[19]中华人民共和国专利局

[51]Int.Cl^6
C07C 43/196

[12]发明专利说明书

[21] ZL 专利号 91104908.8

[45]授权公告日 1997年3月19日

[11] 授权公告号 CN 1034277C

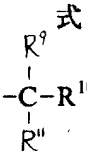
[22]申请日 91.7.18 [24]颁证日 96.12.20
[21]申请号 91104908.8
[30]优先权
[32]90.7.18 [33]JP[31]187853/90
[32]91.4.5 [33]JP[31]72648/91
[73]专利权人 花王株式会社
地址 日本东京都
[72]发明人 越野准次 藤仓芳明 户井直
结城理惠子 宫部创
[74]专利代理机构 中国国际贸易促进委员会专利商标事务所
代理人 徐汝巽
[56]参考文献
EPA0081699
USA4504412
审查员 刘 平

权利要求书 2 页 说明书 25 页 附图页数 0 页

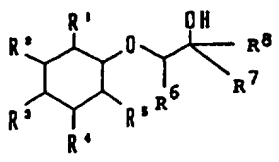
[54]发明名称 α-(烷基环己氧基)-β-链烷醇以及含此种成分的香精

[57]摘要

式（I）的α-（烷基环己氧基）-β-链烷醇，式中R^1、R^2、R^3、R^4和R^5至少有一个是



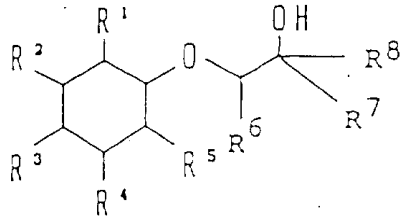
$-\underset{R^{11}}{\overset{R^9}{C}}-R^{10}$基，$R^9$和$R^{10}$具有1—4碳原子的相同或不相同的烷基或互相偶合形成环烷基，R^{11}为一氢原子或1—4碳原子的烷基或当R^9和R^{10}形成环烷基时为氢原子；其余的R^1、R^2、R^3、R^4和R^5为氢原子或甲基；R^6、R^7和R^8为氢原子或1—6碳原子的相同或不相同的烷基。



（1）

权 利 要 求 书

1. 一种香精组合物，其特征是该组合物含以式(*I*)代表的α—(烷基环己氧基)—β—链烷醇和组合物的其它组分；



(*I*)

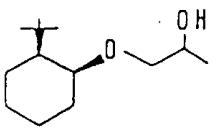
式中 R^1、R^2、R^3、R^4 和 R^5中至少一个是$-\overset{R^9}{\underset{R^{11}}{C}}-R^{10}$，

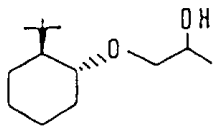
其中的 R^9 和 R^{10}是具有 1—4 个碳原子的相同或不相同的烷基，或互相偶合形成环烷基。R^{11}为氢原子或 1—4 碳原子的烷基或当 R^9 和 R^{10} 形成环烷基时为氢；其余 R^1、R^2、R^3、R^4 和 R^5 为氢原子或甲基，R^6、R^7 和 R^8 为氢原子或有 1—6 个碳原子的相同或不相同的烷基；以式(*I*)代表的化合物在香精中混合的用量依香精的其他组分、所要求调至成最终的香气等而有不同，并且不受限制，只要能给予木香或琥珀香的香气。

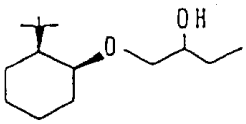
2. 权利要求 1 所述的香精组合物，其特征是其中的$-CR^9R^{10}R^{10}$基是叔丁基、异丙基或环己基。

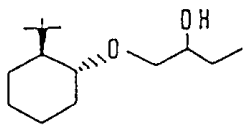
3. 权利要求 1 所述的香精组合物，其特征是其中的α—(烷基

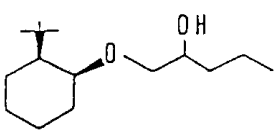
环己氧基)—β—键烷醇是

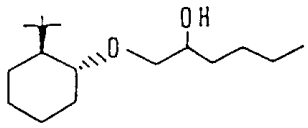
(1) 

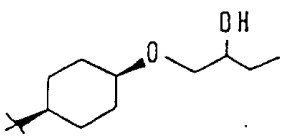
(2) 

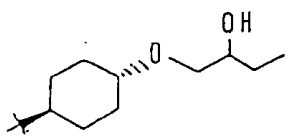
(3) 

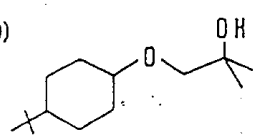
(4) 

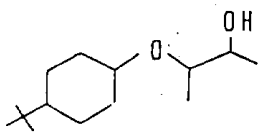
(5) 

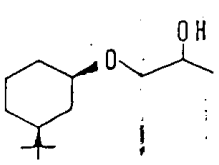
(6) 

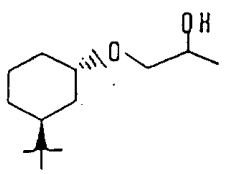
(7) 

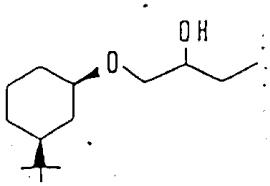
(8) 

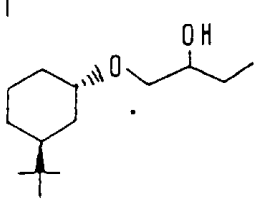
(9) 

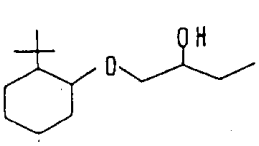
(10) 

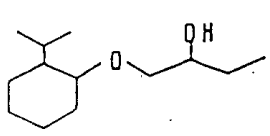
(11) 

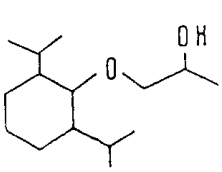
(12) 

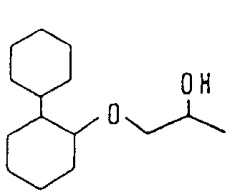
(13) 

(14) 

(15) 

(16) 

(17) 

(18) 

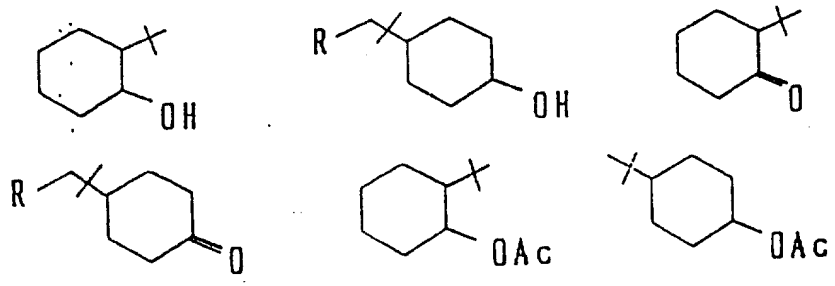
说　　明　　书

α－（烷基环己氧基）－β－链烷醇
以及含此种成分的香精

本发明涉及一种新的赋香化合物，特别涉及一种有木香或琥珀香的具有极好的留香性质的化合物。

具有木香或琥珀香的香料中有留香性质的香料在调香中是用作基香的，也是测定香气时作为调合香料骨架的重要原料。然而，大多数的这类物质（包括天然物质）都是非常昂贵的，它大大地限制了在一般调合香料中的使用。因此，研制有木香或琥珀香味并具有留香性质的廉价物质是十分重要的。

具报导，邻一和对一烷基环己醇、邻一和对一烷基环己酮、邻一和对一烷基环己基乙酸乙酯等从烷基苯酚衍生的并以下式为代表的化合物：



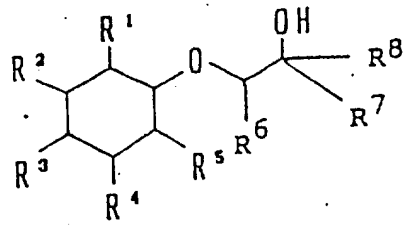
（式中的R为氢原子或甲基）是具有木香香气的并已经广泛地用作廉价的物质，如在下述文献中所公开的：“Perfume and Flavor Chemicals”，S.Arcta

nder，Elizabeth（1969）。

因此，本发明的一个目的是提供具有木香或琥珀香和具有极好的留香性质的化合物。

本发明的另一目的是提供含木香或琥珀香和极好的留香性质的调合香料。

简而言之，本发明的这些目的将在后文中清楚说明，并可用下式的α－（烷基环己氧基）－β－链烷醇达到该目的。



式中R^1、R^2、R^3、R^4和R^5中至少有一个为$-C(R^9)(R^{10})-R^{11}$，

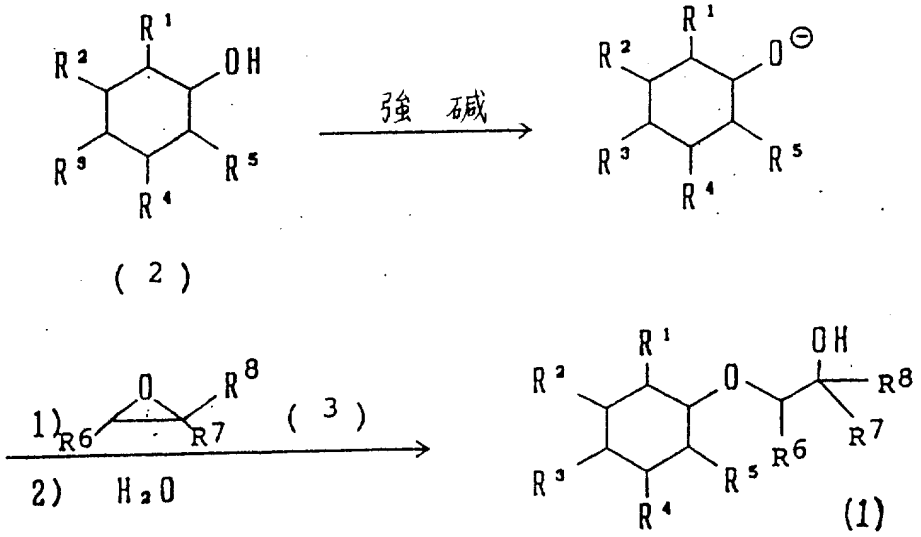
其中的R^9和R^{10}是相同或不相同的1－4碳原子的烷基或互相偶合形成环烷基，R^{11}为氢原子或1－4碳原子的烷基或当R^9和R^{10}形成环烷基时为一氢原子，其余的R^1、R^2、R^3、R^4和R^5为氢原子或甲基；R^6、R^7和R^8为氢原子或是1－6碳原子的相同或不相同的烷基。

本发明的另一方面是提供含上述α－（烷基环己氧基）－β－链烷醇的调合香精。

本发明的发明人致力于研究有木香或琥珀香的化合物，这类化合物有极好留香性质，制备价格较低。业已发现，烷基环己醇或烷基苯酚的环氧化物加成产品的氢化所得到的环氧己烷能满足这一要求。上述式（1）中，甲基、乙基、正丙基、异丙基、正丁基、异丁基、叔丁基、正戊基、正己基等是R^6、R^7和R^8的烷基例。在这些基团中，具有1－4碳原子的烷基是特别优先选择的。

本发明的式（1）化合物可用下述任一反应方案制备之。

（A）在下述方案中，将烷基环己醇（2）在强碱存在下进行处理，生成醇化物，然后将醇化物与一环氧化合物反应制备式（1）产物。



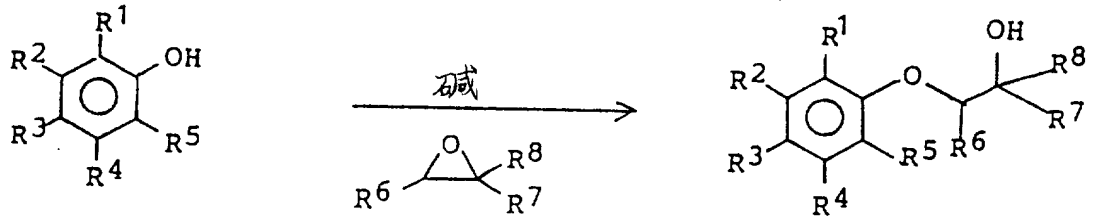
式中R^1至R^8的定义如上。

反应溶剂包括醚溶剂如乙醚、丁醚、四氢呋喃等；烃溶剂如己烷、苯、甲苯、二甲苯等。用于本发明的适合的强碱有碱金属氢化物如氢化钠、氢化钾、氢化锂等，碱金属氨基化合物如氨基化钠、

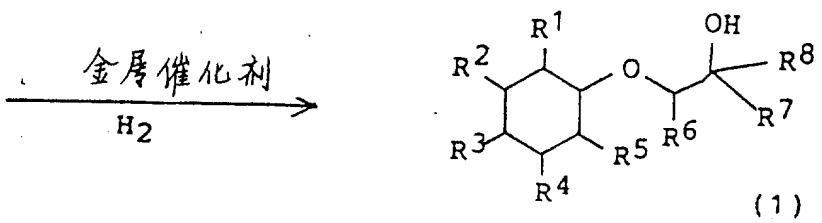
氨基化锂、氨基化钾等，碱金属如钠、锂、钾等，烷基金属化合物如烷基锂、烷基卤化镁等。用于上述反应的强碱的量为每当量烷基环已醇（２）０．１－２．０当量，特别优选１．０－１．２当量。用于上述反应的环氧化合物（３）的优选量为每当量烷基环已醇（２）１．０－５．０当量，特别优选１．０－１．２当量。形成醇化合的反应和环氧化合物加成反应均在３０－１２０℃、优先选择５０－１００℃的温度下进行的。

在此情况下，当作为原料的是烷基环已基（２）的顺、反异构体混合物时，得到的化合物（１）也是顺、反异构体的混合物。此种异构体混合物可用例如柱层析或类似方法进行分离，或者不经分离而使用。

（Ｂ）在另一具体方案中，是将烷基苯酚在一碱催化剂存在下与环氧化合物（３）进行反应形成α－（烷基亚苯氧基）－β－链烷醇（５），将得到的化合物（５）在金属催化剂存在下氢化制备化合物（１）。



(4)　　(3)　　(5)



(1)

式中R^1－R^8的定义如上。

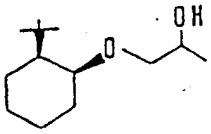
用于上述环氧化合物加成反应的适合溶剂包括醇溶剂如甲醇、乙醇、正丙醇、异丙醇等，醚溶剂如乙醚、丁醚、四氢呋喃等，烃溶剂如己烷、苯、甲苯、二甲苯等。但反应也可在无溶剂下进行。碱催化剂的适合例包括碱金属氢氧化物如氢氧化钠、氢氧化锂、氢氧化钾等，碱金属碳酸盐如碳酸钠、碳酸锂、碳酸钾等。碱的使用形式可以是粉末或溶剂。用于上述反应的碱催化剂的量为每当量烷基苯酚（４）０．０１－２．０当量，特别优先选择０．０５－０．５当量。常用的环氧化合物（３）的量是每当量烷基苯酚(4)１．０－５．０当量，特别优先选择１．０－１．２当量。进行环氧化合物加成反应的温度为30－200 ℃，优先选择50－100 ℃。

用于上述化合物（５）的氢化反应的适合的溶剂包括醇溶剂如甲醇、乙醇、正丙酮、异丙酮等，烃溶剂如己烷、庚烷、环己烷、甲基环己烷等。但无溶剂存在也可进行反应。金属催化剂的适合例子包括钯催化剂、钌催化剂、铑催化剂、铂催化剂、镍催化剂等。金属催化剂在反应中的用量为０．０１－１０ｗｔ％（相对于化合物（５）的量），优先选择０．０５－５ｗｔ％。进行氢化反应的温度为５０－３００℃，优先选择１００－２５０℃。反应的氢压为１－１５０大气压，优先选择１０－１００大气压。

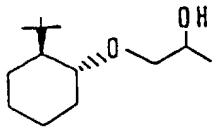
化合物（１）的顺、反式异构体混合物是由化合物（５）氢化形成的。此异构体混合物可用例如柱层析等方法进行分离，也可不经分离而使用。

本发明化合物的具体实施方案包括具有下述结构的化合物：

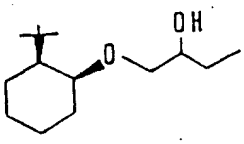
(1)



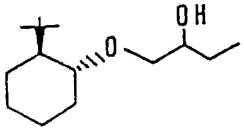
(2)



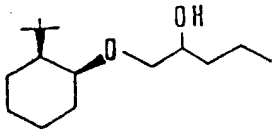
(3)



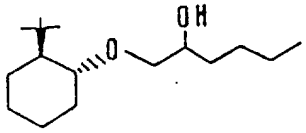
(4)



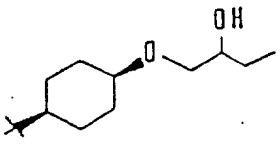
(5)



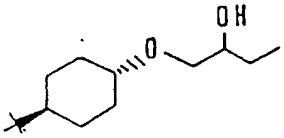
(6)



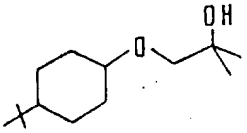
(7)



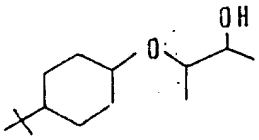
(8)



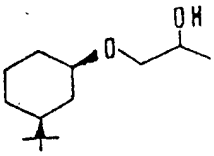
(9)



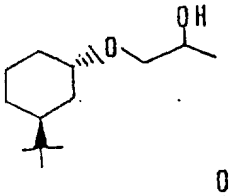
(10)



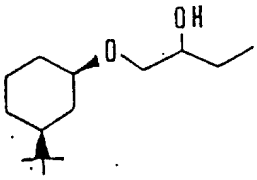
(11)



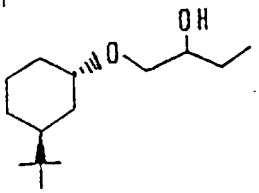
(12)



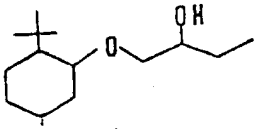
(13)



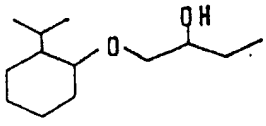
(14)



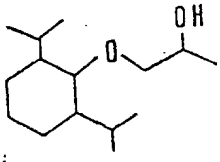
(15)



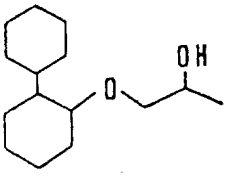
(16)



(17)



(18)



本发明的这些化合物的气味列于下表

化合物号	气　味	留香性质（天数）**
（1）	木香，琥珀，薄荷	3
（2）	木香，琥珀，樟脑	3
（3）	木香，樟脑，干草	7
（4）	木香，樟脑，泥土，琥珀	7
（5）	木香，檀香木	14
（6）	木香	14
（7）	木香，檀香木，玫瑰	7
（8）	木香	7
（9）	木香，琥珀，青香	7
（10）	木香，青香	7
（11）	木香	3
（12）	木香	3
（13）	木香	7
（14）	木香，檀香木	7
（15）	木香，琥珀，泥土	14
（16）	木香，琥珀，香脂	3
（17）	木香，琥珀	14
（18）	木香，苏合香	14

**将化合物置于鉴香纸上，测定气香保留的天数

如上所述，式（１）化合物可用廉价的原料来生产，并且这些有木香或琥珀香气的化合物具有极好的留香性质。因此，将化合物（１）作为基香与其他香料混合在一起，便可得到极好的香精。化合物（１）在香精中混合的用量依香精中其他组分、所要求调至成最终的香气等而有不同，并且不受限制，只要能给予木香或琥珀香的香气，而且本发明的香精可以广泛用作香精、香皂、香波、润丝(ｒｉｎｓｅ)、洗涤剂、化妆品、赋香剂等的赋香组分，可以单独使用或与其他香精结合使用。

在对本发明进行一般性的叙述后，下面将以具体的实施例对本发明作详细说明，其目的仅为说明而无给予限制之意，除非另外指出。

实例１

１－（２－叔丁基环己氧）－２－丙醇的合成：

〔化合物（１）和（２）〕

在装有Ｄｉｍｒｏｔｈ冷凝器和滴液漏斗的３００ｍｌ圆底烧瓶中加入７．５ｇ（０．１９４ｍｏｌ）氢化钠（６２ｗｔ％的矿物油分散型）和３０ｍｌ四氢呋喃并在氮气流中和６０℃下加热。然后向此溶液中滴加３０．０ｇ（０．１９２ｍｏｌ）２－叔丁基环己醇（顺式：反式＝８：２）和３０ｍｌ四氢呋喃，历时约３０

分钟。此混合溶液在回流下搅拌２４小时直至停止产生氢气。将反应混合物冷却至４０℃，在滴加１１．１g（０．１９２mol）１，２－环氧丙烷后，将此溶液在回流下再搅拌４８小时。用3N盐酸中和混合溶液，将有机层与水层分离。蒸馏后得到９．９g２－叔丁基环己烷和２４．２g１－（２－叔丁基环己氧基）－２－丙醇（顺式：反式＝８：２）（b．p．１１２－１１３℃／５mmHg），产率为５９%。用柱层析法将１－（２－叔丁基环己氧基）－２－丙醇互相分离，其展开溶剂为己烷：乙酸乙酯（９５：５），吸附剂为硅藻土６０（Ｍｅｒｃｋ公司商标）

１－（顺－２－叔丁基环己氧基）－２－丙醇：

〔化合物（１）〕

IR (film, cm^{-1}): 905, 966, 1089, 1146, 1195, 1368, 2866, 2938, 3406

NMR (60MHz, $CDCl_3$, ppm): 0.95 (s, 9H), 1.16 (d, J=7Hz, 3H), 1.2-2.0 (m, 8H), 2.1-2.5(m, 2H), 2.8-3.6 (m, 2H), 3.6-4.2 (m, 2H)

GC-MS(M^+): 214

１－（反－２－叔丁基环己氧基）－２－丙醇：

〔化合物（２）〕

IR (film, cm^{-1}): 975, 1095, 1371, 1452, 2866, 2932, 3206

NMR (60MHz, $CDCl_3$, ppm): 0.98 (s, 9H), 1.15 (d, J=7Hz, 3H), 1.1-2.4 (m, 10H), 2.9-4.2 (m, 4H)

GC-MS(M^+): 214

实例2

1－（2－叔丁基环己氧基）－2－丁醇的合成：

〔化合物（3）和（4）〕

合成按实例1的方法进行，但以13.8g（0.192mol）1，2－环氧丁烷代替11.1g（0.192mol）1，2－环氧丙烷，得到12.3g 2－叔丁基环己醇和24.1g 1－（2－叔丁基环己氧基）－2－丁醇（顺式：反式＝8：2）（b.p.122－123℃／5mmHg），产率为55%。然后按实例1的方法将1－（2－叔丁基环己氧基）－2－丁醇的顺、反异构体分开。

1－（顺－2－叔丁基环己氧基）－2－丁醇：

〔化合物（3）〕

IR (film, cm^{-1}): 890, 960, 1089, 1180, 1365, 1464, 2855, 2932, 3424

NMR (60MHz, $CDCl_3$, ppm): 0.93 (s, 9H), 0.97 (t, J=7Hz, 3H), 1.0-2.0 (m, 10H), 2.0-2.4 (m, 2H), 3.0-3.9 (m, 4H)

GC-MS(M^+): 228

1－（反－2－叔丁基环己氧基）－2－丁醇：

〔化合物（4）〕

IR (film, cm^{-1}): 972, 1095, 1368, 1452, 2866, 2932, 3448

NMR (60 MHz, $CDCl_3$, ppm): 0.93 (s and t, J=7Hz, 9H and 3H), 1.0-1.9 (m, 10H), 2.0-2.4 m, 2H), 3.0-3.8 (m, 4H)

GC-MS(M^+): 228

实例3

1－（2－叔丁基环己氧基）－2－丁醇的合成：

〔化合物（3）和（4）〕

（a）在装有Dimroth冷却器和滴液漏斗的300ml圆底烧瓶中加入35g的48wt%氢氧化钠溶液和350g（2.33mol）2－叔丁基苯酚，在氮气流气氛中于80℃下加热。然后在此溶液中滴加176g（2.45mol）1，2－环丁烷，历时约2小时，将此混合溶液于80℃下搅拌5小时。反应混合溶液经冷却后，将下层的氢氧化钠溶液与有机层分离。蒸馏后得到497g1－（2－叔丁基苯氧基）－2－丁醇（b.p. 130℃／4mmHg），产率为96%。

1－（2－叔丁基苯氧基）－2－丁醇：

〔化合物（5a）〕

IR (film, cm^{-1}): 744, 975, 1038, 1092, 1134, 1233, 1290, 1362, 1392, 1443, 1491, 1599, 2956, 3058, 3412

NMR (60 MHz, $CDCl_3$, ppm): 1.07 (t, J=7Hz, 3H), 1.40 (s, 9H), 1.5-1.8 (m, 2H), 2.15 (α, J=4Hz, 1H), 3.8-4.1 (m, 3H), 6.8-7.4 (m, 4H)

GC-MS(M^+): 222

（b）在500ml的高压釜中加入50g（0.23mol）1－（2－叔丁基苯氧基）－2－丁醇、150g异丙醇和1.0g的钯催化剂（载体为含50wt%水的活性炭）（N.E.Chemcat公司生产），将所得的混合物于190℃和70kg／cm 氢压下反应27小时，直至氢的吸收已经停止。反应完毕后，滤出催化剂，蒸馏反应溶液，得到1－（2－叔丁环己氧基）－2－丁醇（顺式：反式＝63：37）38.8g，产率74%。

实例4

1－（2－叔丁基环己氧基）－2－己醇的合成：

〔化合物（5）和（6）〕

合成按实例1的方法进行，但使用19.2g（0.192mol）1，2－环氧己烷代替11.1g（0192mol）1，2－环氧丙烷，得到12.9g 2－叔丁基－2－环己醇（顺式：反式＝8：2）（b.p.116－117℃／1mmHg），产

率54%。

此后按实例1所述方法将1－（2－叔丁基环己氧）－2－己醇的顺、反异构体互相分离。

1－（顺－2－叔丁基环己氧基）－2－己醇：

〔化合物（5）〕

IR (film, cm^{-1}): 890, 960, 1089, 1176, 1365, 1464, 2860, 2932, 3430

NMR (60 MHz, $CDCl_3$, ppm): 0.93 (br.s, 12H), 1.1-2.5 (m, 16H), 2.9-3.6 (m, 2H), 3.6-4.0 (m, 2H)

GC-MS(M^+): 256

1－（反－2－叔丁基环己氧基）－2－己醇：

〔化合物（6）〕

IR (film, cm^{-1}): 970, 1098, 1368, 1452, 2866, 2932, 3466

NMR (60 MHz, $CDCl_3$, ppm): 0.97 (br.s, 12H), 1.1-2.5 (m, 16H), 1.0-1.9 (m, 10H), 2.9-3.6 (m, 2H), 3.6-4.0 (m, 2H)

GC-MS(M^+): 256

实例5

1－（4－叔丁基环己氧基）－2－丁醇的合成：

〔化合物（7）和（8）〕

按实例1所述方法进行合成，但以30g（0.192mol）4－叔丁基环己醇（顺式：反式＝8：2）和13.8g

（0.192mol）1，2－环氧丁烷代替30g（0.192mol）2－叔丁基环已醇（顺式：反式＝8：2）和11.1g（0.192mol）1，2－环氧丙烷，得到9.6g 4－叔丁基环已醇和17.9g 1－（4－叔丁基环已氧基）－2－丁醇（顺式：反式＝8：2）（b.p.130－133℃／5 mmHg），产率41%。然后按实例1所述方法将1－（4－叔丁基环已氧基）－2－丁醇的顺、反异构体互相分离。

1－（顺－2－叔丁基环已氧基）－2－丁醇：

〔化合物（7）〕

IR (film, cm^{-1}): 1032, 1092, 1116, 1182, 1368, 1470, 2872, 2944, 3470

NMR (60MHz, $CDCl_3$, ppm): 0.87 (s, 9H), 0.97 (t, J=7Hz, 3H), 1.0-1.8 (m, 8H), 1.8-2.4 (M, 4H), 3.2-3.9 (m, 4H)

GC-MS(M^+): 228

1－（反－4－叔丁基环已氧基）－2－丁醇：

〔化合物（8）〕

IR (film, cm^{-1}): 1030, 1104, 1368, 1458, 2870, 2938, 3466

NMR (60 MHz, $CDCl_3$, ppm): 0.87 (s, 9H), 0.97 (t, J=7Hz, 3H), 1.0-2.4 (m, 12H), 3.0-3.8 (m, 4H)

GC-MS(M^+): 228

实例6

1－（4－叔丁基环己氧基）－2－甲基－2－丙醇的合成：

〔化合物（9）〕

合成按实例1所述方法进行，但以20.0g（0.128mol）4－叔丁基环己醇（顺式：反式＝8：2）和8.8g（0.128mol）2－甲基－1，2－环氧丙烷代替30.0g（0.192mol）2－叔丁基环己醇（顺式：反式＝8：2）和11.1g（0.192mol）1，2－环氧丙烷，得到6.2g 4－叔丁基环己醇和14.6g 1－（4－叔丁基环己氧基）－2－甲基－2－丙醇（顺式：反式＝4：6），产率50%。

1－（4－叔丁基环己氧基）－2－甲基－2－丙醇

（顺式：反式＝4：6）

〔化合物（9）〕

IR (film, cm^{-1}): 918, 1098, 1368, 1470, 2938, 3448,

NMR (200 MHz, $CDCl_3$, ppm): 0.84 (s, 9H), 1.03 (s, 3.6H), 1.06 (s, 2.4H), 0.8-2.2 (m, 9H), 2.42 (s, 0.6H), 2.55 (s, 0.4H), 3.1-3.3 (m, 1H), 3.19 (s, 0.8H), 3.28 (s, 1.2H)

GC-MS(M^+): 228(顺式), 228（反式）

实例7

2－（4－叔丁基环己氧基）－3－丁醇的合成：

〔化合物（10）〕

合成按实例1的方法进行，但以20.0g（0.128mol）4－叔丁基环己醇（顺式：反式＝4：6）和8.8g（0.128mol）2，3－环氧丁烷代替30.0g（0.192mol）2－叔丁基环己醇（顺式：反式＝8：2）和11.1g（0.192mol）1，2－环氧丙烷，得到11.2g 4－叔丁基环己醇和9.3g 2－（4－叔丁基环己氧基）－3－丁醇（顺、反和苏、赤式异构体混合物），产率32%。

2－（4－叔丁基环己氧基）－3－丁醇：

［化合物（10）］

IR (film, cm^{-1}): 912, 969, 1098, 1158, 1260, 1320, 1368, 1446, 2938, 3424

NMR (200 MHz, $CDCl_3$, ppm): 0.87 (s, 9H), 1.08 (d, J=7Hz, 3H), 1.12 (d, J=7Hz, 3H), 0.9-2.0 (m, 9H), 2.32 (br.d, J=3.5Hz, IH), 3.5-3.7 (m, 1H), 3.7-3.9 (m, 1H)

GC-MS(M^+): 228

实例8

1－（3－叔丁基环己氧基）－2－丙醇的合成：

［化合物（11）和（12）］

合成按实例1所述方法进行，但以30.0g（0.192mol）3－叔丁基环己醇（顺式：反式＝2：8）代替

30.0g（0.192mol）2－叔丁基环己醇（顺式：反式＝8：2），得到10.2g 3－叔丁基环己醇和15.2g 1－（3－叔丁基环己氧基）－2－丙醇（顺式：反式＝2：8）（b.p.135－138℃ 9mmHg），产率37%。然后按实例1所述方法将1－（3－叔丁基环己氧基）－2－丙醇的异构体互相分离。

1－（顺－3－叔丁基环己氧基）－2－丙醇：

〔化合物（11）〕

IR (film, cm^{-1}): 963, 1089, 1368, 1392, 1452, 2938, 3424

NMR (200 MHz, $CDCl_3$, ppm): 0.83 (s, 9H), 1.00 (d, J=7 Hz, 3H), 0.8-2.1 (m, 9H), 2.61 (s, 1H), 3.1-3.2 ((m, 1H), 3.3-3.4 (m, 1H), 3.69 (s, 1H), 3.92 (br.s, 1H)

GC-MS(M^+): 214

1－（反－3－叔丁基环己氧基）－2－丙醇：

〔化合物（12）〕

IR (film, cm^{-1}): 966, 1095, 1368, 1395, 1464, 2938, 3448

NMR (200 MHz, $CDCl_3$, ppm): 0.86 (s, 9H), 1.00 (t, J=7Hz, 3H), 0.8-2.2 (m, 9H), 2.5 (s, 1H), 3.1-3.3 (m, 2H), 3.4-3.6 (m, 1H), 3.91 (br.s, 1H)

GC-MS(M^+): 214

实例9

1－（3－叔丁基环己氧基）－2－丁醇的合成：

〔化合物（13）和（14）〕

合成按实例1的方法进行，但以30.0g（0.192mol）3－叔丁基环己基（顺式：反式＝2：8）和13.8g（0.192mol）1，2－环氧丁烷代替30.0g（0.192mol）2－叔丁基环己醇（顺式：反式＝8：2）和11.1g（0.192mol）1，2－环氧丙烷，得到11.3g 3－叔丁基环己醇和9.3g 1－（3－叔丁基环己氧基）－2－丁醇（顺式：反式＝2：8）（b.p.145－148℃/10mmg），产率为32%。然后按实例1所述方法分离1－（3－叔丁基环己氧基）－2－丁醇顺、反异构体.

1－（顺－3－叔丁基环己氧基）－2－丁醇：

〔化合物（13）〕

IR (film, cm^{-1}): 1095, 1368, 1464, 2938, 3454

NMR (200 MHz, $CDCl_3$, ppm): 0.83 (s, 9H), 0.97 (t, J=7Hz, 3H), 0.8-2.1 (m, 11H), 2.50 (s, 1H), 3.1-3.3 (m, 1H), 3.4-3.5 (m, 1H), 3.69 (br.s, 2H)

GC-MS(M^+): 228

1－（反－3－叔丁基环己氧基）－2－丁醇：

〔化合物（14）〕

IR (film, cm^{-1}): 1095, 1368, 1464, 2938, 3454

NMR (200 MHz, $CDCl_3$, ppm): 0.86 (s, 9H), 0.97 (t, J=7HZ, 3H), 0.8-1.9 (m, 9H), 2.06 (br.s, 2H), 2.42 (s, 1H), 3.1-3.4 (m, 2H), 3.4-3.6 (m, 1H), 3.6-3.8 (m, 1H)

GC-MS(M^+): 228

实例10

1－（2－叔丁基－5－甲基环己氧基）－2－丁醇的合成：

〔化合物（15）〕

（a）按实例3（a）所述方法进行合成，但以382g（2.33mol）2－叔丁基－5－甲基苯酚代替350g（2.33mol）2－叔丁基苯酚，得到522g 1－（2－叔丁基－5－甲基苯氧基）－2－丁醇（b.p.139－140℃／3.5mmHg），产率95%。

1－（2－叔丁基－5－甲基苯氧基）－2－丁醇：

IR (film, cm^{-1}): 808, 1042, 1086, 1144, 1182, 1258, 1294, 1410, 1460, 1502, 1612, 2960, 3404

NMR (200 MHz, $CDCl_3$, ppm): 1.07 (t, J=7Hz, 3H), 1.39 (s, 9H), 1.5-1.8 (m, 2H), 2.14 (d, J=4Hz, 1H), 2.31 (s, 3H), 3.8-4.1 (m, 3H), 6.6-7.3 (m, 3H)

GC-MS(M^+): 236

（b）按实例3（b）所述方法进行合成，但以50g（0.21mmol）1－（2－叔丁基－5－甲基苯氧基）－2－丁醇代替50g（0.21mol）1－（2－叔丁基苯氧基）－2－丁醇并把同一钯催化剂的量增至2.5g进行反应4小时，得到32g1－（2－叔丁基－5－甲基环己氧基）－2－丁醇（b.p.139－140℃／3.5mmHg），产率63%。

1－（2－叔丁基－5－甲基环己氧基）－2－醇：

〔化合物（15）〕

IR (film, cm^{-1}): 1086, 1365, 1461, 2950, 3448

NMR (200 MHz, $CDCl_3$,, ppm): 0.94 (s, 9H), 0.8-2.4 (m, 15H), 2.9-3.8 (m, 4H)

GC-MS(M^+): 242

实例11

1－（2－异丙基环己氧基）－2－丁醇的合成：

〔化合物（16）〕

合成按实例1所述的方法进行，但以20.0g（0.141mol）2－异丙基环己醇（顺式：反式＝6：4）和10.1g（0.141mol）1，2－环氧丁烷代替30.0g（0.192mol）2－叔丁基环己醇（顺式：反式＝8：2）和11.1g（0.192mol）1，2－环氧丙烷，得到6.5g2－异丙基环己醇和16.6g1－（2－异丙基环己氧基）－2－丁醇（顺式：反式＝6：4），产率为55%。

1－（2－异丙基环己氧基）－2－丁醇：

［化合物（16）］

IR (film, cm^{-1}): 963, 981, 1092, 1140, 1200, 1386, 1461, 2926, 3424

NMR (200 MHz, $CDCl_3$, ppm): 0.90 (d, J=7Hz, Ca3H), 0.92 (d, J=7Hz, Ca3H), 0.98 (t, J=7Hz, 3H), 0.8-1.9 (m, 11H), 1.9-2.2 (m, 1H), 2.3-2.6 (m, 1H), 2.9-3.8 (m, 3H)

GC-MS(M^+): 214

实例12

1－（2，6－二异丙基环己氧基）－2－丙醇的合成：

［化合物（17）］

（a）按实例3（a）所述的方法进行合成，但以50.0g（0.28mol）2，6－二异丙基苯酚和22.0g 90.31mol）1，2－环氧丙烷代替350g（2.33mol）2－叔丁基苯酚和176g（2.45mol）1，2--环氧丁烷得到59.5g 1－（2，6－二异丙基苯氧基）－2－丙醇，（b.p.138℃／5mmHg），产率为90%。

1－（2，6－二异丙基苯氧基）－2－丙醇：

IR (film, cm^{-1}): 756, 798, 1020, 1047, 1185, 1254, 1323, 1446, 2866, 2962, 3064, 3406

NMR (200 MHz, $CDCl_3$, ppm): 1.24 (d, J=7Hz, 12H), 1.28 (d, J=7 Hz, 3H), 2.57 (br.s, 1H), 3.31 (scp, J=7 Hz, 2H), 3.5-3.9 (m, 2H), 4.1-4.4 1H), 2.31 (s, 3H), 3.8-4.1 (m, 3H), (m, 1H), 7.11 (s, 3H)

GC-MS(M^+): 236

（b）按实例3（b）所述的方法进行合成，但以30g（0.13mol）1－（2，6－二异丙基苯氧基）－2－丙醇代替50g（0.23mol）1－（2－叔丁基苯氧基）－2－丁醇并将同一钯催化剂的量增至1.5g进行反应5小时，得到21g 1－（2，6－二异丙基环己氧基）－2－丙醇，产率为67%。

1－（2，6－二异丙基环己氧基）－2－丙醇：

〔化合物（17）〕

IR (film, cm^{-1}): 960, 1095, 1158, 1371, 1386, 1470, 2944, 3406

NMR (200 MHz, $CDCl_3$, ppm): 0.8-1.1 (m, 12H), 1.13 (d, J=7Hz, 3H), 1.1-1.9 (m, 10H), 2.53 (d, J=3Hz, 1H), 3.2-4.1 (m, 4H)

GC-MS(M^+): 242

实例13

1－（2－环己基环己氧基）－2－丙醇的合成：

〔化合物（18）〕

合成按实例1所述方法进行，但以34.9g（0.192mol）2－环己基环己醇（顺式：反式＝8：2）代替30.0g（0.192mol）2－叔丁基环己醇（顺式：反式＝8：2），得到10.4g 2－环己基环己醇和24.9g 1－（2－环己基环己氧基）－2－丙醇，产率为54%。

1－（2－环己基环己氧基）－2－丙醇：

〔化合物（18）〕

IR (film, cm^{-1}): 963, 1092, 1143, 1260, 1317, 1338, 1368, 1449, 2848, 2932, 3406

NMR (200 MHz, $CDCl_3$, ppm): 1.16 (d, J=7Hz, 3H), 0.8-2.1 (m, 20H), 2.52 (d, J=2.4Hz, 1H), 2.94 (dd, J=8.7Hz and J=8.7Hz, 1H), 3.57 (dd, J=8.7Hz and J=2.4Hz, 1H), 3.6 3.7 (m, 1H), 3.8-4.0 (m, 1H)

GC-MS(M^+): 240

实例14

素心兰香型香精组成

	重量份
香柠檬油	100
玫瑰基	100
甲基二氢茉莉酮酸酯	100
Lirhal*	100
丁子香酚	20
水杨酸苄酯	50
水杨酸顺一己－3－烯酯	30
γ－甲基紫罗兰酮	50
岩兰草油	20
Sandalmysolcore*	10
广霍香油	100
麝香酮	50
琥珀基	50
乙酰基柏木烯	100
总计	880

* 1：IFF公司商标

4－（4－羟基－4－甲基戊基）－3－环己烯－1－羧乙醛

* 2：Kao Chemicals有限公司商标

2－甲基－4－（2，3，3－三甲基－3－环戊烯－1－基）2－丁烯－1－醇

在上述香精组成880重量份中加入本发明的1－（2－叔丁基环己氧基）－2－丁醇，得到素心兰香型香精，具有甜润和显著的柔和香气，包孕着广霍香油的香韵。

显然，根据以上的说明本发明可以有一系列的改变或变化。所以必须了解，本发明的实践是在本发明所附的权利要求范围内，而不需要加以特别地说明。