

(12) 特許協力条約に基づいて公開された国際出願

(19) 世界知的所有権機関
国際事務局

(43) 国際公開日
2022年12月1日(01.12.2022)



(10) 国際公開番号

WO 2022/249897 A1

(51) 国際特許分類:

A61Q 13/00 (2006.01) A61K 8/34 (2006.01)
A61Q 19/10 (2006.01) A61K 8/49 (2006.01)
C11D 3/50 (2006.01) D06M 13/00 (2006.01)
A61Q 5/02 (2006.01) C11B 9/00 (2006.01)

ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG,
US, UZ, VC, VN, WS, ZA, ZM, ZW.

(21) 国際出願番号: PCT/JP2022/020175

(22) 国際出願日: 2022年5月13日(13.05.2022)

(25) 国際出願の言語: 日本語

(26) 国際公開の言語: 日本語

(30) 優先権データ:
特願 2021-086906 2021年5月24日(24.05.2021) JP

(71) 出願人: 花王株式会社(KAO CORPORATION)
[JP/JP]; 〒1038210 東京都中央区日本橋茅場
町一丁目14番10号 Tokyo (JP).

(84) 指定国(表示のない限り、全ての種類の広域保
護が可能): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS,
MW, MZ, NA, RW, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM,
ZW), ユーラシア (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ,
TM), ヨーロッパ (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ,
DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT,
LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS,
SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM,
GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

添付公開書類:

一 国際調査報告 (条約第21条(3))

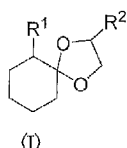
(72) 発明者: 齋藤朱里 (SAITO Akari). 森洋紀
(MORI Hironori). 出口潤 (DEGUCHI Jun). 荒
井翼 (ARAI Tsubasa).

(74) 代理人: 弁理士法人池内アンドパートナーズ
(IKEUCHI & PARTNERS); 〒5306026 大阪
府大阪市北区天満橋1丁目8番30号 O
A Pタワー26階 Osaka (JP).

(81) 指定国(表示のない限り、全ての種類の国内保
護が可能): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ,
BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL,
CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC,
EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR,
HU, ID, IL, IN, IQ, IR, IS, IT, JM, JO, KE, KG, KH,
KN, KP, KR, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY,
MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ,
NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT,
QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL,

(54) Title: PERFUME COMPOSITION

(54) 発明の名称: 香料組成物



(57) Abstract: Provided are: an aromatic agent comprising a compound represented by formula (I); and a perfume com-
position containing the aromatic agent. [In formula (I), R¹ is a C1-5 alkyl group and R² is a hydrogen atom or a C1-4
alkyl group.]

(57) 要約: 式 (I) で表される化合物からなる調香剤および前記調香剤を含む香料組成物を
提供する。[前記式 (I) 中、R¹は、炭素数1以上5以下のアルキル基であり、R²は、
水素原子または炭素数1以上4以下のアルキル基である。]



WO 2022/249897 A1

明 細 書

発明の名称：香料組成物

技術分野

[0001] 本発明は、香料組成物に関する。

背景技術

[0002] α - (2 - アルキルシクロヘキシルオキシ) - β - アルカノール、なかでも 1 - (2 - *t* - ブチルシクロヘキシルオキシ) - 2 - アルカノールは、木様、アンバー様の香気を有し、残香性に優れ、かつ安価に製造できる有用な香料素材である（特開 2013 - 151482 号）。

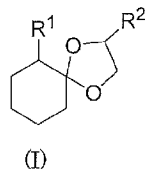
[0003] 例えば、1 - (2 - *t* - ブチルシクロヘキシルオキシ) - 2 - ブタノールは、ウッディー・アンバー様の香調（爽やかな檜様の香り）と高い残香性を有する香料、アンバーコアとして広く知られている。

[0004] アンバーコアを製造する際、微量ではあるが様々な副生成物が得られる。そのような副生成物の幾つかは、アンバーコアと構造が非常に類似していることから精製により除去することが困難である。また、そのような副生成物の幾つかは、アンバーコアの香気に悪影響を及ぼすことが知られている。

発明の概要

[0005] 本発明は、式（I）で表される化合物からなる調香剤である。

[0006] [化1]



[0007] 前記式（I）中、

R¹は、炭素数 1 以上 5 以下のアルキル基であり、

R²は、水素原子または炭素数 1 以上 4 以下のアルキル基である。

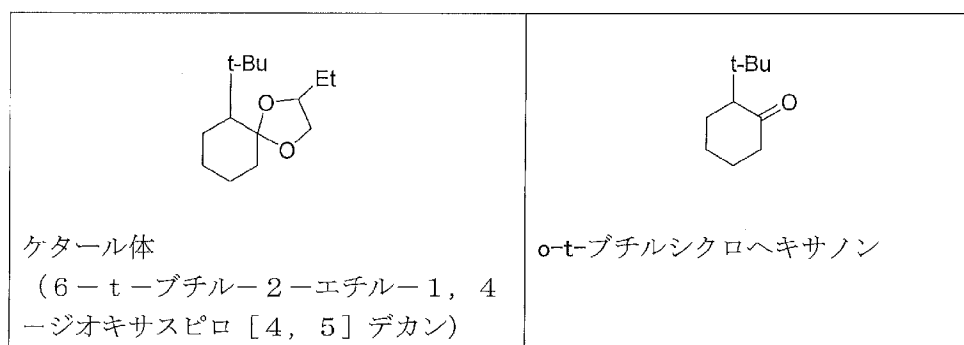
発明の詳細な説明

[0008] 本発明は、従来、アンバーコア製造技術を検討することにより、新たな調

香剤及び新たな香料組成物を提供することを目的とする。

[0009] 本発明者らは、アンバーコア製造において発生する低沸点の *o*-*t*-ブチルシクロヘキサノンが異臭成分であることを見出した。一方で、ある種のケタール体が、単独で、フルーティ（りんご様）、ハーバル、ミンティー様の好ましい香りを有することを新たに見出した。また、特定の濃度の前記ケタール体と、アンバーコアとを含む組成物に、アンバーコアに対して蜜様の甘さと香りのボリュームが付与されるという好ましい効果を見出した。このような知見に基づき、本発明の調香剤及び香料組成物を完成した。

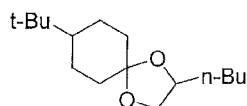
[0010] [化2]



[0011] なお、ケタール構造を有する類似化合物として、以下の化合物が知られている。これらの化合物の香りに関する記載は、以下のとおりである。

[0012] 特開昭56-79686号には、以下のケタール化合物が開示されている。この化合物は、薬草様、果様、刺激の強い香りが報告されている。しかしながら、薬草様で刺激性の強い、ケミカルな香りの印象は、調合香料を作る際に汎用性が低いという問題がある。

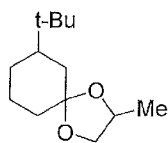
[0013] [化3]



[0014] 特開平6-305999号には、以下のケタール化合物が開示されている。この化合物には、果実様、グリーン、ウッディ、花香調、アニス様、芳香性、しょうのう様、たばこ様の香りが報告されている。しかしながら、アニス様、しょうのう様、たばこ様の香りの印象は、調合香料を作る際に汎用性

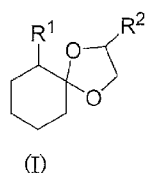
が低いという問題がある。

[0015] [化4]



[0016] すなわち、本発明は、式（Ⅰ）で表される化合物からなる調香剤である。

[0017] [化5]



[0018] 前記式（Ⅰ）中、

R¹は、炭素数 1 以上 5 以下のアルキル基であり、

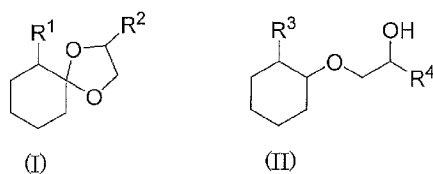
R²は、水素原子または炭素数 1 以上 4 以下のアルキル基である。

[0019] また、本発明は、式（ⅠⅠ）で表される化合物及び式（Ⅰ）で表される化合物を含む香料組成物であって、

前記式（ⅠⅠ）で表される化合物と前記式（Ⅰ）で表される化合物の質量比

[式（ⅠⅠ）で表される化合物：式（Ⅰ）で表される化合物] が、99.99：0.01 以上 98：2 以下である香料組成物である。

[0020] [化6]



[0021] 前記式（Ⅰ）および式（ⅠⅠ）中、

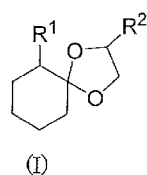
R¹およびR³は、それぞれ独立して、炭素数 1 以上 5 以下のアルキル基であり、

R²およびR⁴は、それぞれ独立して、水素原子または炭素数 1 以上 4 以下のアルキル基である。

[0022] 本発明の式（Ⅰ）で表される化合物からなる調香剤および前記調香剤を含む香料組成物は、フルーティ（りんご様）、ハーバル、ミンティー様の好ましい香りを有する。また、本発明の式（ⅠⅠ）で表される化合物及び式（Ⅰ）で表される化合物を含む香料組成物は、アンバーコアに対して蜜様の甘さと香りのボリュームが付与されるという好ましい効果を有する。

[0023] 本発明は、前記のように、式（Ⅰ）で表される化合物からなる調香剤である。

[0024] [化7]



[0025] 前記式（Ⅰ）中、

R¹は、炭素数1以上5以下のアルキル基であり、

R²は、水素原子または炭素数1以上4以下のアルキル基である。

[0026] 好ましくは、前記式（Ⅰ）中、

R¹は、炭素数1以上4以下のアルキル基であり、

R²は、メチル基、またはエチル基である。

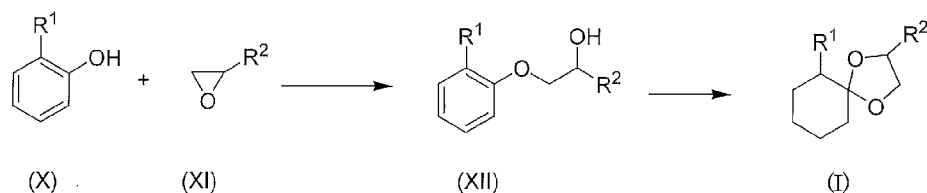
[0027] より好ましくは、前記式（Ⅰ）中、

R¹は、*tert*-ブチル基であり、

R²は、エチル基である。

[0028] 前記式（Ⅰ）で表される化合物は、例えば、以下の方法により製造することができる。

[0029] [化8]



[0030] 前記式（Ⅰ）、式（ⅠⅠ）、式（ⅠⅠⅠ）、式（Ⅰ）中、

R¹は、炭素数 1 以上 5 以下のアルキル基であり、

R²は、水素原子または炭素数 1 以上 4 以下のアルキル基である。

[0031] 式 (X) の化合物と式 (X I) の化合物とを塩基（例えば水酸化ナトリウム）条件下で加熱し、式 (X I I) の化合物を得る。式 (X I I) の化合物に、特定の触媒（例えばパラジウム含有触媒）を用いて水素存在下に水素添加させ、式 (I) の化合物を得ることができる。得られた式 (I) の化合物を蒸留やカラムクロマトグラフィーにより分離し、精製することができる。

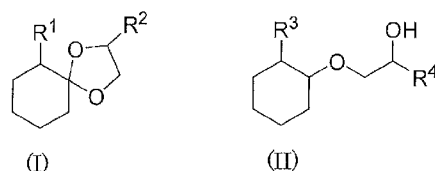
[0032] または、前記式 (I) で表される化合物は、従来公知の方法、例えば特開 2013-151482 号に記載の方法と同様の条件を用いて製造することが可能である。

[0033] また、本発明は、式 (I I) で表される化合物及び式 (I) で表される化合物を含む香料組成物であって、

前記式 (I I) で表される化合物と前記式 (I) で表される化合物の質量比

[式 (I I) で表される化合物：式 (I) で表される化合物] が、99.99 : 0.01 以上 98 : 2 以下である香料組成物である。即ち、式 (I) で表される化合物と式 (I I) で表される化合物の質量比（式 (I) で表される化合物／式 (I I) で表される化合物）が 0.01 / 99.99 以上 2 / 98 以下である。

[0034] [化9]



[0035] 前記式 (I) および式 (I I) 中、

R¹およびR³は、それぞれ独立して、炭素数 1 以上 5 以下のアルキル基であり、

R²およびR⁴は、それぞれ独立して、水素原子または炭素数 1 以上 4 以下のアルキル基である。

[0036] 前記式 (I I) で表される化合物及び式 (I) で表される化合物を含む

香料組成物において、前記式(11)で表される化合物と前記式(1)で表される化合物の質量比〔式(11)で表される化合物：式(1)で表される化合物〕は、式(11)で表される化合物に対して蜜様の甘さと香りのボリュームが付与する観点から、好ましくは99.97：0.03以上であり、より好ましくは99.95：0.05以上であり、式(11)で表される化合物のアンバー様の香りを付与する観点から、好ましくは99：1以下、より好ましくは99.20：0.80以下であり、更に好ましくは99.50：0.50以下である。前記式(11)で表される化合物及び式(1)で表される化合物を含む香料組成物において、前記式(11)で表される化合物と前記式(1)で表される化合物の質量比〔式(11)で表される化合物：式(1)で表される化合物〕は、式(11)で表される化合物に対して蜜様の甘さと香りのボリュームが付与する観点から、好ましくは99.99：0.01以上99：1以下であり、より好ましくは99.97：0.03以上99.20：0.80以下であり、更に好ましくは99.95：0.05以上99.50：0.50以下である。

[0037] 即ち、式(1)で表される化合物と式(11)で表される化合物の質量比（式(1)で表される化合物／式(11)で表される化合物）は、式(11)で表される化合物に対して蜜様の甘さと香りのボリュームが付与する観点から、好ましくは0.01／99.99以上1／99以下、より好ましくは0.03／99.97以上0.80／99.2以下、更に好ましくは0.05／99.95以上0.50／99.50以下である。

[0038] 前記式(11)で表される化合物及び式(1)で表される化合物を含む香料組成物において、好ましくは前記式(1)中、
R¹は、炭素数1以上4以下のアルキル基であり、
R²は、メチル基、またはエチル基である。

[0039] より好ましくは、前記式(1)中、
R¹は、tert-ブチル基であり、
R²は、エチル基である。

[0040] 前記式 (I) で表される化合物及び式 (I) で表される化合物を含む香料組成物において、好ましくは前記式 (I) 中、

R^3 は、炭素数 1 以上 4 以下のアルキル基であり、

R^4 は、メチル基、またはエチル基である。

[0041] より好ましくは、前記式 (I) 中、

R^3 は、tert-ブチル基であり、

R^4 は、エチル基である。

[0042] 前記式 (I) で表される化合物及び式 (I) で表される化合物を含む香料組成物において、好ましくは前記式 (I) 中、

R^1 は、炭素数 1 以上 4 以下のアルキル基であり、

R^2 は、メチル基、またはエチル基であり、

前記式 (I) 中、

R^3 は、炭素数 1 以上 4 以下のアルキル基であり、

R^4 は、メチル基、またはエチル基である。

[0043] より好ましくは、前記式 (I) 中、

R^1 は、tert-ブチル基であり、

R^2 は、エチル基であり、

前記式 (I) 中、

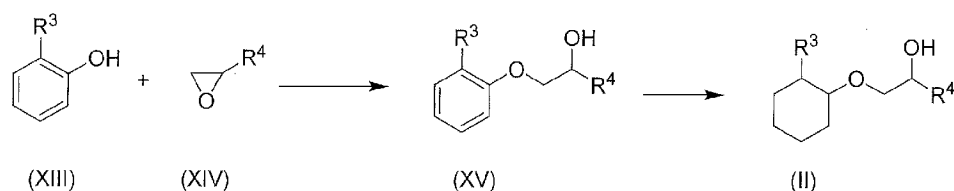
R^3 は、tert-ブチル基であり、

R^4 は、エチル基である。

[0044] 前記式 (I) で表される化合物は、従来公知の方法、例えば特開平 4-217937 号に記載の方法により製造することができる。

[0045] または、前記式 (I) で表される化合物は、例えば、以下の方法により製造することができる。

[0046] [化10]

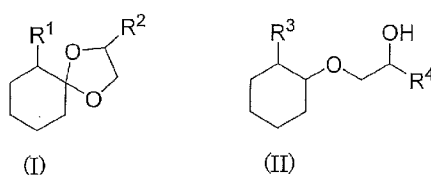


- [0047] 前記式 (X I I I)、式 (X I V)、式 (X V) および式 (I I) 中、
R³は、炭素数 1 以上 5 以下のアルキル基であり、
R⁴は、水素原子または炭素数 1 以上 4 以下のアルキル基である。
- [0048] 式 (X I I I) の化合物と式 (X I V) の化合物とを塩基（例えば水酸化ナトリウム）存在条件下で加熱し、式 (X V) の化合物を得ることができる。式 (X V) の化合物に、触媒（例えばパラジウム触媒）と水素存在下に水素添加させ、式 (I I) の化合物を得ることができる。
- [0049] 式 (I) で表される化合物からなる本発明の調香剤は、フルーティ（りんご様）、ハーバル、ミンティー様の好ましい香りを有するため、他の様々な香料との調和性に優れ、調合することで特徴的な香りの効果を創出することが可能である。また、本発明の式 (I) で表される化合物からなる調香剤は、前記式 (I) で表される化合物以外の香料として、通常用いられる他の香料成分や、所望組成の調合香料を組み合わせることができる。すなわち、本発明の式 (I) で表される化合物からなる調香剤と、前記式 (I) で表される化合物以外の香料とを含有する香料組成物が好ましく、本発明の式 (I) で表される化合物からなる調香剤と、前記式 (I) で表される化合物及び式 (I I) で表される化合物以外の香料とを含有する香料組成物も好ましい。前記式 (I) で表される化合物以外の香料を組み合わせることにより、例えば、フルーティ（りんご様）、ハーバル、ミンティー様の好ましい香りを本発明の香料組成物に付与することができる。
- [0050] また、式 (I) で表される化合物および式 (I I) で表される化合物を含む本発明の香料組成物は、式 (I I) で表される化合物に対して蜜様の甘さと香りのボリュームが付与される。式 (I) で表される化合物および式 (I I) で表される化合物を含む本発明の香料組成物は、前記式 (I) で表される化合物および式 (I I) で表される化合物以外の香料として、通常用いられる他の香料成分や、所望組成の調合香料を組み合わせることができる。前記式 (I) で表される化合物および式 (I I) で表される化合物以外の香料を組み合わせることにより、例えば、式 (I I) で表される化合物の香りお

よび蜜様の甘さと香りのボリュームを本発明の香料組成物に付与することができる。すなわち、本発明の式（Ⅰ）で表される化合物および式（ⅠⅠ）で表される化合物を含む香料組成物は、前記式（Ⅰ）で表される化合物および式（ⅠⅠ）で表される化合物以外の香料を更に含有する組成物であるのが好ましい。

[0051] 式（Ⅰ）で表される化合物からなる本発明の調香剤と組み合わせて用いることができる前記他の香料としては、アルコール、炭化水素、フェノール、エステル、カーボネート、アルデヒド、ケトン、アセタール、エーテル、カルボン、ラクトン、ニトリル、アミン、シッフ塩基、天然精油や天然抽出物等（ただし式（Ⅰ）で表される化合物を除く）の香料成分が挙げられる。すなわち、本発明は、式（Ⅰ）で表される化合物及び式（ⅠⅠ）で表される化合物以外であって、アルコール、フェノール、エステル、カーボネート、アルデヒド、ケトン、アセタール、エーテル、ラクトン、ニトリル、アミン、天然精油および天然抽出物のうち１種以上と、本発明の調香剤とを含む香料組成物である。

[0052] [化11]



[0053] 前記式（Ⅰ）および式（ⅠⅠ）中、

R¹およびR³は、それぞれ独立して、炭素数１以上５以下のアルキル基であり、
 R²およびR⁴は、それぞれ独立して、水素原子または炭素数１以上４以下のアルキル基である。

[0054] 式（Ⅰ）で表される化合物からなる調香剤と式（Ⅰ）で表される化合物及び式（ⅠⅠ）で表される化合物以外の他の香料（以下、単に他の香料という）の質量比（式（Ⅰ）で表される化合物／他の香料）は、調香剤としての機能を発揮する観点から、好ましくは０．０１／９９．９９以上、より好まし

くは0.1/99.9以上、更に好ましくは1/99以上であり、同様の観点から、好ましくは1/2以下、より好ましくは1/3以下、更に好ましくは1/4以下であり、好ましくは0.01/99.99以上1/2以下、より好ましくは0.1/99.9以上1/3以下、更に好ましくは1/99以上1/4以下である。

[0055] また、香料組成物中、式(Ⅰ)で表される化合物からなる調香剤の含有量は、調香剤としての機能を発揮する観点から、好ましくは0.01質量%以上、より好ましくは0.1質量%以上、更に好ましくは0.2質量%以上であり、好ましくは20質量%以下、より好ましくは15質量%以下、更に好ましくは10質量%以下であり、好ましくは0.01質量%以上20質量%以下、より好ましくは0.1質量%以上15質量%以下、更に好ましくは0.2質量%以上10質量%以下である。

[0056] 式(Ⅰ)で表される化合物および式(ⅠⅠ)で表される化合物を含む本発明の香料組成物において、前記式(Ⅰ)で表される化合物および式(ⅠⅠ)で表される化合物と組み合わせて用いることができる他の香料としては、アルコール、炭化水素、フェノール、エステル、カーボネート、アルデヒド、ケトン、アセタール、エーテル、カルボン、ラクトン、ニトリル、アミン、シッフ塩基、天然精油や天然抽出物等（ただし式(Ⅰ)で表される化合物および式(ⅠⅠ)で表される化合物を除く）の香料成分が挙げられる。

[0057] 前記香料組成物において、これらの中でも、アルコール、フェノール、エステル、カーボネート、アルデヒド、ケトン、アセタール、エーテル、ラクトン、ニトリル、アミン、天然精油および天然抽出物が好ましい。

[0058] アルコールとしては、脂肪族アルコール、テルペン系アルコール、芳香族アルコール、その他のアルコール等が挙げられる。これらの中でも脂肪族アルコールが好ましい。

[0059] テルペン系アルコールとしては、リナロール、エチルリナロール、シトロネロール、ヒドロキシシトロネロール、ゲラニオール、テトラヒドロゲラニオール、ネロール、ターピネオール、 α -ターピネオール、ジヒドロミルセ

ノール、ファルネソール、ネロリドール、セドロール、メントール、ボルネオール等が挙げられる。

[0060] 芳香族アルコールとしては、フェニルエチルアルコール、ベンジルアルコール、ジメチルベンジルカルビノール、フェニルエチルジメチルカルビノール、フェニルヘキサノール等が挙げられる。

[0061] 脂肪族アルコールとしては、シス-3-ヘキセノール、1-(2, 2, 6-トリメチルシクロヘキシル)-3-ヘキサノール、サンダルマイソールコア（花王株式会社商品名、2-メチル-4-(2, 2, 3-トリメチル-3-シクロペンテン-1-イル)-2-ブテン-1-オール）、アンバーコア（花王株式会社商品名、1-(2-tert-ブチルシクロヘキシルオキシ)-2-ブタノール）、マグノール（花王株式会社商品名、エチルノルボニルシクロヘキサノールを主成分とする混合物）、ウンデカベルトール（ジボダン社商品名、4-メチル-3-デセン-5-オール）、イソボルニルシクロヘキサノール、テルピローザ（花王株式会社商品名、3, 6-ジメチル-2-ヘプタノール）等が挙げられる。ただし「式（I）で表される化合物および式（II）で表される化合物を含む本発明の香料組成物」についてはアンバーコアは除く。

[0062] その他のアルコールとしては、ジプロピレングリコール等のグリコール、フロローサ（ジボダン社商品名、化学名：4-メチル-2-(2-メチルプロピル)テトラヒドロ-2H-4-ピラノール）、マルトール、エチルマルトール等が挙げられる。

[0063] 炭化水素としては、リモネン、 α -ピネン、 β -ピネン、テルピネン、セドレン、ロンギフォレン、バレンセン等が挙げられる。

[0064] フェノールとしては、グアヤコール、オイゲノール、ジヒドロオイゲノール、イソオイゲノール、チモール、パラクレゾール、バニリン、エチルバニリン等が挙げられる。

[0065] エステルとしては、脂肪族カルボン酸エステル、芳香族カルボン酸エステル、その他のカルボン酸エステルが挙げられる。

- [0066] 脂肪族カルボン酸エステルを形成する脂肪族カルボン酸としては、炭素数 1 ～ 18 の直鎖及び分岐鎖カルボン酸が挙げられるが、中でもギ酸、酢酸、プロピオン酸等の炭素数 1 ～ 6 のカルボン酸、特に酢酸が重要である。芳香族カルボン酸エステルを形成する芳香族カルボン酸としては、安息香酸、アニス酸、フェニル酢酸、桂皮酸、サリチル酸、アントラニル酸等が挙げられる。脂肪族及び芳香族エステルを形成するアルコールとしては、炭素数 1 ～ 5 の直鎖及び分岐鎖脂肪族アルコール及び上記の香料成分アルコールが挙げられる。
- [0067] ギ酸エステルとしては、リナリルホルメート、シトロネリルホルメート、ゲラニルホルメート等が挙げられる。
- [0068] 酢酸エステルとしては、エチルアセテート、イソアミルアセテート（酢酸イソペンチル）、ベンジルアセテート、ヘキシルアセテート、フェニルアセテート、p-クレジルアセテート、シス-3-ヘキセニルアセテート、リナリルアセテート、シトロネリルアセテート、ゲラニルアセテート、ネリルアセテート、テルピニルアセテート、ノピルアセテート、ボルニルアセテート、イソボルニルアセテート、アセチルオイゲノール、アセチルイソオイゲノール、o-tert-ブチルシクロヘキシルアセテート、p-tert-ブチルシクロヘキシルアセテート、トリシクロデセニルアセテート、フェニルエチルアセテート、スチラリルアセテート、シンナミルアセテート、ジメチルベンジルカルビニルアセテート、3-ペンチルテトラヒドロピラン-4-イルアセテート、プレニルアセテート等；フェニル酢酸エステルとしては、フェニルエチルフェニルアセテート、p-クレジルフエニルアセテート等が挙げられる。
- [0069] プロピオン酸エステルとしては、エチルプロピオネート、シトロネリルプロピオネート、トリシクロデセニルプロピオネート、ベンジルプロピオネート、スチラリルプロピオネート、ヘルベトリド（フィルメニッヒ社商品名、2-[1-(3,3-ジメチルシクロヘキシル)エトキシ]-2-メチルプロピル)プロピオネート等が挙げられる。

- [0070] 酪酸エステルとしては、シトロネリルブチレート、ジメチルベンジルカルビニル *n*-ブチレート、イソアミル *n*-ブチレート、*n*-アミル *n*-ブチレート等；イソ酪酸エステルとしては、トリシクロデセニルイソブチレート、フェノキシエチルイソブチレート等が挙げられる。
- [0071] 吉草酸エステルとしては、メチルバレレート、エチルバレレート、ブチルバレレート、アミルバレレート、ベンジルバレレート、フェニルエチルバレレート等；ヘキサン酸エステルとしては、メチルヘキサノエート、エチルヘキサノエート、アリルヘキサノエート、リナリルヘキサノエート、シトロネリルヘキサノエート等が挙げられる。
- [0072] ヘプタン酸エステルとしては、メチルヘプタノエート、アリルヘプタノエート等が挙げられる。
- [0073] ノネン酸エステルとしては、メチル2-ノネノエート、エチル2-ノネノエート、エチル3-ノネノエート等が挙げられる。
- [0074] 安息香酸エステルとしては、メチルベンゾエート、ベンジルベンゾエート、3, 6-ジメチルベンゾエート等が挙げられる。
- [0075] 桂皮酸エステルとしては、メチルシンナメート、ベンジルシンナメート等が挙げられる。
- [0076] サリチル酸エステルとしては、メチルサリシレート、*n*-ヘキシルサリシレート、シス-3-ヘキセニルサリシレート、シクロヘキシルサリシレート、ベンジルサリシレート等が挙げられる。
- [0077] さらに、ブラシル酸エステルとしては、エチレンブラシレート等が挙げられる。
- [0078] チグリン酸エステルとしては、ゲラニルチグレート、1-ヘキシルチグレート、シス-3-ヘキセニルチグレート等が挙げられる。
- [0079] ジャスモン酸エステルとしては、メチルジャスモネート等；ジヒドロジャスモン酸エステルとしては、MDJ（花王株式会社商品名、ジヒドロジャスモン酸メチル、メチル（2-ペンチル-3-オキソシクロペンチル）アセテート）等が挙げられる。

- [0080] グリシド酸エステルとしては、メチル 2, 4-ジヒドロキシーエチルメチルフェニルグリシデート、4-メチルフェニルエチルグリシデート等が挙げられる。
- [0081] アンスラニル酸エステルとしては、メチルアンスラニレート、エチルアンスラニレート、ジメチルアンスラニレート等が挙げられる。
- [0082] グリコール酸エステルとしては、アリルシクロヘキシルグリコレート等が挙げられる。
- [0083] さらにその他のエステルとしては、エチルサフラネート（ジボダン社商品名、ジヒドロシクロゲラン酸エチル）、ポアレネート（花王株式会社商品名、エチルー 2-シクロヘキシルプロピオネート）、フルテート（花王株式会社商品名、エチルトリシクロ [5. 2. 1. 0^{2,6}] デカン-2-カルボキシレート）、エチルアセトアセテート、フルクトン（IFF 社商品名、エチルー (2-メチルー 1, 3-ジオキサラン-2-イル) アセテート）、マンザネート（ジボダン社商品名、エチルー 2-メチルペンタノエート）、エチルー 2-メチルブチレート、アリルシクロヘキシルプロピオネート等が挙げられる。
- [0084] カーボネートとしては、リファローム（IFF 社商品名、シス-3-ヘキセニルメチルカーボネート）、ジャスマシクラット（花王株式会社商品名、メチルーシクロオクチルカーボネート）、フロラマット（花王株式会社商品名、エチルー 2-tert-ブチルシクロヘキシルカーボネート）等が挙げられる。
- [0085] アルデヒドとしては、n-オクタナール、n-ノナナール、n-デカナール、n-ドデカナール、2-メチルウンデカナール、10-ウンデセナール、シトロネラール、シトラール、ヒドロキシシトロネラール、トリプラール（IFF 社商品名、2, 4-ジメチルー 3-シクロヘキセン-1-カルボキシアルデヒド）、シクロベルタール（花王株式会社商品名、ジメチルー 3-シクロヘキセニルー 1-カルボキシアルデヒド）、ベンズアルデヒド、フェニルアセトアルデヒド、フェニルプロピルアルデヒド、シンナミックアルデ

ヒド、ジメチルテトラヒドロベンズアルデヒド、ブルゲオナール（ジボダン社商品名、3-（4-tert-ブチルフェニル）プロパナール）、リラール（IFF社商品名、ヒドロキシマイラックアルデヒド）、ポレナールII（花王株式会社商品名、2-シクロヘキシルプロパナール）、リリアール（ジボダン社商品名、p-tert-ブチル- α -メチルヒドロシナミックアルデヒド）、p-イソプロピル- α -メチルヒドロシナミックアルデヒド、フロラロゾン（IFF社商品名、3-（o-（およびp-）エチルフェニル）-2, 2-ジメチルプロピオンアルデヒド）、 α -アミルシナミックアルデヒド、 α -ヘキシルシナミックアルデヒド、ヘリオトロピン、ヘリオナール（IFF社商品名、アルファ-メチル-1, 3-ベンゾジオキソール-5-プロパナール）、カントキサール（IFF社商品名、2-メチル-3-（パラメトキシフェニル）プロパナール）、アルデヒドC-6（花王株式会社商品名、n-ヘキサナール）等が挙げられる。

[0086] ケトンとしては、メチルヘプテノン、ジメチルオクテノン、3-オクタノン、ヘキシルシクロペントノン、ジヒドロジャスモン、ベルートン（フィルメニッヒ社商品名、2, 2, 5-トリメチル-5-ペンチルシクロペントノン）、ネクタリル（ジボダン社商品名、2-（2-（4-メチル-3-シクロヘキセン-1-イル）プロピル）シクロペントノン）、イオノン、 β -イオノン、メチルイオノン、メチルイオノン-G、 γ -メチルイオノン、ダマスコン、 α -ダマスコン、 β -ダマスコン、 δ -ダマスコン、イソダマスコン（シムライズ社商品名、1-（2, 4, 4-トリメチル-2-シクロヘキシル）-trans-2-ブタノン）、ダマセノン、ダイナスコン（フィルメニッヒ社商品名、1-（5, 5-ジメチル-1-シクロヘキセン-1-イル）-4-ペンテン-1-オン）、イロン、カシュメラン（IFF社商品名、1, 2, 3, 5, 6, 7-ヘキサヒドロ-1, 1, 2, 3, 3-ペンタメチル-4H-インデン-4-オン）、イソ・イー・スーパー（IFF社商品名、1-（1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8-オクタヒドロ-2, 3, 8, 8-テトラメチル-2-ナフタレニル）-エタン-1-オン）、カロン（フ

イルメニッヒ社商品名、7-メチル-3,4-ジヒドロ-2H-ベンゾジオキセピン-3-オン)、カルボン、メントン、アセチルセドレン、イソロンギフォラノン、ヌートカトン、ベンジルアセトン、ラズベリーケトン、ベンゾフェノン、トナリド(PFW社商品名、6-アセチル-1,1,2,4,4,7-ヘキサメチルテトラヒドロナフタレン)、 β -メチルナフチルケトン、エチルマルトール、カンファー、ムスコ、ムセノン(フィルメニッヒ社商品、3-メチル-5-シクロペンタデセン-1-オン)、シベトン、グロバノン(シムライズ社商品名、8-シクロヘキサデセノン)、メチルノニルケトン、cis-ジャスモン、パラアミルシクロヘキサノン(4-ペンチルシクロヘキサノン)等が挙げられる。なかでも他の香料と調合することでフローラルな甘さを強調する観点から、イオノン、ダマセノン、イソ・イー・スーパー、または γ -メチルイオノンが好ましい。

[0087] アセタールとしては、アセトアルデヒドエチルフェニルプロピルアセタール、シトラールジエチルアセタール、フェニルアセトアルデヒドグリセリルアセタール、エチルアセトアセテートエチレングリコールアセタール、ボアザンブレンフォルテ(花王株式会社商品名、エトキシメチルシクロドデシルエーテル)、トロエナン(花王株式会社商品名、5-メチル-5-プロピル-2-(1-メチルブチル)-1,3-ジオキサン)、フロロパール(シムライズ社商品名、2,4,6-トリメチル-4-フェニル-1,3-ジオキサン)、マグノラン(シムライズ社商品名、2,4-ジメチル-4,4a,5,9b-テトラヒドロインデノ[1,2-d][1,3]ジオキサン)等が挙げられる。

[0088] エーテルとしては、セドリルメチルエーテル、エストラゴール、アネトール、 β -ナフチルメチルエーテル、 β -ナフチルエチルエーテル、リモネンオキサイド、ローズオキサイド、ネロールオキサイド、1,8-シネオール、ローズフラン、アンブロキサン(花王株式会社商品名、[3aR-(3a α ,5a β ,9a α ,9b β)]ドデカヒドロ-3a,6,6,9a-テトラメチルナフト[2,1-b]フラン)、ハーバペール(花王株式会社商品

名、3, 3, 5-トリメチルシクロヘキシルエチルエーテル)、ガラクソリド(IFF社商品名、ヘキサメチルヘキサヒドロシクロペンタベンゾピラン)、フェニルアセトアルデヒドジメチルアセタール等が挙げられる。

[0089] カルボン酸としては、安息香酸、フェニル酢酸、桂皮酸、ヒドロ桂皮酸、酪酸、2-ヘキセン酸等が挙げられる。

[0090] ラクトンとしては、アンブレットリド、 γ -デカラクトン、 δ -デカラクトン、 γ -バレロラクトン、 γ -ノナラクトン、 γ -ウンデカラクトン、 δ -ヘキサラクトン、 γ -ジャスモラクトン、ウイスキーラクトン、クマリン、シクロペンタデカノリド、シクロヘキサデカノリド、11-オキサヘキサデカノリド、ブチリデンフタリド、等が挙げられる。

[0091] ニトリルとしては、トリデセン-2-ニトリル、ゲラニルニトリル、シトロネリルニトリル、ドデカンニトリル等が挙げられる。

[0092] アミンとしては、インドール、スカトール、6-メチルキノリン、6-イソプロピルキノリン、イソブチルキノリン等が挙げられる。

[0093] シッフ塩基としては、オーランチオール、リガントラル等が挙げられる。

[0094] 天然精油や天然抽出物としては、オレンジ、レモン、ライム、ベルガモット、バニラ、マンダリン、ペパーミント、スペアミント、ラベンダー、ガルバナム、カモミル、ローズマリー、ユーカリ、セージ、バジル、ローズ、ロックローズ、ゼラニウム、ジャスミン、イランイラン、アニス、クローブ、ジンジャー、ナツメグ、カルダモン、セダー、ヒノキ、ベチバー、パチュリ、ヘイ、レモングラス、ラブダナム、グレープフルーツ、エレミオイル等の天然物のオイル、コンクリート、アブソリュート、レジノイド、オレオレジン、チンキ、浸液、バルサム等が挙げられる。

[0095] これらのその他の香料の含有量は、調合香料の種類、目的とする香気の種類及び香気の強さ等により適宜選択することができるが、本発明の香料組成物を含む組成物中、それぞれ好ましくは0.0001質量%以上、より好ましくは0.001質量%以上、そして、好ましくは99.99質量%以下、

より好ましくは80質量%以下である。また、その他の香料の含有量の合計は、本発明の香料組成物を含む組成物中、好ましくは5質量%以上、より好ましくは50質量%以上、そして、好ましくは99.99質量%以下、より好ましくは99.95質量%以下である。

[0096] 式(1)で表される化合物及び式(11)で表される化合物の合計量と、これらのその他の香料との質量比(合計量/その他の香料の量)は、調香剤としての機能を発揮する観点から、好ましくは0.01/99.99以上、より好ましくは0.1/99.9以上、更に好ましくは1/99以上であり、同様の観点から、好ましくは1/2以下、より好ましくは1/3以下、更に好ましくは1/4以下であり、好ましくは0.01/99.99以上1/2以下、より好ましくは0.1/99.9以上1/3以下、更に好ましくは1/99以上1/4以下である。

[0097] また、香料組成物中、式(1)で表される化合物の含有量は、調香剤としての機能を発揮する観点から、好ましくは0.01質量%以上、より好ましくは0.1質量%以上、更に好ましくは0.2質量%以上であり、好ましくは20質量%以下、より好ましくは15質量%以下、更に好ましくは10質量%以下であり、好ましくは0.01質量%以上20質量%以下、より好ましくは0.1質量%以上15質量%以下、更に好ましくは0.2質量%以上10質量%以下である。

[0098] 本発明の香料組成物は、ベースとして、それ自身は匂いを持たない油剤と組み合わせることができる。このような油剤は、香料成分を均一に混合させ、製品に配合しやすく、適度な強度の香りを賦香しやすくすることができる。前記油剤の例としては、エチレングリコール、プロピレングリコール、ブチレングリコール、ジプロピレングリコール等の多価アルコール、ミリスチン酸イソプロピル、アジピン酸ジブチル、セバシン酸ジエチル等のエステル、流動パラフィン、スクワラン等の炭化水素、ポリオキシエチレンアルキルエーテル、ソルビタン脂肪酸エステル等の界面活性剤等が挙げられる。

[0099] これらのなかでも、全ての香料成分の溶解性の観点から、前記油剤として

は多価アルコールおよびエステルが好ましく、ジプロピレングリコールおよびミリスチン酸イソプロピルがより好ましい。かかる油剤の含有量は、香料組成物中、好ましくは0.01質量%以上、より好ましくは1質量%以上、さらに好ましくは5質量%以上、そして、好ましくは95質量%以下、より好ましくは90質量%以下、さらに好ましくは80質量%以下である。

[0100] 本発明は、本発明の香料組成物を含有する洗浄剤組成物、本発明の香料組成物を含有する化粧料、および本発明の香料組成物を含有する繊維処理組成物も提供する。

[0101] 本発明の洗浄剤組成物としては、身体用洗浄剤組成物、衣料用洗浄剤組成物、硬質表面用洗浄剤組成物が好ましく、身体用洗浄剤組成物、衣料用洗浄剤組成物がより好ましく、衣料用洗浄剤組成物が更に好ましい。

[0102] 身体用洗浄剤組成物の例としては、皮膚用洗浄剤組成物、毛髪用洗浄剤組成物、石鹼組成物が挙げられ、皮膚用洗浄剤組成物が好ましい。

[0103] 硬質表面用洗浄剤組成物の例としては、多用途洗浄剤（All purpose Cleaner）、食器用洗浄剤組成物が挙げられる。

[0104] 本発明の繊維処理組成物としては、柔軟剤組成物が好ましい。

[0105] 本発明の化粧料としては、香水、乳液、化粧水、日焼け止めが好ましく、香水がより好ましい。

[0106] 本発明の洗浄剤組成物には、本発明の香料組成物以外に、陰イオン界面活性剤を含有することが好ましく、更に非イオン界面活性剤、pH調整剤、粘度調整剤、溶媒、油剤、防腐剤、水等を配合することができる。

[0107] 本発明の繊維処理組成物には、本発明の香料組成物以外に、陽イオン界面活性剤を含有することが好ましく、更にpH調整剤、溶媒、油剤、防腐剤、水等を配合することができる。

[0108] 本発明の香水には、本発明の香料組成物以外に、溶媒、水等を配合することができる。

[0109] 式（I）で表される化合物からなる調香剤および前記調香剤を含む本発明の香料組成物は、フルーティ（りんご様）、ハーバル、ミンティー様の好ま

しい香りを有する。さらに、式（Ⅰ）で表される化合物と式（ⅠⅠ）で表される化合物を含む本発明の香料組成物は、アンバーコアに対して蜜様の甘さと香りのボリュームが付与されるという、新たな印象を与えることができる。

[0110] 従って本発明は、本発明の調香剤または本発明の香料組成物（「式（Ⅰ）で表される化合物からなる調香剤を含む本発明の香料組成物」および「式（Ⅰ）で表される化合物と式（ⅠⅠ）で表される化合物を含む本発明の香料組成物」）を賦香成分として使用する方法、具体的には、香料組成物、洗浄剤組成物、化粧料又は繊維処理組成物の賦香成分として使用する方法である。前記洗浄剤組成物としては、身体用洗浄剤組成物、衣料用洗浄剤組成物、硬質表面用洗浄剤組成物が好ましく、身体用洗浄剤組成物、衣料用洗浄剤組成物がより好ましく、衣料用洗浄剤組成物が更に好ましい。前記身体用洗浄剤組成物の例としては、皮膚用洗浄剤組成物、毛髪用洗浄剤組成物、石鹼組成物が挙げられ、皮膚用洗浄剤組成物が好ましい。前記硬質表面用洗浄剤組成物の例としては、多用途洗浄剤（All purpose Cleaner）、食器用洗浄剤組成物が挙げられる。前記化粧料としては、香水が好ましい。前記繊維処理組成物としては、柔軟剤組成物が好ましい。

[0111] 前記使用する方法において、本発明の香料組成物は、洗浄剤組成物、化粧料又は柔軟剤組成物に対して、好ましくは0.0001質量%以上、より好ましくは0.001質量%以上そして、好ましくは30質量%以下、より好ましくは20質量%以下、さらに好ましくは10質量%以下、1質量%以下、より好ましくは0.1質量%以下の量で使用する。この量で使用するにより、香料素材としてこの香料組成物を他の成分と処方すると、シトラス調の香りのトップのスパークリング様の弾けるような印象や、フローラルな香りと共にグリーン、ウッディの様なニュアンスが加わり花屋にいるような天然のフローラル感が付与されるという、新たな印象を付与することができる。

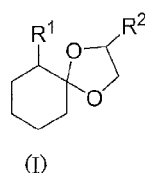
[0112] 前記使用する方法において、本発明の香料組成物は、それ自身は匂いを持

たない油剤と組み合わせてもよい。前記油剤については、前記香料組成物において説明したものと同様である。また、前記使用する方法において、本発明の香料組成物には、その他の香料として、通常用いられる他の香料成分や、所望組成の調合香料を含んでもよい。そのような、その他の香料としては、前記香料組成物において説明したものと同様である。

[0113] 本発明は、以下の態様を含む。

<1> 式(1)で表される化合物からなる調香剤。

[0114] [化12]



[0115] 前記式(1)中、

R¹は、炭素数1以上5以下のアルキル基であり、

R²は、水素原子または炭素数1以上4以下のアルキル基である。

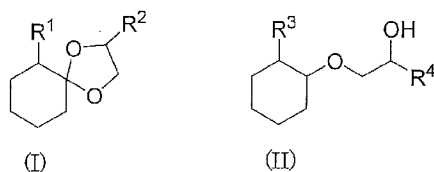
[0116] <2> R¹が、tert-ブチル基であり、

R²が、エチル基である<1>に記載の調香剤。

[0117] <3> 式(1)で表される化合物及び式(11)で表される化合物以外であって、アルコール、フェノール、エステル、カーボネート、アルデヒド、ケトン、アセタール、エーテル、ラクトン、ニトリル、アミン、天然精油および天然抽出物のうち1種以上と、

<1>又は<2>に記載の調香剤とを含む香料組成物。

[0118] [化13]



[0119] 前記式(1)および式(11)中、

R¹およびR³は、それぞれ独立して、炭素数1以上5以下のアルキル基であり

、

R^2 および R^4 は、それぞれ独立して、水素原子または炭素数1以上4以下のアルキル基である。

[0120] <4> 式(1)で表される化合物からなる調香剤と、式(1)及び式(11)で表される化合物以外であって、アルコール、フェノール、エステル、カーボネート、アルデヒド、ケトン、アセタール、エーテル、ラクトン、ニトリル、アミン、天然精油および天然抽出物のうち1種以上(以下、単に他の香料という)の質量比(式(1)で表される化合物量/他の香料の合計量)が、 $0.01/99.99$ 以上 $1/2$ 以下である、<3>に記載の香料組成物。

[0121] <5> 式(1)で表される化合物からなる調香剤と、式(1)及び式(11)で表される化合物以外であって、アルコール、フェノール、エステル、カーボネート、アルデヒド、ケトン、アセタール、エーテル、ラクトン、ニトリル、アミン、天然精油および天然抽出物のうち1種以上(以下、単に他の香料という)の質量比(式(1)で表される化合物量/他の香料の合計量)が、 $0.1/99.9$ 以上 $1/3$ 以下である、<3>又は<4>に記載の香料組成物。

[0122] <6> 式(1)で表される化合物からなる調香剤と、式(1)及び式(11)で表される化合物以外であって、アルコール、フェノール、エステル、カーボネート、アルデヒド、ケトン、アセタール、エーテル、ラクトン、ニトリル、アミン、天然精油および天然抽出物のうち1種以上(以下、単に他の香料という)の質量比(式(1)で表される化合物量/他の香料の合計量)が、 $1/99$ 以上 $1/4$ 以下である、<3>~<5>いずれかに記載の香料組成物。

[0123] <7> 香料組成物中、式(1)で表される化合物からなる調香剤の含有量は、 0.01 質量%以上 20 質量%以下である、<3>~<6>いずれかに記載の香料組成物。

[0124] <8> 香料組成物中、式(1)で表される化合物からなる調香剤の含有

量は、0.1質量%以上15質量%以下である、＜3＞～＜7＞いずれかに記載の香料組成物。

[0125] ＜9＞ 香料組成物中、式（1）で表される化合物からなる調香剤の含有量は0.2質量%以上10質量%以下である、＜3＞～＜8＞いずれかに記載の香料組成物。

[0126] ＜10＞ ＜3＞～＜9＞いずれかに記載の香料組成物を含む化粧料。

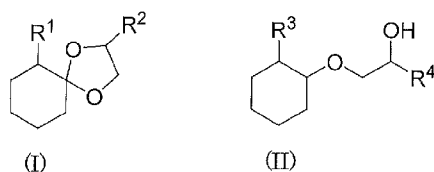
[0127] ＜11＞ ＜3＞～＜9＞いずれかに記載の香料組成物を含む洗浄剤組成物。

[0128] ＜12＞ ＜3＞～＜9＞いずれかに記載の香料組成物を含む繊維処理剤組成物。

[0129] ＜13＞ ＜1＞又は＜2＞に記載の調香剤を賦香成分として使用する方法。

[0130] ＜14＞式（11）で表される化合物及び式（1）で表される化合物を含む香料組成物であって、前記式（11）で表される化合物と前記式（1）で表される化合物の質量比〔式（11）で表される化合物：式（1）で表される化合物〕が、99.99：0.01以上98：2以下である香料組成物。

[0131] [化14]



[0132] 前記式（1）および式（11）中、

R¹およびR³は、それぞれ独立して、炭素数1以上5以下のアルキル基であり、

R²およびR⁴は、それぞれ独立して、水素原子または炭素数1以上4以下のアルキル基である。

[0133] ＜15＞ 前記式（11）で表される化合物と前記式（1）で表される化合物の質量比〔式（11）で表される化合物：式（1）で表される化合物〕が、99.99：0.01以上99：1以下である、＜14＞に記載の香料

組成物。

- [0134] <16> 前記式(11)で表される化合物と前記式(1)で表される化合物の質量比[式(11)で表される化合物：式(1)で表される化合物]が、99.97：0.03以上99.20：0.80以下である、<14>又は<15>に記載の香料組成物。
- [0135] <17> 前記式(11)で表される化合物と前記式(1)で表される化合物の質量比[式(11)で表される化合物：式(1)で表される化合物]が、99.95：0.05以上99.50：0.50以下である、<14>～<16>いずれかに記載の香料組成物。
- [0136] <18> 前記式(11)中、R³が、tert-ブチル基であり、R⁴が、エチル基である、<14>～<17>いずれかに記載の香料組成物。
- [0137] <19> 前記式(1)および式(11)中、R¹およびR³が、tert-ブチル基であり、R²およびR⁴が、エチル基である、<14>～<18>いずれかに記載の香料組成物。
- [0138] <20> 式(1)で表される化合物および式(11)で表される化合物以外であって、アルコール、フェノール、エステル、カーボネート、アルデヒド、ケトン、アセタール、エーテル、ラクトン、ニトリル、アミン、天然精油および天然抽出物のうち1種以上をさらに含む、<14>～<19>いずれかに記載の香料組成物。
- [0139] <21> 式(1)で表される化合物及び式(11)で表される化合物の合計量と、式(1)及び式(11)で表される化合物以外であって、アルコール、フェノール、エステル、カーボネート、アルデヒド、ケトン、アセタール、エーテル、ラクトン、ニトリル、アミン、天然精油および天然抽出物のうち1種以上（以下、単に他の香料という）の質量比（式(1)と式(11)で表される化合物の合計量／他の香料の合計量）が、0.01／99.99以上1／2以下である、<14>～<20>いずれかに記載の香料組成物。
- [0140] <22> 式(1)で表される化合物及び式(11)で表される化合物の

合計量と、式（１）及び式（１１）で表される化合物以外であって、アルコール、フェノール、エステル、カーボネート、アルデヒド、ケトン、アセタール、エーテル、ラクトン、ニトリル、アミン、天然精油および天然抽出物のうち１種以上（以下、単に他の香料という）の質量比（式（１）と式（１１）で表される化合物の合計量／他の香料の合計量）が、 $0.1/99.9$ 以上 $1/3$ 以下である、＜１４＞～＜２１＞いずれかに記載の香料組成物。

[0141] ＜２３＞ 式（１）で表される化合物及び式（１１）で表される化合物の合計量と、式（１）及び式（１１）で表される化合物以外であって、アルコール、フェノール、エステル、カーボネート、アルデヒド、ケトン、アセタール、エーテル、ラクトン、ニトリル、アミン、天然精油および天然抽出物のうち１種以上（以下、単に他の香料という）の質量比（式（１）と式（１１）で表される化合物の合計量／他の香料の合計量）が、 $1/99$ 以上 $1/4$ 以下である、＜１４＞～＜２２＞いずれかに記載の香料組成物。

[0142] ＜２４＞ 香料組成物中、式（１）で表される化合物の含有量は、 0.01 質量％以上 20 質量％以下である、＜１４＞～＜２３＞いずれかに記載の香料組成物。

[0143] ＜２５＞ 香料組成物中、式（１）で表される化合物の含有量は、 0.1 質量％以上 15 質量％以下である、＜１４＞～＜２４＞いずれかに記載の香料組成物。

[0144] ＜２６＞ 香料組成物中、式（１）で表される化合物の含有量は、 0.2 質量％以上 10 質量％以下である、＜１４＞～＜２５＞いずれかに記載の香料組成物。

[0145] ＜２７＞ ＜１４＞～＜２６＞いずれかに記載の香料組成物を含む化粧料。

[0146] ＜２８＞ ＜１４＞～＜２６＞いずれかに記載の香料組成物を含む洗浄剤組成物。

[0147] ＜２９＞ ＜１４＞～＜２６＞いずれかに記載の香料組成物を含む繊維処理剤組成物。

[0148] <30> <14>~<26>いずれかに記載の香料組成物を賦香成分として使用する方法。

[0149] 以下の参考例、実施例、比較例において、「%」は特記しない限り「質量%」である。また、触媒の質量は乾燥状態での質量である。

[0150] <ガスクロマトグラフィーの装置及び分析条件>

GC装置：アジレント・テクノロジー株式会社製7890B、水素炎イオン化型検出器

カラム：収率を分析する場合は、DB-1（キャピラリーカラム、100%ジメチルポリシロキサン、内径0.25mm、長さ30m、膜厚0.25μm、アジレント・テクノロジー株式会社製）を用いた。

[0151] シス体およびトランス体を分析する場合は、DB-WAX（キャピラリーカラム、ポリエチレングリコール、内径0.25mm、長さ30m、膜厚0.25μm、アジレント・テクノロジー株式会社製）を用いた。

[0152] キャリアガス：He、1.5mL/min

注入条件：300℃、スプリット比100/1

打ち込み量：1μL

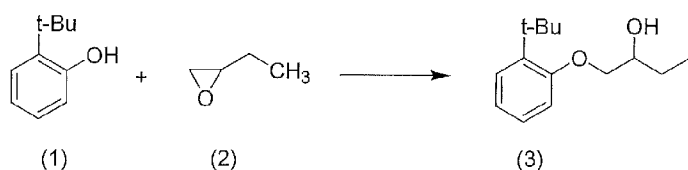
検出条件：FID方式、300℃

カラム温度条件：80℃から出発し、10℃/分の速度で300℃まで昇温した。その後、300℃10分間保持した。

[0153] [参考例1]

1-(2-tert-ブチルフェニルオキシ)-2-ブタノール(3)の製造

[0154] [化15]



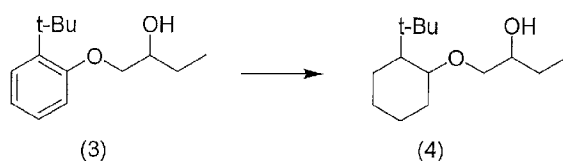
[0155] ジムロートと滴下ロートをつけた1リットル丸底フラスコに、窒素気流下、2-tert-ブチルフェノール(1)（富士フィルム和光純薬工業株式会社製、350g）と48%水酸化ナトリウム水溶液（関東化学株式会社製）35

gを加え、80℃に加熱した。これに1, 2-ブチレンオキシド(2)(東京化成工業株式会社製、176g)を約2時間で滴下し、その後80℃で5時間攪拌した。反応混合物を冷却後、下層の水酸化ナトリウム水溶液を有機層と分離し、前記有機層の蒸留を行い、収率96%で1-(2-t-ブチルフェニオキシ)-2-ブタノール(3)を得た。

[0156] [参考例2]

1-(2-t-ブチルシクロヘキシルオキシ)-2-ブタノール(4)の製造

[0157] [化16]



[0158] 500mlオートクレーブに、参考例1で得られた1-(2-t-ブチルフェニルオキシ)-2-ブタノール(3)(250g)、及び活性炭担持パラジウム触媒(エヌ・イー ケムキャット株式会社製、商品名:Sタイプ、50%含水晶、パラジウム担持量2%、4.75g)、活性炭担持ルテニウム触媒(エヌ・イー ケムキャット株式会社製、50%含水晶、ルテニウム担持量5%、0.25g)を加え、水素圧2.0MPa、190℃で6時間反応を行った。

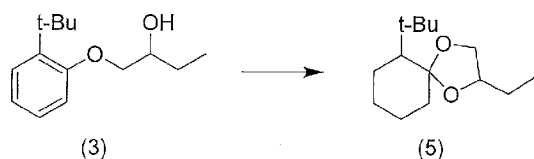
[0159] 反応終了後、触媒を濾過してろ液の蒸留を行うことにより、収率70%で1-(2-t-ブチルシクロヘキシルオキシ)-2-ブタノール(4)を得た。

[0160] [参考例3]

6-t-ブチル-2-エチル-1, 4-ジオキサスピロ[4, 5]デカン(5)の製造

[0161]

[化17]



[0162] 500mlオートクレーブに、参考例1で得られた1-(2-tert-ブチルフェニルオキシ)-2-ブタノール(3)(250g)、及び活性炭担持パラジウム触媒(エヌ・イー ケムキャット株式会社製、商品名:Sタイプ、50%含水晶、パラジウム担持量2%、4.75g)、活性炭担持ルテニウム触媒(エヌ・イー ケムキャット株式会社製、50%含水晶、ルテニウム担持量5%、0.25g)を加え、水素圧2.0MPa、190℃で2時間反応を行った。

[0163] 反応終了後、触媒を濾過して、ろ液の蒸留を行うことにより、収率18%で純度99.6%の6-tert-ブチル-2-エチル-1,4-ジオキサスピロ[4,5]デカン(5)を4つのジアステレオマーの混合物として得た。

[0164] $^1\text{H-NMR}$ (400MHz, CDCl_3): δ (ppm) 0.8-1.1 (m, 12H), 1.1-2.0 (m, 11H), 3.3-3.7 (m, 1H), 3.9-4.2 (m, 2H)

IR (neat): ν (cm^{-1}) 511, 530, 592, 678, 750, 792, 808, 856, 866, 904, 930, 954, 975, 995, 1044, 1083, 1113, 1151, 1195, 1214, 1245, 1257, 1281, 1305, 1335, 1366, 1394, 1445, 1461, 1477, 2865, 2934。

[0165] [実施例1]

参考例3にて得られた6-tert-ブチル-2-エチル-1,4-ジオキサスピロ[4,5]デカン(5)を実施例1の香料組成物として官能評価に用いた(化合物(4)と化合物(5)の質量比=0/100)。

[0166] [実施例2]

参考例2にて得られた1-(2-tert-ブチルシクロヘキシルオキシ)-2

ーブタノール（４）５０ｇに対して、参考例３にて得られた６-ｔ-ブチル-２-エチル-１，４-ジオキサスピロ〔４，５〕デカン（５）５ｍｇを加え、混合して香料組成物を得た（混合物の中の化合物（４）と化合物（５）の質量比＝９９．９９／０．０１）。

[0167] [実施例３]

参考例２にて得られた１-（２-ｔ-ブチルシクロヘキシルオキシ）-２-ブタノール（４）１０ｇに対して、参考例３にて得られた６-ｔ-ブチル-２-エチル-１，４-ジオキサスピロ〔４，５〕デカン（５）５ｍｇを加え、混合して香料組成物を得た（混合物の中の化合物（４）と化合物（５）の質量比＝９９．９５／０．０５）。

[0168] [実施例４]

参考例２にて得られた１-（２-ｔ-ブチルシクロヘキシルオキシ）-２-ブタノール（４）５ｇに対して、参考例３にて得られた６-ｔ-ブチル-２-エチル-１，４-ジオキサスピロ〔４，５〕デカン（５）５ｍｇを加え、混合して香料組成物を得た（混合物の中の化合物（４）と化合物（５）の質量比＝９９．９０／０．１０）。

[0169] [実施例５]

参考例２にて得られた１-（２-ｔ-ブチルシクロヘキシルオキシ）-２-ブタノール（４）１ｇに対して、参考例３にて得られた６-ｔ-ブチル-２-エチル-１，４-ジオキサスピロ〔４，５〕デカン（５）５ｍｇを加え、混合して香料組成物を得た（混合物の中の化合物（４）と化合物（５）の質量比＝９９．５０／０．５０）。

[0170] [実施例６]

参考例２にて得られた１-（２-ｔ-ブチルシクロヘキシルオキシ）-２-ブタノール（４）１ｇに対して、参考例３にて得られた６-ｔ-ブチル-２-エチル-１，４-ジオキサスピロ〔４，５〕デカン（５）７．５ｍｇを加え、混合して香料組成物を得た（混合物の中の化合物（４）と化合物（５）の質量比＝９９．２６／０．７４）。

[0171] [実施例 7]

参考例 2 にて得られた 1 - (2 - t - ブチルシクロヘキシルオキシ) - 2 - ブタノール (4) 1 g に対して、参考例 3 にて得られた 6 - t - ブチル - 2 - エチル - 1, 4 - ジオキサスピロ [4, 5] デカン (5) 10 mg を加え、混合して香料組成物を得た (混合物の中の化合物 (4) と化合物 (5) の質量比 = 99.01 / 0.99)。

[0172] [比較例 1]

参考例 2 にて得られた 1 - (2 - t - ブチルシクロヘキシルオキシ) - 2 - ブタノール (4) を比較例 1 の香料組成物として官能評価に用いた。(化合物 (4) と化合物 (5) の質量比 = 100 / 0)

[0173] [実施例 8]

参考例 2 にて得られた 1 - (2 - t - ブチルシクロヘキシルオキシ) - 2 - ブタノール (4) 1 g に対して、参考例 3 にて得られた 6 - t - ブチル - 2 - エチル - 1, 4 - ジオキサスピロ [4, 5] デカン (5) 30 mg を加え、混合して香料組成物を得た (混合物の中の化合物 (4) と化合物 (5) の質量比 = 97.09 / 2.91)。

[0174] [実施例 9]

参考例 2 にて得られた 1 - (2 - t - ブチルシクロヘキシルオキシ) - 2 - ブタノール (4) 1 g に対して、参考例 3 にて得られた 6 - t - ブチル - 2 - エチル - 1, 4 - ジオキサスピロ [4, 5] デカン (5) 50 mg を加え、混合して香料組成物を得た (混合物の中の化合物 (4) と化合物 (5) の質量比 = 95.24 / 4.76)。

[0175] [官能評価]

実施例 2 ~ 9 および比較例 1 で得られた香料組成物の匂いを専門パネラー 3 名で評価した。評価は匂い試験紙 (大文字洋紙製、150 mm × 7 mm) を用いて行い、匂い試験紙の先端に異性体比率が異なる実施例 1 ~ 9 および比較例 1 をそれぞれ賦香して、1 時間後に室内にて評価を行った。官能評価は匂いの特性と強度の観点から行った。匂いの特性と強度については 5 段階

で相対評価し、数値が大きいほうが好ましい形で記載した。残香に関しては、香気が何日持続するのかを確認し、持続した日数を表記した。また、官能評価において専門パネラー3名が感じられた香り全体の質や特徴に関しても記述した。得られた結果を表1に示す。

[0176] [実施例1の評価]

実施例1（6-tert-ブチル-2-エチル-1,4-ジオキサスピロ[4,5]デカン単独の組成物）で得られた香料組成物の匂いを評価した結果、フルーツ、リンゴ様、蜜の様な甘さに、わずかにハーバル、ミント様、木様の側面がある、香料として好ましい香気が確認された。ケミカル様の刺激やたばこ様、レザー様といった香気は感じられず、調合香料に用いる際の汎用性が高いことが確認された。

[0177]

発明の香料組成物は、強いアンバー様、木様、ややカンファー様の香気を維持しつつ、蜜の様な甘さと、香りのボリュームが付与される効果を示した。

[0179] [実施例 10 : 調合例 1]

下記組成のジャスミン香調の調合香料 900 質量部に、参考例 3 にて得られた 6-tert-ブチル-2-エチル-1,4-ジオキサスピロ[4,5]デカン(5)を加えた組成物の官能評価を実施した。官能評価は、実施例 1~9 および比較例 1 を評価したのと同じ方法により行った。得られた結果を表 4 に示す。評価の結果に関しては、効果の度合いを 5 段階で相対評価し、数値が大きいほうが好ましい。

[0180] [表 2]

<ジャスミン調合香料組成>

γ-ウンデカラクトン	10 質量部
アリルヘプタノエート	20 質量部
ベンジルアセテート	100 質量部
ベンジルサリシレート	20 質量部
β-ピネン	40 質量部
シス-3-ヘキセノール	0.2 質量部
ジヒドロジャスモン	3 質量部
エチルリナロール	50 質量部
フルクトン ¹⁾	50 質量部
インドール	0.01 質量部
γ-デカラクトン	3 質量部
リナロール	150 質量部
マンザネート ²⁾	4 質量部
MDJ ³⁾	250 質量部
p-クレジルアセテート	0.01 質量部
スチラリルアセテート	15 質量部
トリプラー ⁴⁾	3 質量部
ジプロピレングリコール	181.78 質量部
合計	900 質量部

1) フルクトン：IFF 社商品名、エチル 2-(2-メチル-1,3-ジオキソラン-2-イル)アセテート

2) マンザネート：ジボダン社商品名、エチル 2-メチルペンタノエート

3) MDJ：花王株式会社商品名、ジヒドロジャスモン酸メチル、メチル(2-ペンチル-3-オキソシクロペンチル)アセテート

4) トリプラー：IFF 社商品名、2,4-ジメチル-3-シクロヘキセン-1-カルボキシアルデヒド

[0181] [表3]

<調合例組成>

	表2の ジャスミン 調合香料	ジプロピ レングリ コール	化合物 (5)	合計
比較例2	900 質量部	100 質量部	—	1000 質量部
実施例10	900 質量部	—	100 質量部	1000 質量部

[0182] [表4]

<官能評価結果>

	フローラル香	香りの評価(専門パネラー3名)
比較例2	3	ジャスミン様の花の香りだが、天然らしさや香り全体のボリュームに乏しい
実施例10	5	ジャスミン様の花の香りで、蜜のような甘さが足され、全体が調和する。また、ホワイトフローラルのトップ～ミドルノートが強調され、天然らしさと香り全体のボリュームが増強する

[0183] 表4に示すように、専門パネラー3名による官能評価の結果、本発明の香料組成物を用いた場合、ジャスミン様の調合香料に対して、蜜のような甘さが足され、天然らしさや香り全体のボリュームが増強することが見出された。

[0184] [実施例11：調合例2]

下記組成の洋ナシ香調の調合香料925質量部に、参考例3にて得られた6-tert-ブチル-2-エチル-1,4-ジオキサスピロ[4,5]デカン(5)を加えた組成物の官能評価を実施した。官能評価は、実施例1～10および比較例1～2を評価したのと同じ方法により行った。得られた結果を表7に示す。評価の結果に関しては、効果の度合いを5段階で相対評価し、数値が大きいほうが好ましい。

[0185]

[表5]

<洋ナシ調合香料組成>

α -ターピネオール	10質量部
カシュメラン ¹⁾	5質量部
シス-3-ヘキセニルアセテート	5質量部
シス-3-ヘキセニルサリシレート	10質量部
ゲラニオール	100質量部
ヘキシルアセテート	100質量部
マルトール	0.1質量部
ポアレネート ²⁾	200質量部
ジプロピレングリコール	494.9質量部
合計	925質量部

1) カシュメラン：IFF社商品名、1, 2, 3, 5, 6, 7-ヘキサヒドロ-1, 1, 2, 3, 3-ペンタメチル-4H-インデン-4-オン

2) ポアレネート：花王株式会社商品名、エチル-2-シクロヘキシルプロピオネート

[0186] [表6]

<調合例組成>

	表5の 洋ナシ 調合香料	ジプロピ レングリ コール	化合物 (5)	合計
比較例3	925 質量部	75 質量部	—	1000 質量部
実施例11	925 質量部	—	75 質量部	1000 質量部

[0187] [表7]

<官能評価結果>

	フルーティー香	香りの評価(専門パネラー3名)
比較例3	3	洋ナシ様のフルーツの香りだが、天然らしさや香り全体のボリュームに乏しい
実施例11	5	洋ナシ様のフルーツの香りで、洋ナシのグリーン香やフルーティー香が強調され、天然らしさと香り全体のボリュームが増強する

[0188] 表 7 に示すように、専門パネラー 3 名による官能評価の結果、本発明の香料組成物を用いた場合、洋ナシ様の調合香料に対して、天然らしさや香り全体のボリュームが増強することが見出された。

[0189] [実施例 12 : 調合例 3]

下記組成のライム香調の調合香料 970 質量部に、参考例 3 にて得られた 6-tert-ブチル-2-エチル-1,4-ジオキサスピロ[4,5]デカン(5)を加えた組成物の官能評価を実施した。官能評価は、実施例 1~11 および比較例 1~3 を評価したのと同じ方法により行った。得られた結果を表 10 に示す。評価の結果に関しては、効果の度合いを 5 段階で相対評価し、数値が大きいほうが好ましい。

[0190] [表 8]

<ライム調合香料組成>

シス-3-ヘキセニルサリシレート	30 質量部
クマリン	0.5 質量部
エチレンブラシレート	100 質量部
ガルバナムオイル	0.1 質量部
ゲラニオール	50 質量部
ゼラニウムレジノイド 10% IPM	1 質量部
ゲラニルアセテート	20 質量部
ヘイアブソリュート	0.2 質量部
ライムテルペン	50 質量部
リモネン	150 質量部
MD J ¹⁾	200 質量部
ターピネオール	20 質量部
ジプロピレングリコール	348.2 質量部
合計	970 質量部

1) MD J : 花王株式会社商品名、ジヒドロジャスモン酸メチル、メチル(2-ペンチル-3-オキシシクロペンチル)アセテート

[0191]

[表9]

<調合例組成>

	表 8 の ライム 調合香料	ジプロピ レングリ コール	化合物 (5)	合計
比較例 4	9 7 0 質量部	3 0 質量部	—	1 0 0 0 質量部
実施例 1 2	9 7 0 質量部	—	3 0 質量部	1 0 0 0 質量部

[0192] [表10]

<官能評価結果>

	シトラス香	香りの評価(専門パネラー 3 名)
比較例 4	3	ライム様のシトラスの香りだが、グリーン香が弱く、バランスや天然らしさに乏しい
実施例 1 2	5	ライム様のシトラスの香りで、ライム様のグリーン香が強調される。全体を調和し、天然らしさを付与する

[0193] 表 1 0 に示すように、専門パネラー 3 名による官能評価の結果、本発明の香料組成物を用いた場合、ライム様の調合香料に対して、ライム様のグリーン香を強調し、全体を調和し、天然らしさを付与することが見出された。

[0194] [実施例 1 3 : 調合例 4]

下記組成のローズ香調の調合香料 9 5 0 質量部に、参考例 3 にて得られた 6-tert-ブチル-2-エチル-1, 4-ジオキサスピロ [4, 5] デカン (5) を加えた組成物の官能評価を実施した。官能評価は、実施例 1 ~ 1 2 および比較例 1 ~ 4 を評価したのと同じ方法により行った。得られた結果を表 1 3 に示す。評価の結果に関しては、効果の度合いを 5 段階で相対評価し、数値が大きいほうが好ましい。

[0195]

[表11]

<ローズ調合香料組成>

アリルヘプタノエート	10質量部
アンブロキサン ¹⁾	1質量部
シトラール	15質量部
ダマセノン	1質量部
オイゲノール	5質量部
ゲラニオール	250質量部
ヒドロキシシトロネロール	50質量部
ヒドロキシシトロネラール	25質量部
γ-デカラクトン	10質量部
リリアール ²⁾	120質量部
リナロール	30質量部
ネロール	30質量部
フェニルエチルアルコール	400質量部
テトラヒドロゲラニオール	3質量部
合計	950質量部

1) アンブロキサン：花王株式会社商品名、[3aR-(3a α , 5a β , 9a α , 9b β)] ドデカヒドロ-3a, 6, 6, 9a-テトラメチルナフト[2, 1-b]フラン

2) リリアール：ジボダン社商品名、p-tert-ブチル- α -メチルヒドロシナミックアルデヒド

[0196] [表12]

<調合例組成>

	表11の ローズ 調合香料	ジプロピ レングリ コール	化合物 (5)	合計
比較例5	950 質量部	50 質量部	—	1000 質量部
実施例13	950 質量部	—	50 質量部	1000 質量部

[0197]

[表13]

<官能評価結果>

	フローラル香	香りの評価(専門パネラー3名)
比較例 5	3	ローズ様の花の香りだが、天然らしさや香り全体のボリュームに乏しい
実施例 1 3	5	ローズ様の花の香りで、甘みが付与され、ローズ調の天然らしさと香り全体のボリュームが増強する

[0198] 表 1 3 に示すように、専門パネラー 3 名による官能評価の結果、本発明の香料組成物を用いた場合、ローズ様の調合香料に対して、甘みを付与し、天然らしさや香り全体のボリュームが増強することが見出された。

[0199] [実施例 1 4 : 調合例 5]

下記組成のライチ香調の調合香料 9 0 0 質量部に、参考例 3 にて得られた 6-tert-ブチル-2-エチル-1,4-ジオキサスピロ[4,5]デカン(5)を加えた組成物の官能評価を実施した。官能評価は、実施例 1 ~ 1 3 および比較例 1 ~ 5 を評価したのと同じ方法により行った。得られた結果を表 1 6 に示す。評価の結果に関しては、効果の度合いを 5 段階で相対評価し、数値が大きいほうが好ましい。

[0200]

[表14]

<ライチ調合香料組成>

シトロネロール	150質量部
ジメチルベンジルカルビニルn-ブチレート	50質量部
ダマセノン	2.4質量部
エチルプロピオネート	30質量部
エチレンブラシレート	50質量部
フロロパール ¹⁾	10質量部
ガラクソリド ²⁾ 70BB	80質量部
ゲラニオール	100質量部
ヘリオトロピン	30質量部
α -ヘキシルシンナミックアルデヒド	70質量部
β -イオノン	30質量部
イソアミルn-ブチレート	20質量部
γ -デカラクトン	2.4質量部
リリアール ³⁾	30質量部
リナロール	30質量部
マグノラン ⁴⁾	30質量部
マルトール	0.2質量部
n-アミルn-ブチレート	10質量部
フェノキシエチルイソブチレート	30質量部
ポアレネート ⁵⁾	70質量部
プレニルアセテート	10質量部
ローズオキサイド	5質量部
トロエナン ⁶⁾	20質量部
ジプロピレングリコール	40質量部
合計	900質量部

1) フロロパール：シムライズ社商品名、2, 4, 6-トリメチル-4-フェニル-1, 3-ジオキサン

2) ガラクソリド：IFF社商品名、ヘキサメチルヘキサヒドロシクロペンタベンゾピラン

3) リリアール：ジボダン社商品名、p-tert-ブチル- α -メチルヒドロシンナミックアルデヒド

3) マグノラン：シムライズ社商品名、2, 4-ジメチル-4, 4a, 5, 9b-テトラヒドロインドノ [1, 2-d] [1, 3] ジオキサン

4) ポアレネート：花王株式会社商品名、エチル-2-シクロヘキシルプロピオネート

5) トロエナン：花王株式会社商品名、5-メチル-5-プロピル-2-(1-メチルブチル)-1, 3-ジオキサン

[表15]

<調合例組成>

	表14の ライチ 調合香料	ジプロピ レングリ コール	化合物 (5)	合計
比較例6	900 質量部	100 質量部	—	1000 質量部
実施例14	900 質量部	—	100 質量部	1000 質量部

[0202] [表16]

<官能評価結果>

	フルーティー香	香りの評価(専門パネラー3名)
比較例6	3	ライチ様のフルーツの香りだが、香り立ちに乏しく、甘さや香り全体のボリュームに乏しい
実施例14	5	ライチ様のフルーツの香りで、ライチ様の香り立ちとグリーン香が強調される。果肉のような甘みが強まり、香りにボリュームが付与される

[0203] 表16に示すように、専門パネラー3名による官能評価の結果、本発明の香料組成物を用いた場合、ライチ様の調合香料に対して、香り立ちを強調し、甘みや香りのボリュームを付与することが見出された。

[0204] [実施例15：調合例6]

下記組成のフゼア香調の調合香料900質量部に、参考例3にて得られた6-tert-ブチル-2-エチル-1,4-ジオキサスピロ[4,5]デカン(5)を加えた組成物の官能評価を実施した。官能評価は、実施例1～14および比較例1～6を評価したのと同じ方法により行った。得られた結果を表19に示す。評価の結果に関しては、効果の度合いを5段階で相対評価し、数値が大きいほうが好ましい。

[0205]

[表17]

<フゼア調合香料組成>

アンブロキサン ¹⁾	10質量部
ベルガモットオイルBGF	15質量部
シス-3-ヘキセニルサリシレート	50質量部
クマリン	1質量部
エチレンブラシレート	60質量部
ゼラニウムオイル	5質量部
ヘリオトロピン	2.5質量部
ヘルベトリド ²⁾	30質量部
ラベンダー MB40/42	5質量部
レモンイタリー BGF	20質量部
リナリルアセテート	30質量部
MDJ ³⁾	200質量部
γ-メチルイオノン	4質量部
ローズマリーアブソリュート	0.2質量部
セージクラリーオイル	20質量部
ジプロピレングリコール	447.3質量部
合計	900質量部

1) アンブロキサン：花王株式会社商品名、[3aR-(3a α , 5a β , 9a α , 9b β)] ドデカヒドロ-3a, 6, 6, 9a-テトラメチルナフト[2, 1-b]フラン

2) ヘルベトリド：フィルメニッヒ社商品名、2-[1-(3, 3-ジメチルシクロヘキシル)エトキシ]-2-メチルプロピル)プロピオネート

3) MDJ：花王株式会社商品名、ジヒドロジャスモン酸メチル、メチル(2-ペンチル-3-オキソシクロペンチル)アセテート

[0206] [表18]

<調合例組成>

	表17の フゼア 調合香料	ジプロピ レングリ コール	化合物 (5)	合計
比較例7	900 質量部	100 質量部	—	1000 質量部
実施例15	900 質量部	—	100 質量部	1000 質量部

[0207]

[表19]

<官能評価結果>

	フゼア香	香りの評価(専門パネラー 3名)
比較例 7	3	フゼア調の香水の香りだが、艶感やパウダリーな印象に乏しく、香り全体のボリュームに乏しい
実施例 1 5	5	フゼア調の香水の香りで、フゼア調の艶感とパウダリーな印象が強調され、香りにボリュームが付与される

[0208] 表 1 9 に示すように、専門パネラー 3 名による官能評価の結果、本発明の香料組成物を用いた場合、フゼア様の調合香料に対して、艶感とパウダリーな印象を強調し、香りのボリュームを付与することが見出された。

[0209] [実施例 1 6 : 調合例 7]

下記組成のグリーンアップル香調の調合香料 7 3 0 質量部に、参考例 2 にて得られた 1 - (2 - t - ブチルシクロヘキシルオキシ) - 2 - ブタノール (4) および、参考例 3 にて得られた 6 - t - ブチル - 2 - エチル - 1 , 4 - ジオキサスピロ [4 , 5] デカン (5) を加えた組成物の官能評価を実施した。官能評価は、実施例 1 ~ 1 5 および比較例 1 ~ 7 を評価したのと同じ方法により行った。得られた結果を表 2 2 に示す。評価の結果に関しては、効果の度合いを 5 段階で相対評価し、数値が大きいほうが好ましい。

[0210] [表20]

<グリーンアップル調合香料組成>

アルデヒド C - 6 ¹⁾	3 0 質量部
ヘキシルアセテート	2 0 0 質量部
エチル 2 - メチルブチレート	1 0 0 質量部
γ - デカラクトン	5 0 質量部
エチルアセトアセテート	1 0 0 質量部
フェニルアセテート	1 0 0 質量部
テルピローザ ²⁾	1 5 0 質量部
合計	7 3 0 質量部

1) アルデヒド C - 6 : 花王株式会社商品名、n - ヘキサナール

2) テルピローザ : 花王株式会社商品名、3 , 6 - ジメチル - 2 - ヘプタノール

[0211] [表21]

<調合例組成>

	表20の グリーン アップル 調合香料	ジプロピ レングリ コール	化合物 (4)	化合物 (5)	合計
比較例8	730 質量部	270 質量部	—	—	1000 質量部
比較例9	730 質量部	—	270 質量部	—	1000 質量部
実施例16	730 質量部	—	268 質量部	2 質量部	1000 質量部

[0212] [表22]

<官能評価結果>

	フルーティー香	香りの評価(専門パネラー3名)
比較例8	3	グリーンアップル様のフルーツの香りだが、爽やかさやフルーツ様の甘さ、ボリュームに乏しい
比較例9	4	グリーンアップル様の爽やかでフルーツ様の甘さが感じられるが、ボリュームに乏しい
実施例16	5	グリーンアップル様の爽やかでフルーツ様の甘さとボリュームが強く感じられる

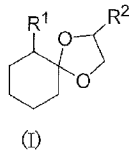
[0213] 表22に示すように、専門パネラー3名による官能評価の結果、本発明の香料組成物を用いた場合、フルーツ様の調合香料に対して、爽やかさ、フルーツ様の甘さが新たに付与され、ボリュームも与えることが見出された。

[0214] 本発明の式(1)の化合物からなる調香剤および前記調香剤を含む香料組成物によれば、フルーティ(りんご様)、ハーバル、ミンティー様の好ましい香りの香料組成物を提供することができる。さらに、式(1)の化合物および式(11)の化合物を含む香料組成物は、アンバーコアに対して蜜様の甘さと香りのボリュームが付与される。

請求の範囲

[請求項1] 式（Ⅰ）で表される化合物からなる調香剤。

[化18]



[前記式（Ⅰ）中、

R¹は、炭素数 1 以上 5 以下のアルキル基であり、

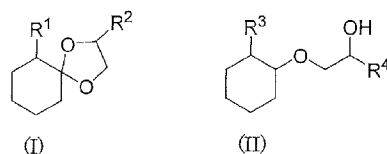
R²は、水素原子または炭素数 1 以上 4 以下のアルキル基である。]

[請求項2] R¹が、tert-ブチル基であり、

R²が、エチル基である請求項 1 に記載の調香剤。

[請求項3] 式（Ⅰ）で表される化合物及び式（ⅠⅠ）で表される化合物以外であって、アルコール、フェノール、エステル、カーボネート、アルデヒド、ケトン、アセタール、エーテル、ラクトン、ニトリル、アミン、天然精油および天然抽出物のうち 1 種以上と、請求項 1 又は 2 に記載の調香剤とを含む香料組成物。

[化19]



[前記式（Ⅰ）および式（ⅠⅠ）中、

R¹およびR³は、それぞれ独立して、炭素数 1 以上 5 以下のアルキル基であり、

R²およびR⁴は、それぞれ独立して、水素原子または炭素数 1 以上 4 以下のアルキル基である。]

[請求項4] 請求項 3 に記載の香料組成物を含む化粧料。

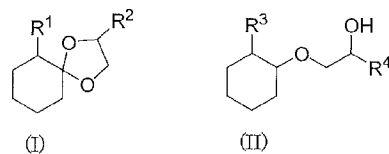
[請求項5] 請求項 3 に記載の香料組成物を含む洗浄剤組成物。

[請求項6] 請求項 3 に記載の香料組成物を含む繊維処理剤組成物。

[請求項7] 請求項1または2に記載の調香剤を賦香成分として使用する方法。

[請求項8] 式(ⅠⅠ)で表される化合物及び式(Ⅰ)で表される化合物を含む香料組成物であって、前記式(ⅠⅠ)で表される化合物と前記式(Ⅰ)で表される化合物の質量比〔式(ⅠⅠ)で表される化合物：式(Ⅰ)で表される化合物〕が、99.99：0.01以上98：2以下である香料組成物。

[化20]



〔前記式(Ⅰ)および式(ⅠⅠ)中、
R¹およびR³は、それぞれ独立して、炭素数1以上5以下のアルキル基であり、

R²およびR⁴は、それぞれ独立して、水素原子または炭素数1以上4以下のアルキル基である。〕

[請求項9] 前記式(ⅠⅠ)で表される化合物と前記式(Ⅰ)で表される化合物の質量比〔式(ⅠⅠ)で表される化合物：式(Ⅰ)で表される化合物〕が、99.97：0.03以上99.20：0.80以下である請求項8に記載の香料組成物。

[請求項10] 前記式(ⅠⅠ)中、R³が、*tert*-ブチル基であり、R⁴が、エチル基である請求項8または9に記載の香料組成物。

[請求項11] 前記式(Ⅰ)および式(ⅠⅠ)中、R¹およびR³が、*tert*-ブチル基であり、R²およびR⁴が、エチル基である請求項8～10のいずれか一項に記載の香料組成物。

[請求項12] 式(Ⅰ)で表される化合物および式(ⅠⅠ)で表される化合物以外であって、アルコール、フェノール、エステル、カーボネート、アルデヒド、ケトン、アセタール、エーテル、ラクトン、ニトリル、アミン、天然精油および天然抽出物のうち1種以上をさらに含む請求項8

～ 1 1 のいずれか一項に記載の香料組成物。

[請求項13] 請求項 8 ～ 1 2 のいずれか一項に記載の香料組成物を含む化粧品。

[請求項14] 請求項 8 ～ 1 2 のいずれか一項に記載の香料組成物を含む洗浄剤組成物。

[請求項15] 請求項 8 ～ 1 2 のいずれか一項に記載の香料組成物を含む繊維処理剤組成物。

[請求項16] 請求項 8 ～ 1 1 のいずれか一項に記載の香料組成物を賦香成分として使用する方法。

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2022/020175

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

A61Q 13/00(2006.01)i; **A61Q 19/10**(2006.01)i; **C11D 3/50**(2006.01)i; **A61Q 5/02**(2006.01)i; **A61K 8/34**(2006.01)i;
A61K 8/49(2006.01)i; **D06M 13/00**(2006.01)i; **C11B 9/00**(2006.01)i

FI: C11B9/00 G; C11B9/00 D; C11D3/50; A61Q19/10; A61Q5/02; A61Q13/00 101; A61K8/49; A61K8/34; D06M13/00

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

A61Q13/00; A61Q19/10; C11D3/50; A61Q5/02; A61K8/34; A61K8/49; D06M13/00; C11B9/00

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Published examined utility model applications of Japan 1922-1996
 Published unexamined utility model applications of Japan 1971-2022
 Registered utility model specifications of Japan 1996-2022
 Published registered utility model applications of Japan 1994-2022

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)

CAplus/REGISTRY (STN)

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	JP 06-263677 A (KAO CORP) 20 September 1994 (1994-09-20) claims, paragraphs [0001], [0019]-[0031], etc.	1-2, 7-11, 16
Y	claims, paragraphs [0001], [0019]-[0031], etc.	3-6, 12-15
Y	JP 04-217937 A (KAO CORP) 07 August 1992 (1992-08-07) claims, paragraphs [0001], [0016]-[0021], [0058]-[0059], etc.	3-6, 12-15
X	KACER, P. et al. The synthetic fragrant compounds based on 2-tert-butylcyclohexanol. Research on Chemical Intermediates. (1998), 24(6), pp. 643-652, DOI: 10.1163/156856798X00537 abstract, p. 647, line 5 to p. 649, line 33, etc.	1, 7
A	abstract, p. 647, line 5 to p. 649, line 33, etc.	2-6, 8-16



Further documents are listed in the continuation of Box C.



See patent family annex.

* Special categories of cited documents:

“A” document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance
 “E” earlier application or patent but published on or after the international filing date
 “L” document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)
 “O” document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means
 “P” document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed

“T” later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention
 “X” document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone
 “Y” document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art
 “&” document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search

07 July 2022

Date of mailing of the international search report

19 July 2022

Name and mailing address of the ISA/JP

**Japan Patent Office (ISA/JP)
 3-4-3 Kasumigaseki, Chiyoda-ku, Tokyo 100-8915
 Japan**

Authorized officer

Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.

PCT/JP2022/020175

Patent document cited in search report			Publication date (day/month/year)	Patent family member(s)	Publication date (day/month/year)
JP	06-263677	A	20 September 1994	US 5446208 A	
				claims, column 1, lines 5-8, column 3, line 39 to column 6, line 31, etc.	
				EP 616994 A2	
JP	04-217937	A	07 August 1992	US 5194423 A	
				claims, column 1, lines 8-12, column 4, line 47 to column 7, line 32, column 13, lines 22-57, etc.	
				EP 467290 A2	
				CN 1058389 A	

A. 発明の属する分野の分類（国際特許分類（IPC）） A61Q 13/00(2006.01)i; A61Q 19/10(2006.01)i; C11D 3/50(2006.01)i; A61Q 5/02(2006.01)i; A61K 8/34(2006.01)i; A61K 8/49(2006.01)i; D06M 13/00(2006.01)i; C11B 9/00(2006.01)i FI: C11B9/00 G; C11B9/00 D; C11D3/50; A61Q19/10; A61Q5/02; A61Q13/00 101; A61K8/49; A61K8/34; D06M13/00																				
B. 調査を行った分野 調査を行った最小限資料（国際特許分類（IPC）） A61Q13/00; A61Q19/10; C11D3/50; A61Q5/02; A61K8/34; A61K8/49; D06M13/00; C11B9/00 最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの <table border="0"> <tr> <td>日本国実用新案公報</td> <td>1922-1996年</td> </tr> <tr> <td>日本国公開実用新案公報</td> <td>1971-2022年</td> </tr> <tr> <td>日本国実用新案登録公報</td> <td>1996-2022年</td> </tr> <tr> <td>日本国登録実用新案公報</td> <td>1994-2022年</td> </tr> </table> 国際調査で利用した電子データベース（データベースの名称、調査に使用した用語） CAplus/REGISTRY (STN)			日本国実用新案公報	1922-1996年	日本国公開実用新案公報	1971-2022年	日本国実用新案登録公報	1996-2022年	日本国登録実用新案公報	1994-2022年										
日本国実用新案公報	1922-1996年																			
日本国公開実用新案公報	1971-2022年																			
日本国実用新案登録公報	1996-2022年																			
日本国登録実用新案公報	1994-2022年																			
C. 関連すると認められる文献 <table border="1"> <thead> <tr> <th>引用文献の カテゴリー*</th> <th>引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示</th> <th>関連する 請求項の番号</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>X</td> <td>JP 06-263677 A（花王株式会社）20.09.1994（1994-09-20） 特許請求の範囲、段落[0001], [0019]-[0031]等</td> <td>1-2, 7-11, 16</td> </tr> <tr> <td>Y</td> <td>特許請求の範囲、段落[0001], [0019]-[0031]等</td> <td>3-6, 12-15</td> </tr> <tr> <td>Y</td> <td>JP 04-217937 A（花王株式会社）07.08.1992（1992-08-07） 特許請求の範囲、段落[0001], [0016]-[0021], [0058]-[0059]等</td> <td>3-6, 12-15</td> </tr> <tr> <td>X</td> <td>KACER, P. et al., The synthetic fragrant compounds based on 2-tert-butylcyclohexanol, Research on Chemical Intermediates, (1998), 24(6), pp.643-652, DOI: 10.1163/156856798X00537 Abstract, 647ページ5行-649ページ33行等</td> <td>1, 7</td> </tr> <tr> <td>A</td> <td>Abstract, 647ページ5行-649ページ33行等</td> <td>2-6, 8-16</td> </tr> </tbody> </table>			引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号	X	JP 06-263677 A（花王株式会社）20.09.1994（1994-09-20） 特許請求の範囲、段落[0001], [0019]-[0031]等	1-2, 7-11, 16	Y	特許請求の範囲、段落[0001], [0019]-[0031]等	3-6, 12-15	Y	JP 04-217937 A（花王株式会社）07.08.1992（1992-08-07） 特許請求の範囲、段落[0001], [0016]-[0021], [0058]-[0059]等	3-6, 12-15	X	KACER, P. et al., The synthetic fragrant compounds based on 2-tert-butylcyclohexanol, Research on Chemical Intermediates, (1998), 24(6), pp.643-652, DOI: 10.1163/156856798X00537 Abstract, 647ページ5行-649ページ33行等	1, 7	A	Abstract, 647ページ5行-649ページ33行等	2-6, 8-16
引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号																		
X	JP 06-263677 A（花王株式会社）20.09.1994（1994-09-20） 特許請求の範囲、段落[0001], [0019]-[0031]等	1-2, 7-11, 16																		
Y	特許請求の範囲、段落[0001], [0019]-[0031]等	3-6, 12-15																		
Y	JP 04-217937 A（花王株式会社）07.08.1992（1992-08-07） 特許請求の範囲、段落[0001], [0016]-[0021], [0058]-[0059]等	3-6, 12-15																		
X	KACER, P. et al., The synthetic fragrant compounds based on 2-tert-butylcyclohexanol, Research on Chemical Intermediates, (1998), 24(6), pp.643-652, DOI: 10.1163/156856798X00537 Abstract, 647ページ5行-649ページ33行等	1, 7																		
A	Abstract, 647ページ5行-649ページ33行等	2-6, 8-16																		
☐ C欄の続きにも文献が列挙されている。 ☒ パテントファミリーに関する別紙を参照。																				
* 引用文献のカテゴリー “A” 特に関連のある文献ではなく、一般的な技術水準を示すもの “E” 国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの “L” 優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献（理由を付す） “O” 口頭による開示、使用、展示等に言及する文献 “P” 国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願の日の後に公表された文献 “T” 国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と抵触するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの “X” 特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの “Y” 特に関連のある文献であって、当該文献と他の1以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの “&” 同一パテントファミリー文献																				
国際調査を完了した日 07.07.2022		国際調査報告の発送日 19.07.2022																		
名称及びあて先 日本国特許庁(ISA/JP) 〒100-8915 日本国 東京都千代田区霞が関三丁目4番3号		権限のある職員（特許庁審査官） 井上 恵理 4V 4767 電話番号 03-3581-1101 内線 3483																		

国際調査報告
パテントファミリーに関する情報

国際出願番号

PCT/JP2022/020175

引用文献			公表日	パテントファミリー文献	公表日
JP	06-263677	A	20.09.1994	US 5446208 A CLAIMS, 第1欄5-8行、第3欄 39行-第6欄31行等 EP 616994 A2	
JP	04-217937	A	07.08.1992	US 5194423 A CLAIMS, 第1欄8-12行、第4 欄47行-第7欄32行、第13欄 22行-57行等 EP 467290 A2 CN 1058389 A	