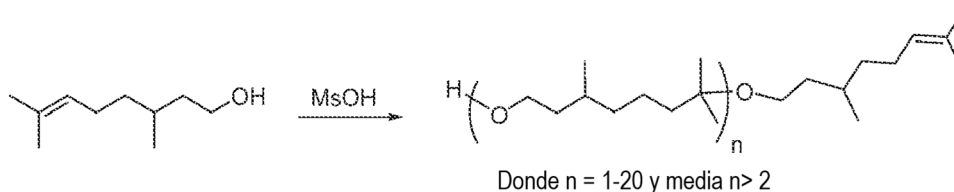
En la presente memoria descriptiva, la fórmula estructural del compuesto representa un cierto isómero por conveniencia en algunos casos, pero la presente invención incluye todos los isómeros, tales como isómeros geométricos, isómeros ópticos basados en un carbono asimétrico, estereoisómeros, tautómeros y similares. Además, puede estar presente un polimorfismo cristalino para los compuestos representados por la fórmula. Se observa que cualquier forma cristalina, mezcla de formas cristalinas o anhídrido o hidrato de las mismas está incluida en el alcance de la presente invención.

Todos los porcentajes utilizados en el presente documento, a menos que se indique lo contrario, son en volumen.

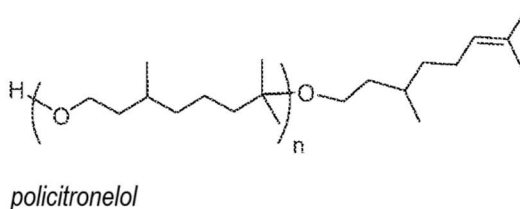
Todas las relaciones utilizadas en el presente documento, a menos que se indique lo contrario, son en molaridad.

Ejemplos

Ejemplo 1: Síntesis de policitronelol



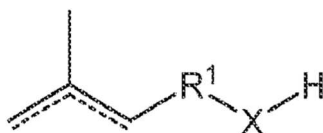
- 5 Se trató citronelol (414 g, 2.65 mol) puro con ácido metanosulfónico (41.4 g) y se dejó en agitación a temperatura ambiente durante cuatro días. La reacción se vigiló por RMN ^1H durante el procedimiento. La reacción se inactivó por adición de una solución de NaOH 1 M (430 ml). Se añadió acetato de etilo (300 ml) para facilitar la separación de fases. A continuación, la fase orgánica se lavó con salmuera (200 ml). Después de separar el acetato de etilo por evaporación a presión reducida, se aplicó destilación al vacío utilizando un sistema de destilación de película fina de recorrido corto para separar todo el citronelol sin reaccionar y los productos químicos de bajo punto de ebullición (85°C, 1.5 mbar). Se obtuvo un total de 144 g de polímero con un peso molecular medio >313 Da.
- 10



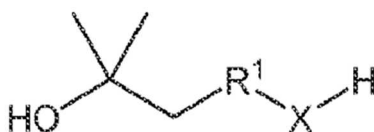
- 15 RMN ^1H (CDCl_3 , 500 MHz) δ 0.87-0.90 (m, 6.25 H, $-\text{CH}_3$), 1.10-1.18 (m, 8.46H, $-\text{CH}_3$, $-\text{CH}_2-$), 1.26-1.46 (m, 10.2H, $-\text{CH}_2-$), 1.53-1.64 (m, 6.53H, $-\text{CH}_2-$, $-\text{CH}_3$), 1.70 (s, 2.31H, $-\text{CH}_3$), 1.93-2.01 (m, 2.26H, $-\text{CH}-$), 2.26-3.35 (m, 2.69H, $-\text{CH}_2\text{O}$), 3.65-3.71 (m, 2.01H, $-\text{CH}_2\text{O}$), 4.65 (s, 0.16H, $=\text{CH}_2$), 4.68 (s, 0.11H, $=\text{CH}_2$), 5.10 (t, $J = 6.5$ Hz, 1H, $=\text{CH}$).

CC(C)=CC(C)CCOC(C)(C)CCCC(C)C(C)OCC(C)(C)C

4. Un método para producir un compuesto de Fórmula I, o una de sus sales, que comprende hacer reaccionar un compuesto de Fórmula II o Fórmula III:



9



10

$$\text{CH}_3\text{C}(\text{CH}_3)=\text{CH}-\text{R}^1-\text{X}-\left(\text{C}(\text{CH}_3)_2-\text{CH}_2-\text{R}^1-\text{X}\right)_n\text{H}$$

9

una etapa de destilación.

6. El método de la reivindicación 6, en donde la etapa de incubación se produce a temperatura ambiente.

7. El método de la reivindicación 5 o 6, en donde la etapa de incubación se produce durante cuatro días.

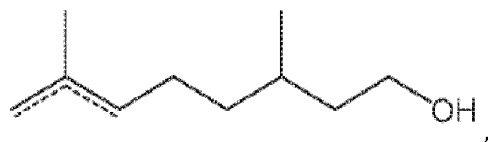
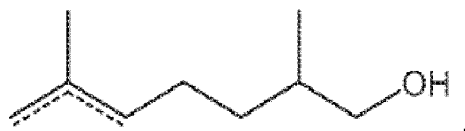
8. El método de una cualquiera de las reivindicaciones 5-7, en donde la etapa de destilación se produce a 85°C.

5 9. El método de una cualquiera de las reivindicaciones 5-8, en donde la etapa de destilación se produce a 1.5 mbar.

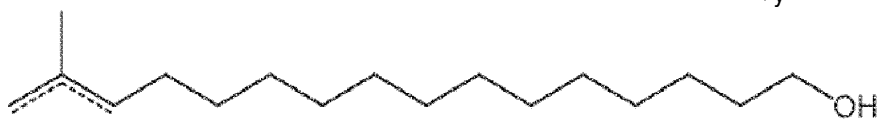
10. El método de una cualquiera de las reivindicaciones 4-9, que comprende además una etapa de amidación, en donde un compuesto de Fórmula I, en donde X es O, reacciona con NH₃ a presión elevada para obtener un compuesto correspondiente de Fórmula I, en donde X es NH.

11. El método de una cualquiera de las reivindicaciones 4-10, en donde el compuesto de Fórmula II se selecciona de:

10



, y



15

12. El método de una cualquiera de las reivindicaciones 4-10, en donde el compuesto de Fórmula II es citronelol.

13. Una composición cosmética o para el cuidado personal que comprende un compuesto según una cualquiera de las reivindicaciones 1 a 4.

