(19)国家知识产权局

(12)发明专利

(10)授权公告号 CN 109906042 B
(45)授权公告日 2022.07.01

(21)申请号 201780068378.7
(22)申请日 2017.11.01
(65)同一申请的已公布的文献号
申请公布号 CN 109906042 A
(43)申请公布日 2019.06.18
(30)优先权数据
1618587.8 2016.11.04 GB
(85)PCT国际申请进入国家阶段日
2019.05.06
(86)PCT国际申请的申请数据
PCT/GB2017/053287 2017.11.01
(87)PCT国际申请的公布数据
WO2018/083465 EN 2018.05.11

(73)专利权人 尼科创业贸易有限公司
地址 英国伦敦
(72)发明人 K.马西 J.克罗斯
(74)专利代理机构 北京康信知识产权代理有限责任公司 11240
专利代理师 余刚

(51)Int.Cl.
A24B 15/30(2006.01)
A24B 15/167(2020.01)
C11B 9/00(2006.01)

审查员 刘应梅

权利要求书4页 说明书24页

(54)发明名称

可用于模拟烟草香味的组合物

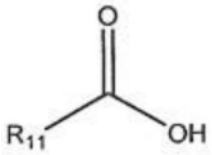
(57)摘要

本发明涉及可用于模拟烟草香味的人工调制组合物。该组合物包含组分A、B、C、D和/或E中的两种或更多种。作为提供可用于模拟烟草香味的人工调制组合物的结果，可以提供与烟草提取物相比更简单的组合物。

CN 109906042 B

1.人工调制组合物,其包含来自组分A、B、C和D中每一种的至少一种化合物,其中:

A是至少一种式I的化合物

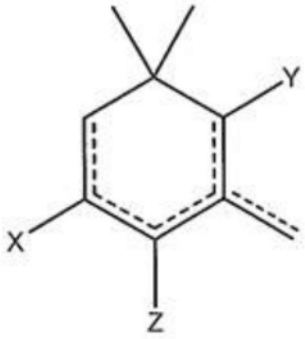


式 I

其中R_{11}是饱和的-C_1-C_6烃基团;且

其中组分A的至少一种化合物是乙酸;

B是至少一种式II的化合物



式 II

其中Y是选自-R_9(C=O)R_{10}或任选被一个或多个羟基取代的饱和或不饱和的-C_1-C_6烃基团的基团;

R_9是键或者饱和或不饱和的-C_1-C_6烃基团;

R_{10}是-H或者饱和或不饱和的-C_1-C_6烃基团;

Z和X均独立地选自-H和-R_3;

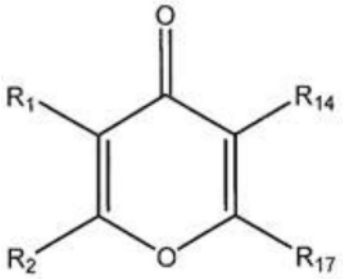
R_3选自饱和或不饱和的-C_1-C_6烃基团、酮基团、或-L-(C=O)R_{13},

L是键或-C_1-C_6烃基团,

R_{13}是饱和或不饱和的-C_1-C_6烃基团,

其中组分B的至少一种化合物是β-大马烯酮;

C是至少一种式IIIb的化合物



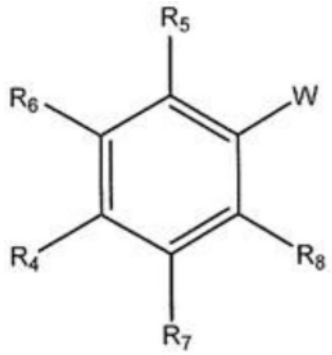
式 IIIb

R_1是-OH;

R_2和R_{14}独立地选自H和任选取代的饱和的-C_1-C_6烃基团;

R_{17}是H或者饱和的-C_1-C_6烃基团;

D是至少一种式IV的化合物



式 IV

其中W是-OH、-C_1-C_6-OH、-(C=O)H、-C_1-C_3-(C=O)H、-O(C=O)H、-O(C=O)CH_3、C_1-C_6烷氧基或-R_{15}(C=O)OR_{16}；

R_{15}是饱和的-C_1-C_6烃基团；

R_{16}是-H；

R_4至R_8各自独立地为-H、-OH、C_1-C_6烷氧基或者饱和或不饱和的-C_1-C_6烃基团；且

其中组分D的至少一种化合物是式IV的化合物，其中W是-OH、-C_1-C_6-OH、-C_1-C_3-(C=O)H、-O(C=O)H、-O(C=O)CH_3、C_1-C_6烷氧基或-R_{15}(C=O)OR_{16}；

其中组分D的至少一种化合物是式IV的化合物，其中W是R_{15}(C=O)OR_{16}，并且R_4至R_8各自为H，其中R_{15}是CH_2并且R_{16}是H，

并且其中组分D的至少一种化合物还包含选自由2,6-二甲氧基苯酚、2-甲氧基苯酚或4-烯丙基-2,6-二甲氧基苯酚组成的组中的化合物。

2.根据权利要求1所述的人工调制组合物，其中R_{11}是直链-C_1-C_6烃基团。

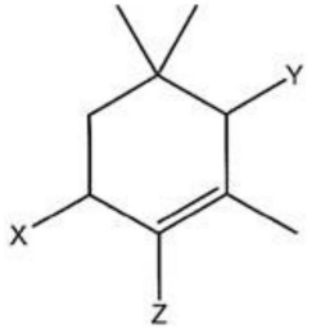
3.根据权利要求1所述的人工调制组合物，其中R_{11}是支链-C_1-C_6烃基团。

4.根据前述权利要求任一项所述的人工调制组合物，其中A是至少两种不同的式I的化合物。

5.根据权利要求4所述的人工调制组合物，其中A是至少三种不同的式I的化合物。

6.根据权利要求1至3任一项所述的人工调制组合物，其中A是至少乙酸和/或2-甲基丁酸和/或3-甲基丁酸。

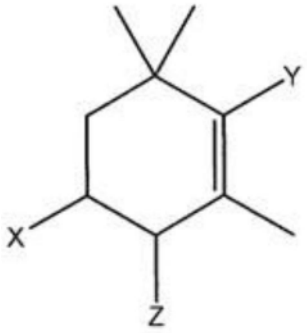
7.根据权利要求1至3任一项所述的人工调制组合物，其中B至少具有式IIa



。

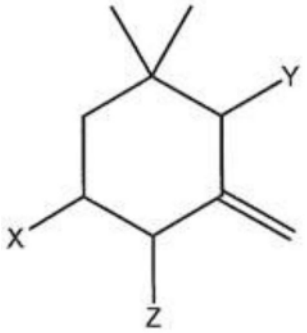
式 IIa

8.根据权利要求1至3任一项所述的人工调制组合物，其中B至少具有式IIb



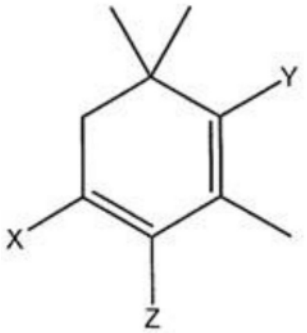
式 IIb。

9.根据权利要求1至3任一项所述的人工调制组合物,其中B至少具有式IIc



式 IIc。

10.根据权利要求1至3任一项所述的人工调制组合物,其中B至少具有式IId



式 IId。

11.根据权利要求1至3任一项所述的人工调制组合物,其中X是-R_3且Z是-H。

12.根据权利要求1至3任一项所述的人工调制组合物,其中Z是-R_3且X是-H。

13.根据权利要求1至3任一项所述的人工调制组合物,其中Z和X均为H。

14.根据权利要求1至3任一项所述的人工调制组合物,其中R_{13}是-CH=$CHCH_3$基团。

15.根据权利要求7所述的人工调制组合物,其中B具有式IIa,X是R_3,Z是-H,且R_{13}是不饱和的-C_3烃基团。

16.根据权利要求8所述的人工调制组合物,其中B具有式IIb,X是R_3,Z是-H,且R_{13}是不饱和的-C_3烃基团。

17.根据权利要求9所述的人工调制组合物,其中B具有式IIc,X是R_3,Z是-H,且R_{13}是不饱和的-C_3烃基团。

18.根据权利要求10所述的人工调制组合物,其中B具有式IId,X是R_3,Z是-H,且R_{13}是不饱和的-C_3烃基团。

19.根据权利要求7所述的人工调制组合物,其中B具有式IIa,Z是R_3,X是-H,且R_{13}是不饱和的-C_3烃基团。

20.根据权利要求8所述的人工调制组合物,其中B具有式IIb,Z是R_3,X是-H,且R_{13}是不

饱和的-C_3烃基团。

21.根据权利要求9所述的人工调制组合物，其中B具有式IIc，Z是R_3，X是-H，且R_{13}是不饱和的-C_3烃基团。

22.根据权利要求10所述的人工调制组合物，其中B具有式IId，Z是R_3，X是-H，且R_{13}是不饱和的-C_3烃基团。

23.根据权利要求1至3任一项所述的人工调制组合物，其中Y是-R_9(C=O)R_{10}，R_9是键且R_{10}是不饱和的-C_1-C_6烃基团。

24.根据权利要求1至3任一项所述的人工调制组合物，其中Y是被一个或多个羟基取代的饱和或不饱和的-C_1-C_6烃基团。

25.根据权利要求1至3任一项所述的人工调制组合物，其中Y是未取代的饱和或不饱和的-C_1-C_6烃基团。

26.根据权利要求7所述的人工调制组合物，其中B至少具有式IIa，且Y是被一个或多个羟基取代的未取代的饱和或不饱和的-C_1-C_6烃基团，X是-R_3，其中-R_3是酮基团，且Z是H。

27.根据权利要求1至3任一项所述的人工调制组合物，其中B是至少两种不同的式II的化合物。

28.根据权利要求1至3任一项所述的人工调制组合物，其中组分C是至少两种不同的式III的化合物。

29.根据权利要求1至3任一项所述的人工调制组合物，其中W是-R_{15}(C=O)OR_{16}。

30.根据权利要求1至3任一项所述的人工调制组合物，其中W是-OH。

31.根据权利要求21所述的人工调制组合物，其中W是-OH，并且R_4至R_8中的至少一个是C_1-C_6烷氧基。

32.根据权利要求1至3任一项所述的人工调制组合物，其中，对于其中R_{11}不为甲基的那些组分A组分而言，组分A:B之比为1至25:1。

33.如权利要求1至32任一项中限定的组合物用于模拟烟草香味的用途。

34.包含如权利要求1至32任一项中限定的人工调制组合物的配制品，其中所述配制品进一步包含以下的至少一种：

• 尼古丁;和/或

• 载体。

35.根据权利要求34所述的配制品，其中配制品包含尼古丁和载体，并且所述载体是选自甘油、丙二醇及其混合物的溶剂。

36.包含如权利要求34或权利要求35中限定的配制品的容器。

37.权利要求36的容器，其中所述容器是瓶。

38.权利要求36的容器，其中所述容器是气雾剂递送装置的组件。

39.制备如权利要求1至32任一项中限定的人工调制组合物的方法，所述方法包括将来自所述组分A、B、C和D中每一种的至少一种化合物组合的步骤，其中所述化合物中的至少一种并非源自烟草提取物。

40.制造气雾剂的方法，所述气雾剂模拟烟草香味，所述方法包括使如权利要求1至32任一项中限定的组合物或者权利要求34或权利要求35的配制品气雾化的步骤。

可用于模拟烟草香味的组合物

技术领域

[0001] 本发明涉及一种具有类烟草香味的组合物，特别是一种人工调制组合物(a synthetic composition)。本发明还涉及所述组合物的用途、包含所述组合物的配制品、含有该配制品的容器、使用该配制品生成气雾剂的方法以及所述配制品的用途。

[0002] 发明背景

[0003] 烟草由烟草植物的叶子制成。通常，收获烟草植物的叶子并随后熟化，使得烟叶的组成发生变化。烟叶随后经进一步处理以制造烟草。烟草具有独特的香味，这来自于其复杂范围的成分。

[0004] 近来，已经开发了一种装置，该装置允许使用者复制部分吸烟体验而不必使用传统香烟。特别地，已经开发了诸如电子烟的装置，其允许使用者生成人造气雾剂，随后可以将其吸入以复制吸烟体验。该气雾剂通常通过汽化包含水、尼古丁和气雾剂形成组分(如甘油)的液体来产生。该汽化经由加热器(或其它雾化手段)来发生，所述加热器通过诸如电池的电源来供能。

[0005] 寻求复制吸烟体验而不必使用传统香烟的其它装置也是可用的。这些装置可以被称为烟草加热装置，因为它们通常能够加热烟草但不使其燃烧。

[0006] 电子烟和烟草加热装置可以统称为气雾剂递送装置。但是，此类气雾剂递送装置，特别是电子烟的一个潜在缺点是它们可能无法完全复制通常与抽吸传统香烟相关的感官体验，传统香烟的使用者可能会觉得不那么合意。

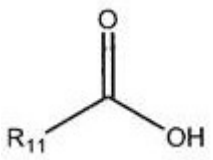
[0007] 因此，合意的是提供改善由气雾剂递送装置传递的感官体验的手段。

[0008] 发明概述

[0009] 本发明涉及一种人工调制组合物，其能够模拟烟草的芳香特征。该人工调制组合物还可以描述为具有类烟草香味。

[0010] 因此，在第一方面，本发明涉及一种人工调制组合物，包含选自组分A、B、C、D和E的两种或更多种组分，其中：

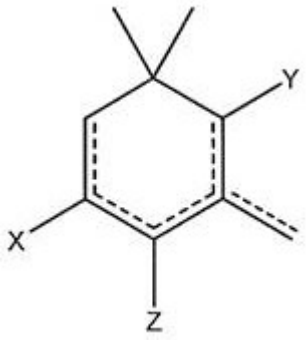
[0011] A是至少一种式I的化合物

[0012] 

式 I

[0013] 其中R_{11}是饱和的-C_1-C_6烃基团；

[0014] B是至少一种式II的化合物

[0015] 

式 II

[0016] 其中Y是选自-R_9(C=O)R_{10}或任选被一个或多个羟基取代的饱和或不饱和的-C_1-C_6烃基团的基团；

[0017] R_9是键或者饱和或不饱和的-C_1-C_6烃基团；

[0018] R_{10}是-H或者饱和或不饱和的-C_1-C_6烃基团；

[0019] Z和X均独立地选自-H和-R_3；

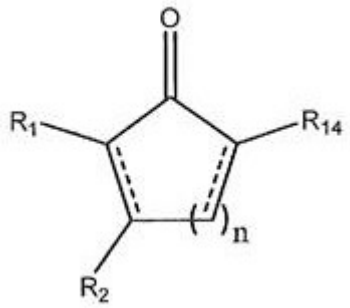
[0020] R_3选自饱和或不饱和的-C_1-C_6烃基团、酮基团、或-L-(C=O)R_{13}，

[0021] L是键或-C_1-C_6烃基团，

[0022] R_{13}是饱和或不饱和的-C_1-C_6烃基团；

[0023] ------ 代表任选的双键；

[0024] C是至少一种式III的化合物

[0025] 

式 III

[0026] 其中式III的环体系可以任选含有一个氧原子；

[0027] n是1或2；

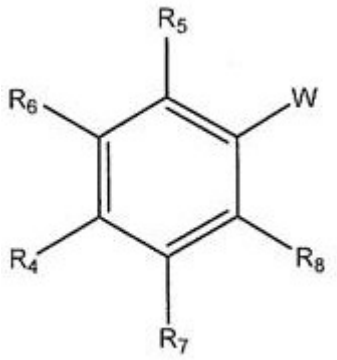
[0028] ------ 代表任选的双键；

[0029] R_1是-OH、-C_1-C_6-烷氧基或-OCOR_{12}；

[0030] R_{12}是饱和或不饱和的-C_1-C_6烃基团；

[0031] R_2和R_{14}独立地选自H和任选取代的饱和或不饱和的-C_1-C_6烃基团；

[0032] D是至少一种式IV的化合物

[0033] 

式 IV

[0034] 其中W是-OH、-C_1-C_6-OH、-(C=O)H、-C_1-C_3-(C=O)H、-O(C=O)H、-O(C=O)CH_3、C_1-C_6烷氧基或-R_{15}(C=O)OR_{16}；

[0035] R_{15}是饱和或不饱和的-C_1-C_6烃基团；

[0036] R_{16}是-H或饱和或不饱和的-C_1-C_6烃基团；

[0037] R_4至R_8各自独立地为-H、-OH、C_1-C_6烷氧基或者饱和或不饱和的-C_1-C_6烃基团；

[0038] E是至少一种选自以下的化合物：

[0039] 3-甲基-2,4-壬二酮和5,6,7-三甲基辛-2,5-二烯-4-酮。

[0040] 在另一方面，本发明涉及本文中限定的人工调制组合物用于模拟烟草香味的用途。

[0041] 在本发明的另一方面，提供了一种包含本文中限定的人工调制组合物的配制品，其中该配制品进一步包含以下的至少一种：

[0042] ●尼古丁；和/或

[0043] ●载体。

[0044] 在另一方面，本发明涉及本文中限定的配制品用于模拟烟草香味的用途。

[0045] 在另一方面，本发明涉及制备上述人工调制组合物的方法。

[0046] 为了便于参考，现在在适当的章节标题下讨论本发明的这些和其它方面。但是，在各章节下的教导不一定限于各特定章节。

[0047] 发明详述

[0048] 术语“烃”是指烷基、烯基或炔基的任一种。术语烃还包括其中它们任选被取代的那些基团。在一个实施方案中，除非另行说明，否则该烃是未取代的。如果该烃是具有在其上的(一个或多个)取代基的支链结构的话，那么该取代基可以在烃主链上或在支链上；或者该取代基可以在烃主链上和在支链上。合适的取代基的实例包括羟基。

[0049] 提及不饱和烃包括含有一个或多个C=C键的烃链。在这方面，除非另行说明，否则此类C=C键可以为顺式或反式构型。

[0050] 在本发明的一些方面，一个或多个烃基团独立地选自C_1-C_{10}烷基基团，如C_1-C_9、C_1-C_8、C_1-C_7、C_1-C_6、C_1-C_5、C_2-C_{10}、C_3-C_{10}、C_4-C_{10}、C_5-C_{10}、C_1-C_5、C_1-C_4、C_1-C_3烷基基团。典型的烷基基团包括C_1烷基、C_2烷基、C_3烷基、C_4烷基、C_5烷基、C_7烷基和C_8烷基。

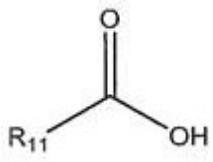
[0051] 在本发明的一些方面，一个或多个烃基团独立地选自烯基团。典型的烯基团包括C_1-C_{10}烯基团，如C_1-C_9、C_1-C_8、C_1-C_7、C_1-C_6、C_1-C_5、C_2-C_{10}、C_3-C_{10}、C_4-C_{10}、C_5-C_{10}、C_1-C_5、C_1-C_4或C_1-C_3烯基团，如C_1、C_2、C_3、C_4、C_5、C_6或C_7烯基团。在一个优选方面，该烯基团含有1、2或3个C=C键。在一个优选方面，该烯基团含有1个C=C键。在一些优选方面，至少一个C=C键或唯一的C=

C键连接至烯链的末端C,即该键位于相对于环体系的链的远端。

[0052] 在本说明书中提及 ------ 是指在两个碳原子之间存在任选的双键。

[0053] *化合物A*

[0054] A是至少一种式I的化合物

[0055] 

式 I

[0056] 其中R_{11}是饱和的-C_1-C_6烃基团。

[0057] 在一个实施方案中,R_{11}是直链-C_1-C_6烃基团。在一个实施方案中,R_{11}是支链-C_1-C_6烃基团。在一个实施方案中,R_{11}是支链-C_1-C_4烃基团。在一个实施方案中,R_{11}是直链-C_3-C_6烃基团。在一个实施方案中,R_{11}是支链-C_3-C_6烃基团。

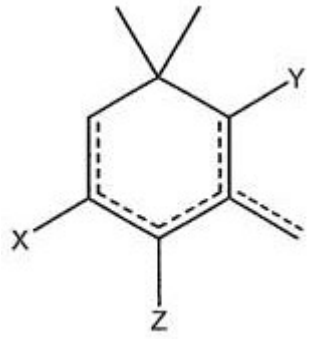
[0058] 在一个实施方案中,R_{11}选自C_1、C_2、C_3烷基、C_4烷基、C_5烷基和C_6烷基。在一个实施方案中,R_{11}是C_1烷基。在一个实施方案中,R_{11}是正丙基、正丁基或正戊基。在一个实施方案中,R_{11}是异丙基、异丁基、仲丁基或叔丁基。在一个实施方案中,R_{11}是支链戊基。在一个实施方案中,化合物A是3-甲基丁酸,也称为异戊酸。在一个实施方案中,化合物A是乙酸。在一个实施方案中,化合物A是3-甲基戊酸,也称为3-甲基缬草酸。在一个实施方案中,化合物A是2-甲基丁酸。在一个实施方案中,化合物A是酪酸,也称为丁酸。

[0059] 在一个实施方案中,A是至少两种不同的式I的化合物。在一个实施方案中,A是至少三种不同的式I的化合物。在一个实施方案中,A是至少四种不同的式I的化合物。

[0060] 在一个实施方案中,A是至少乙酸和2-甲基丁酸。

[0061] *化合物B*

[0062] B是至少一种式II的化合物

[0063] 

式 II

[0064] 其中Y是-R_9(C=O)R_{10},或任选被一个或多个羟基取代的饱和或不饱和的-C_1-C_6烃基团;

[0065] R_9是键或者饱和或不饱和的-C_1-C_6烃基团;

[0066] R_{10}是-H或者饱和或不饱和的-C_1-C_6烃基团;

[0067] Z和X均独立地选自-H和-R_3;

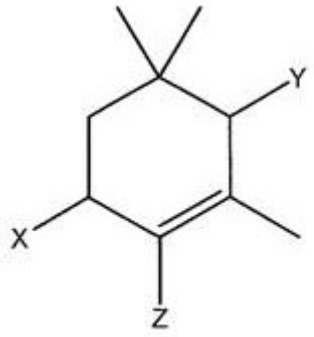
[0068] R_3选自饱和或不饱和的-C_1-C_6烃基团、酮基团、或-L-(C=O)R_{13};

[0069] ------代表任选的双键;

[0070] L是键或-C_1-C_6烃基团;和

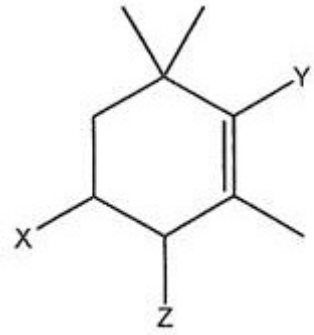
[0071] R_{13}是饱和或不饱和的-C_1-C_6烃基团。

[0072] 在一个实施方案中,化合物B具有式IIa

[0073] 

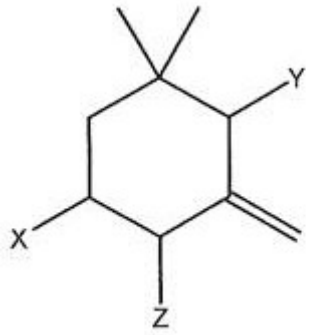
式 IIa

[0074] 在一个实施方案中,化合物B具有式IIb

[0075] 

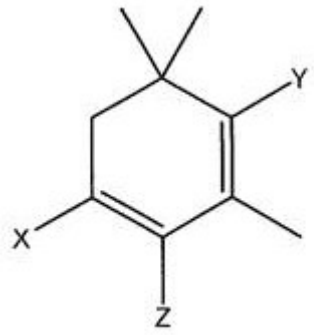
式 IIb

[0076] 在一个实施方案中,化合物B具有式IIc

[0077] 

式 IIc

[0078] 在一个实施方案中,化合物B具有式IId

[0079] 

式 IId

[0080] 在任意的上式IIa、IIb、IIc或IId中,Z、X和Y如对于式II所定义的那样。

[0081] 在一个实施方案中,Y是被一个或多个羟基取代的饱和或不饱和的-C_1-C_6烃基团。在一个实施方案中,Y是未取代的饱和或不饱和的-C_1-C_6烃基团。

[0082] 在一个实施方案中，Y是包含一个或两个不饱和键的C_4直链烯烃。

[0083] 在一个实施方案中，Y是$-R_9(C=O)R_{10}$。

[0084] 在一个实施方案中，X是$-R_3$且Z是-H。

[0085] 在一个实施方案中，Z是$-R_3$且X是-H。

[0086] 在一个实施方案中，Z和X均为H。

[0087] 在一个实施方案中，R_{13}是不饱和的$-C_1-C_4$烃基团。在一个实施方案中，R_{13}是不饱和的$-C_3$烃基团。在一个实施方案中，R_{13}是$-CH=CHCH_3$基团。在一个实施方案中，R_{13}是$-CH_2CH=CH_2$基团。在一个实施方案中，R_{13}是不饱和的$-C_4$烃基团。在一个实施方案中，R_{13}是$-CH_2CH_2CH=CH_2$基团。

[0088] 在一个实施方案中，化合物B具有式IIa，X是R_3，Z是-H，且R_{13}是不饱和的$-C_3$烃基团。在一个实施方案中，化合物B具有式IIa，X是R_3，Z是-H，且R_{13}是$-CH=CHCH_3$基团。

[0089] 在一个实施方案中，化合物B具有式IIb，X是R_3，Z是-H，且R_{13}是不饱和的$-C_3$烃基团。在一个实施方案中，化合物B具有式IIb，X是R_3，Z是-H，且R_{13}是$-CH=CHCH_3$基团。

[0090] 在一个实施方案中，化合物B具有式IIc，X是R_3，Z是-H，且R_{13}是不饱和的$-C_3$烃基团。在一个实施方案中，化合物B具有式IIc，X是R_3，Z是-H，且R_{13}是$-CH=CHCH_3$基团。

[0091] 在一个实施方案中，化合物B具有式IId，X是R_3，Z是-H，且R_{13}是不饱和的$-C_3$烃基团。在一个实施方案中，化合物B具有式IId，X是R_3，Z是-H，且R_{13}是$-CH=CHCH_3$基团。

[0092] 在一个实施方案中，化合物B具有式IIa，Z是R_3，X是-H，且R_{13}是不饱和的$-C_3$烃基团。在一个实施方案中，化合物B具有式IIa，Z是R_3，X是-H，且R_{13}是$-CH=CHCH_3$基团。

[0093] 在一个实施方案中，化合物B具有式IIb，Z是R_3，X是-H，且R_{13}是不饱和的$-C_3$烃基团。在一个实施方案中，化合物B具有式IIb，Z是R_3，X是-H，且R_{13}是$-CH=CHCH_3$基团。

[0094] 在一个实施方案中，化合物B具有式IIc，Z是R_3，X是-H，且R_{13}是不饱和的$-C_3$烃基团。在一个实施方案中，化合物B具有式IIc，Z是R_3，X是-H，且R_{13}是$-CH=CHCH_3$基团。

[0095] 在一个实施方案中，化合物B具有式IId，Z是R_3，X是-H，且R_{13}是不饱和的$-C_3$烃基团。在一个实施方案中，化合物B具有式IId，Z是R_3，X是-H，且R_{13}是$-CH=CHCH_3$基团。

[0096] 在一个实施方案中，Y是$-R_9(C=O)R_{10}$，R_9是键且R_{10}是不饱和的$-C_1-C_6$烃基团。

[0097] 在一个实施方案中，Y是$-R_9(C=O)R_{10}$，R_9是键且R_{10}是不饱和的$-C_3-C_6$烃基团。在一个实施方案中，Y是$-R_9(C=O)R_{10}$，R_9是键且R_{10}是不饱和的$-C_3$烃基团，如$-CH=CHCH_3$基团或$-CH_2CH=CH_2$基团。

[0098] 在一个实施方案中，Y是$-R_9(C=O)R_{10}$，R_9是键且R_{10}是不饱和的$-C_4$烃基团，如$-CH_2CH_2CH=CH_2$基团。

[0099] 在一个实施方案中，Y是$-R_9(C=O)R_{10}$，R_9是不饱和的$-C_1-C_6$烃基团且R_{10}是不饱和的$-C_1-C_6$烃基团。例如，R_9是不饱和的$-C_2$烃基团，如-CH=CH-基团。此外，R_{10}是例如$-CH_3$基团。在一个实施方案中，Y是$-R_9(C=O)R_{10}$，R_9是-CH=CH-基团且R_{10}是$-CH_3$基团。

[0100] 在一个实施方案中，化合物B具有式IIa且Y是被一个或多个羟基取代的未取代的饱和或不饱和的$-C_1-C_6$烃基团。在另一实施方案中，化合物B具有式IIa，Y是被一个或多个羟基取代的未取代的饱和或不饱和的$-C_1-C_6$烃基团，X是$-R_3$，其中$-R_3$是酮基团，且Z是H。

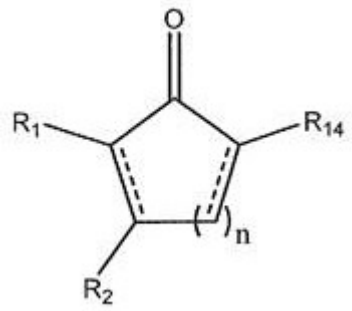
[0101] 在一个实施方案中，B是选自β-二氢大马酮、β-大马烯酮、β-紫罗兰酮、α-紫罗兰酮、α-紫罗兰醇、β-环柠檬醛和藏红花醛的至少一种化合物。

[0102] 在一个实施方案中，B是至少两种不同的式II的化合物。在一个实施方案中，B是至少三种不同的式II的化合物。在一个实施方案中，B是至少四种不同的式II的化合物。

[0103] 在一个实施方案中，B是选自β-二氢大马酮、β-大马烯酮、β-紫罗兰酮、α-紫罗兰酮、α-紫罗兰醇、β-环柠檬醛和藏红花醛的至少两种化合物。在一个实施方案中，B是至少β-二氢大马酮、β-大马烯酮和β-紫罗兰酮。

[0104] *化合物C*

[0105] C是至少一种式III的化合物

[0106] 

式 III

[0107] 其中式III的环体系可以任选含有一个氧原子；

[0108] n是1或2；

[0109] ------代表任选的双键；

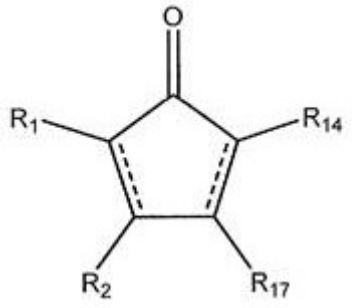
[0110] R_1是-OH、C_1-C_6-烷氧基或-OCOR_{12}；

[0111] R_{12}是饱和或不饱和的-C_1-C_6烃基团；

[0112] R_2和R_{14}独立地选自H和任选取代的饱和或不饱和的-C_1-C_6烃基团。

[0113] 在一个实施方案中，n为1，且该环体系因此为5元环。

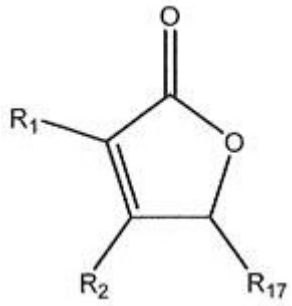
[0114] 在一个实施方案中，当n为1时，化合物C是至少一种式IIIa的化合物

[0115] 

式 IIIa

[0116] 其中R_{17}是H或者饱和或不饱和的-C_1-C_6烃基团，且其中R_1、R_2和R_{14}以及在环中任选存在氧原子如对于式III而言那样。

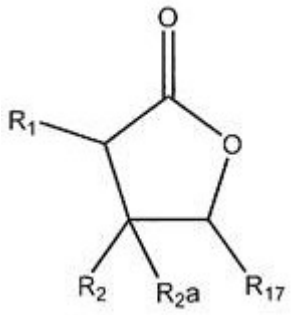
[0117] 在一个实施方案中，式IIIa的环含有氧原子。在一个实施方案中，式IIIa具有以下结构：

[0118] 

[0119] 其中R_{17}是H或者饱和或不饱和的-C_1-C_6烃基团，且其中R_1和R_2如对于式III而言那样。

[0120] 在一个实施方案中，R_1是-OH，R_2是-CH_3且R_{17}是-CH_3。

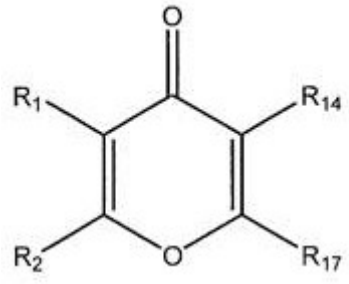
[0121] 在一个实施方案中，式IIIa具有下列结构：

[0122] 

[0123] 其中R_{17}是H或者饱和或不饱和的-C_1-C_6烃基团，且其中R_1和R_2如对于式III而言那样；并且R_{2a}是H或者饱和或不饱和的-C_1-C_6烃基团。

[0124] 在组分C的一个实施方案中，n为2，且该环体系因此为6元环。

[0125] 在一个实施方案中，其中n为2，C是至少一种式IIIb的化合物

[0126] 

式 IIIb

[0127] 其中R_{17}是H或者饱和或不饱和的-C_1-C_6烃基团，且其中R_1、R_2和R_{14}如对于式III而言那样。

[0128] 在一个实施方案中，R_1是-OH。

[0129] 在一个实施方案中，R_2是-CH_3。

[0130] 在一个实施方案中，R_1是-OH且R_2是-CH_3。

[0131] 在一个实施方案中，R_2是饱和的-C_2-C_4烃基团。在一个实施方案中，R_2是C_2烷基或C_3烷基。在一个实施方案中，R_2是C_2烷基。

[0132] 在一个实施方案中，R_1是-OH且R_2是C_2烷基。

[0133] 在一个实施方案中，R_1是-OCOR_{12}，其中R_{12}选自-CH_3或饱和的-C_2-C_4烃基团。

[0134] 在一个实施方案中，R_{12}是-CH_3。

[0135] 在一个实施方案中，R_{12}是饱和的-C_2-C_4烃基团。在一个实施方案中，R_{12}是C_2烷基或C_3烷基。在一个实施方案中，R_{12}是C_2烷基。在一个实施方案中，R_{12}是C_3烷基。在一个实施方案中，R_{12}是异丙基。在一个实施方案中，R_{12}是正丙基。

[0136] 在一个实施方案中，R_1是-$OCOR_{12}$，其中R_{12}是C_2烷基或C_3烷基，且R_2是-CH_3。在一个实施方案中，R_1是-$OCOR_{12}$，其中R_{12}是C_3烷基，且R_2是-CH_3。在一个实施方案中，R_1是-$OCOR_{12}$，其中R_{12}是异丙基，且R_2是-CH_3。在一个实施方案中，R_1是-$OCOR_{12}$，其中R_{12}是正丙基，且R_2是-CH_3。

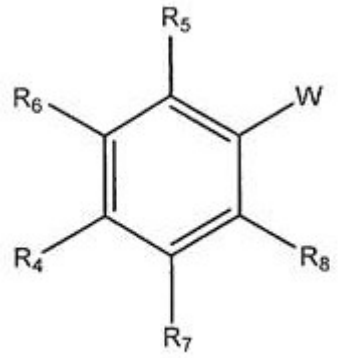
[0137] 在一个实施方案中，C是至少两种不同的式III的化合物。在一个实施方案中，C是至少三种不同的式III的化合物。在一个实施方案中，C是至少四种不同的式III的化合物。

[0138] 在一个实施方案中，C是至少一种式IIIb的化合物和一种式IIIc的化合物。在一个实施方案中，C是选自麦芽酚、乙基麦芽酚和葫芦巴内酯的至少两种化合物。

[0139] *化合物D*

[0140] D是至少一种式IV的化合物

[0141]



式 IV

[0142] 其中W是-OH、-C_1-C_6-OH、-(C=O)H、-C_1-C_3-(C=O)H、-C_1-C_6-O(C=O)CH_3、C_1-C_6烷氧基或-R_{15}(C=O)OR_{16}；

[0143] R_{15}是饱和或不饱和的-C_1-C_6烃基团；

[0144] R_{16}是-H或者饱和或不饱和的-C_1-C_6烃基团；和

[0145] R_4至R_8各自独立地为-H、-OH、C_1-C_6烷氧基或者饱和或不饱和的-C_1-C_6烃基团。

[0146] 在一个实施方案中，W是-R_{15}(C=O)OR_{16}。

[0147] 在一个实施方案中，W是-OH。在一个实施方案中，W是-C_1-C_6-OH、-(C=O)H、-C_1-C_3-(C=O)H、-O(C=O)H、-O(C=O)CH_3、C_1-C_6烷氧基或-R_{15}(C=O)OR_{16}。在一个实施方案中，W是-(C=O)H。在一个实施方案中，W是-C_1-C_3-(C=O)H。在一个实施方案中，W是-O(C=O)H、-O(C=O)CH_3、C_1-C_6烷氧基或-R_{15}(C=O)OR_{16}。在一个实施方案中，W是-O(C=O)CH_3。在一个实施方案中，W是C_1-C_6烷氧基。

[0148] 在一个实施方案中，R_4至R_8各自是-H。在一个实施方案中，R_5至R_8各自是-H，且R_4是饱和或不饱和的-C_1-C_4烃基团。

[0149] 在一个实施方案中，R_4至R_8中任一个的饱和或不饱和的-C_1-C_4烃基团选自甲基、乙基、丙基(支链或直链)和丁基(支链或直链)。

[0150] 在一个实施方案中，R_4至R_8中任一个的-C_1-C_4烃基团是不饱和的。

[0151] 在一个实施方案中，R_{15}是-CH_2-。

[0152] 在一个实施方案中，R_{16}是H。

[0153] 在一个实施方案中，R_{16}是饱和或不饱和的-C_1-C_4烃基团。在一个实施方案中，R_{16}是饱和的-C_1-C_4烃基团。在一个实施方案中，R_{16}是不饱和的-C_1-C_4烃基团。在一个实施方案中，R_{16}是甲基、乙基、正戊基或正丁基。在一个实施方案中，R_{16}是支链戊基，或支链丁基。

[0154] 在一个实施方案中，R_{15}是-CH_2-且R_{16}是H。

[0155] 在一个实施方案中，R_4至R_8各自是-H，R_{15}是-CH_2-且R_{16}是H。

[0156] 在一个实施方案中，W是-OH。

[0157] 在一个实施方案中，W是-OH，且R_4至R_8中的至少一个是C_1-C_6烷氧基。在一个实施方案中，W是-OH，R_4至R_8中的至少一个是C_1-C_6烷氧基；且R_4至R_8中的至少一个是饱和或不饱和的-C_1-C_6烃基团。

[0158] 在一个实施方案中，D是至少两种不同的式IV的化合物。在一个实施方案中，D是至少三种不同的式IV的化合物。在一个实施方案中，D是至少四种不同的式IV的化合物。

[0159] 在一个实施方案中，D是至少一种其中W是-OH的化合物和一种其中W是-R_{15}(C=O)OR_{16}的化合物。

[0160] *优选方面*

[0161] 在一个实施方案中，该人工调制组合物包含选自组分A、B、C、D和E的三种或更多种组分，其中A、B、C、D和E各自如本文中所定义。

[0162] 在一个实施方案中，该人工调制组合物包含选自组分A、B、C、D和E的四种或更多种组分，其中A、B、C、D和E各自如本文中所定义。

[0163] 在一个实施方案中，该人工调制组合物包含至少组分A、B、C和D，其中A、B、C和D各自如本文中所定义。

[0164] 在一个实施方案中，该人工调制组合物包含来自组分A、B、C、D和E中每一种的组分，其中A、B、C、D和E各自如本文中所定义。

[0165] 在一个实施方案中，该人工调制组合物包含至少如上定义的组分A、B、C和D，并且进一步其中：

[0166] 组分C的至少一种化合物是其中R_1为-OH或-$OCOR_{12}$；R_{12}为饱和或不饱和的-C_1-C_6烃基团；R_2和R_{14}独立地为饱和或不饱和的-C_1-C_6烃基团的化合物；

[0167] 组分B的至少一种化合物是其中Y为-R_9(C=O)R_{10}，或被一个或多个羟基取代的饱和或不饱和的-C_1-C_6烃基团；R_9为键或者饱和或不饱和的-C_1-C_6烃基团；R_{10}为-H或者饱和或不饱和的-C_1-C_6烃基团；Z和X不同，并均独立地选自-H和-R_3；R_3选自饱和或不饱和的-C_1-C_6烃基团、酮基团或-L-(C=O)R_{13}，L为键或-C_1-C_6烃基团，且R_{13}为饱和或不饱和的-C_1-C_6烃基团的化合物；

[0168] 组分D的至少一种化合物是其中R_4至R_8各自为-H；W为基团-R_9(C=O)OR_{10}，其中R_9为-CH_2-且R_{10}为H的化合物；和

[0169] 组分A的至少一种化合物是其中R_{11}为饱和的-C_1-C_6烃基团的化合物。

[0170] 在一个实施方案中，该人工调制组合物包含至少如上定义的组分A、B、C和D，并且进一步其中：

[0171] 组分C的至少一种化合物是其中R_1为-OH或-$OCOR_{12}$；R_{12}为饱和或不饱和的-C_1-C_6烃基团；R_2和R_{14}独立地为饱和或不饱和的-C_1-C_6烃基团的化合物；

[0172] 组分B的至少一种化合物是其中Y为-R_9(C=O)R_{10}，或被一个或多个羟基取代的饱和

或不饱和的-C_1-C_6烃基团;R_9为键者或饱和或不饱和的-C_1-C_6烃基团;R_{10}为-H或者饱和或不饱和的-C_1-C_6烃基团;Z和X不同,并均独立地选自-H和-R_3;R_3选自饱和或不饱和的-C_1-C_6烃基团、酮基团或-L-(C=O)R_{13},L为键或-C_1-C_6烃基团,且R_{13}为饱和或不饱和的-C_1-C_6烃基团的化合物;

[0173] 组分D的至少一种化合物是其中W为-OH、C_1-C_6烷氧基或-R_{15}(C=O)OR_{16};R_{15}为饱和或不饱和的-C_1-C_6烃基团;R_{16}为-H或者饱和或不饱和的-C_1-C_6烃基团;R_4至R_8各自独立地为-H、-OH、C_1-C_6烷氧基或者饱和或不饱和的-C_1-C_6烃基团的化合物;

[0174] 组分A的至少一种化合物是其中R_{11}为异丁基的化合物。

[0175] 在一个实施方案中,该人工调制组合物包含至少如上定义的组分A、B、C和D,并且进一步其中:

[0176] 组分C的至少一种化合物是其中R_1为-OH或-OCOR_{12};R_{12}为饱和或不饱和的-C_1-C_6烃基团;R_2和R_{14}独立地为饱和或不饱和的-C_1-C_6烃基团的化合物;

[0177] 组分B的至少一种化合物是式IIb的化合物,其中Y是-R_9(C=O)R_{10},R_9是键或者饱和或不饱和的-C_1-C_6烃基团;R_{10}是-H或者饱和或不饱和的-C_1-C_6烃基团;Z和X不同,并均独立地选自-H和-R_3;R_3选自饱和或不饱和的-C_1-C_6烃基团、酮基团或-L-(C=O)R_{13},L是键或-C_1-C_6烃基团,R_{13}是饱和或不饱和的-C_1-C_6烃基团;

[0178] 组分D的至少一种化合物是其中W为-OH、C_1-C_6烷氧基或-R_{15}(C=O)OR_{16};R_{15}为饱和或不饱和的-C_1-C_6烃基团;R_{16}为-H或者饱和或不饱和的-C_1-C_6烃基团;R_4至R_8各自独立地为-H、-OH、C_1-C_6烷氧基或者饱和或不饱和的-C_1-C_6烃基团的化合物;

[0179] 组分A的至少一种化合物是其中R_{11}为饱和的-C_1-C_6烃基团的化合物。

[0180] 在一个实施方案中,该人工调制组合物包含至少如上定义的组分A、B、C和D,并且进一步其中:

[0181] 组分C的至少一种化合物是式IIIb的化合物,其中R_1是-OH;R_2选自饱和或不饱和的-C_1-C_6烃基团;

[0182] 组分B的至少一种化合物是其中Y为-R_9(C=O)R_{10},或被一个或多个羟基取代的饱和或不饱和的-C_1-C_6烃基团;R_9为键或者饱和或不饱和的-C_1-C_6烃基团;R_{10}为-H或者饱和或不饱和的-C_1-C_6烃基团;Z和X不同,并均独立地选自-H和-R_3;R_3选自饱和或不饱和的-C_1-C_6烃基团、酮基团或-L-(C=O)R_{13},L为键或-C_1-C_6烃基团,且R_{13}为饱和或不饱和的-C_1-C_6烃基团的化合物;

[0183] 组分D的至少一种化合物是其中W为-OH、C_1-C_6烷氧基或-R_{15}(C=O)OR_{16};R_{15}为饱和或不饱和的-C_1-C_6烃基团;R_{16}为-H或者饱和或不饱和的-C_1-C_6烃基团;R_4至R_8各自独立地为-H、-OH、C_1-C_6烷氧基或者饱和或不饱和的-C_1-C_6烃基团的化合物;组分A的至少一种化合物是其中R_{11}为饱和的-C_3-C_5烃基团的化合物。

[0184] *进一步优选的方面*

[0185] 在一个实施方案中,该人工调制组合物包含落在上文对组分A、B、C、D和E的定义中的任一种内的多种化合物。例如,除了来自组分B、C、D和E的一种或多种的至少一种组分外,该人工调制组合物可以包含两种或更多种不同的组分A化合物。在一个实施方案中,除了来自组分A、C、D和E的一种或多种的至少一种组分外,该人工调制组合物可以包含两种或更多种不同的组分B化合物。在一个实施方案中,除了来自组分A、B、D和E的一种或多种的至少一

种组分外，该人工调制组合物可以包含两种或更多种不同的组分C化合物。在一个实施方案中，除了来自组分A、B、C和E的一种或多种的至少一种组分外，该人工调制组合物可以包含两种或更多种不同的组分D化合物。

[0186] 在一个实施方案中，该人工调制组合物可以包含来自多个组分组A、B、C或D的两种或更多种不同的化合物。由此，该人工调制组合物可以包含两种或更多种不同的组分A化合物、两种或更多种不同的组分B化合物、两种或更多种不同的组分C化合物、两种或更多种不同的组分D化合物、和/或两种或更多种不同的组分E化合物。

[0187] 因此，在一个实施方案中，该人工调制组合物包含选自任意组分组A、B、C或D的至少四种化合物。在一个实施方案中，该人工调制组合物包含选自任意组分组A、B、C或D的至少五种化合物。在一个实施方案中，该人工调制组合物包含选自任意组分组A、B、C或D的至少六种化合物。在一个实施方案中，该人工调制组合物包含选自任意组分组A、B、C或D的至少七种化合物。在一个实施方案中，该人工调制组合物包含选自任意组分组A、B、C或D的至少八种化合物。在一个实施方案中，该人工调制组合物包含选自任意组分组A、B、C或D的至少九种化合物。在一个实施方案中，该人工调制组合物包含选自任意组分组A、B、C或D的至少十种化合物。在一个实施方案中，该人工调制组合物包含选自任意组分组A、B、C或D的至少十一种化合物。在一个实施方案中，该人工调制组合物包含选自任意组分组A、B、C或D的至少十二种化合物。在一个实施方案中，该人工调制组合物包含选自任意组分组A、B、C或D的至少十三种化合物。在一个实施方案中，该人工调制组合物包含选自任意组分组A、B、C或D的至少十四种化合物。在一个实施方案中，该人工调制组合物包含选自任意组分组A、B、C或D的至少十五种化合物。

[0188] 在一个实施方案中，该组合物包含来自每个组分组A、B、C和D的至少一种化合物，以使该组合物包含至少四种化合物。在一个实施方案中，该组合物包含来自每个组分组A、B、C和D的至少一种化合物，以使该组合物包含至少五种化合物。在一个实施方案中，该组合物包含来自每个组分组A、B、C和D的至少一种化合物，以使该组合物包含至少六种化合物。在一个实施方案中，该组合物包含来自每个组分组A、B、C和D的至少一种化合物，以使该组合物包含至少七种化合物。在一个实施方案中，该组合物包含来自每个组分组A、B、C和D的至少一种化合物，以使该组合物包含至少八种化合物。在一个实施方案中，该组合物包含来自每个组分组A、B、C和D的至少一种化合物，以使该组合物包含至少九种化合物。在一个实施方案中，该组合物包含来自每个组分组A、B、C和D的至少一种化合物，以使该组合物包含至少十种化合物。在一个实施方案中，该组合物包含来自每个组分组A、B、C和D的至少一种化合物，以使该组合物包含至少十一种化合物。在一个实施方案中，该组合物包含来自每个组分组A、B、C和D的至少一种化合物，以使该组合物包含至少十二种化合物。在一个实施方案中，该组合物包含来自每个组分组A、B、C和D的至少一种化合物，以使该组合物包含至少十三种化合物。在一个实施方案中，该组合物包含来自每个组分组A、B、C和D的至少一种化合物，以使该组合物包含至少十四种化合物。在一个实施方案中，该组合物包含来自每个组分组A、B、C和D的至少一种化合物，以使该组合物包含至少十五种化合物。

[0189] 在一个实施方案中，其中存在两种或更多种不同的组分A化合物，它们可以选自乙酸、3-甲基丁酸、3-甲基戊酸、2-甲基丁酸和酪酸中的两种或更多种。在一个实施方案中，其中存在两种或更多种不同的组分A化合物，它们是至少酪酸和3-甲基丁酸。

[0190] 在一个实施方案中，其中存在两种或更多种不同的组分B化合物，一种化合物具有式IIb，一种化合物具有式IId。

[0191] 在一个实施方案中，其中存在两种或更多种不同的组分C化合物，一种化合物使得R_1是-OH且R_2是-CH_3，一种化合物使得R_1是-OH且R_2是乙基。

[0192] 在一个实施方案中，其中存在两种或更多种不同的组分D化合物，一种化合物使得W是R_{15}(C=O)OR_{16}且另一种使得W是-OH。

[0193] 除了组分A、B、C和D外，本发明的组合物还可以包含下列落在组分E内的化合物中的一种或多种：3-甲基-2,4-壬二酮和5,6,7-三甲基辛-2,5-二烯-4-酮。

[0194] 存在于本发明的人工调制组合物中的化合物可以以毫克/毫升的总组合物计以特定的比率存在。

[0195] 在一个实施方案中，组分A、C和D相对于组分B以特定的比率存在于该人工调制组合物中，其中各组分的量以毫克/毫升的总组合物计。

[0196] 在一个实施方案中，对于其中R_{11}不为甲基的那些组分A组分而言，组分A:B之比为1至25:1。在一个实施方案中，对于其中R_{11}不为甲基的那些组分A组分而言，组分A:B之比为1至15:1。在一个实施方案中，对于其中R_{11}不为甲基的那些组分A组分而言，组分A:B之比为2至10:1。在一个实施方案中，对于其中R_{11}为甲基的那些组分A组分而言，组分A:B之比为大于100:1。在一个实施方案中，对于其中R_{11}为甲基的那些组分A组分而言，组分A:B之比为大于150:1。在一个实施方案中，对于其中R_{11}为甲基的那些组分A组分而言，组分A:B之比为大于200:1。

[0197] 在一个实施方案中，组分C:B之比为2至65:1。在一个实施方案中，组分C:B之比为3至65:1。在一个实施方案中，组分C:B之比为5至65:1。在一个实施方案中，组分C:B之比为10至65:1。在一个实施方案中，组分C:B之比为15至65:1。在一个实施方案中，组分C:B之比为25至40:1。在一个实施方案中，组分C:B之比为30至40:1。在一个实施方案中，组分C:B之比为50至65:1。在一个实施方案中，组分C:B之比为50至60:1。在一个实施方案中，组分C:B之比为15至25:1。在一个实施方案中，组分C:B之比为3至20:1。

[0198] 在一个实施方案中，组分D:B之比为5至150:1。在一个实施方案中，组分D:B之比为5至140:1。在一个实施方案中，组分D:B之比为10至40:1。在一个实施方案中，组分D:B之比为10至35:1。在一个实施方案中，组分D:B之比为15至35:1。在一个实施方案中，组分D:B之比为15至25:1。在一个实施方案中，组分D:B之比为10至20:1。在一个实施方案中，组分D:B之比为5至10:1。

[0199] 在这方面，提及特定组分的比率是指总计的所述组分。例如，当对于组分A而言存在两种或更多种不同化合物时，针对组分A的比率涉及该组分的化合物的总量。

[0200] 在一个实施方案中，组分B包括根据式IIb的化合物，其中Y是R_3，Z是-H，且R_{13}是-CH=$CHCH_3$基团。在该实施方案中，组分A、C和D相对于组分B的这种特定化合物可以以特定的比率存在。特别地，组分A可以以1至20:1，例如1至5:1、或15至20:1的比率存在。此外，组分C可以以5至50:1，例如5至15:1、或35至45:1的比率存在。此外，组分D可以以15至25:1，例如18至22:1的比率存在。

[0201] 在一个实施方案中，组分A、C和D相对于组分B(总B组分)以下列量存在于该人工调制组合物中：

[0202] ●A:B为5至10:1；

[0203] ●C:B为5至10:1；和

[0204] ●D:B为10至15:1。

[0205] 在一个实施方案中，组分A、C和D相对于组分B(总B组分)以下列量存在于该人工调制组合物中：

[0206] ●A:B为1至5:1；

[0207] ●C:B为1至5:1；和

[0208] ●D:B为5至10:1。

[0209] 在一个实施方案中，组分A、C和D相对于组分B(总B组分)以下列量存在于该人工调制组合物中：

[0210] ●A:B为5至10:1；

[0211] ●C:B为15至25:1；和

[0212] ●D:B为5至10:1。

[0213] 在一个实施方案中，组分A、C和D相对于组分B(总B组分)以下列量存在于该人工调制组合物中：

[0214] ●A:B为5至10:1；

[0215] ●C:B为30至40:1；和

[0216] ●D:B为15至25:1。

[0217] 在一个实施方案中，组分A、C和D相对于组分B(总B组分)以下列量存在于该人工调制组合物中：

[0218] ●A:B为1至5:1；

[0219] ●C:B为30至40:1；和

[0220] ●D:B为5至15:1。

[0221] 在一个实施方案中，组分B构成人工调制组合物中存在的组分A、B、C和D的总量的1至10% w/v。在一个实施方案中，组分B构成人工调制组合物中存在的组分A、B、C和D的总量的2至5% w/v。

[0222] 在一个实施方案中，组分B、C和D相对于组分A以特定的比率存在于该人工调制组合物中，其中各组分的量以毫克/毫升的总组合物计。

[0223] 在一个实施方案中，组分C:A之比为0.005至0.2:1。在一个实施方案中，组分C:A之比为0.006至0.015:1。在另一实施方案中，对于其中R_{11}不为甲基的那些组分A组分而言，组分C:A之比为2至27:1。

[0224] 在一个实施方案中，组分D:A之比为0.01至0.3:1。在一个实施方案中，组分D:A之比为0.02至0.2:1。在一个实施方案中，对于其中R_{11}不为甲基的那些组分A组分而言，组分D:A之比为5至70:1。

[0225] 在一个实施方案中，组分A、B和D相对于组分C以特定的比率存在于该人工调制组合物中，其中各组分的量以毫克/毫升的总组合物计。

[0226] 在一个实施方案中，组分C:D之比为0.1至3:1。在一个实施方案中，组分C:D之比为0.5至2.5:1。

[0227] 本发明的人工调制组合物特别适于产生类烟草香味。此外，本发明人已经令人惊

讶地发现此类人工调制组合物无需甚至部分或完全从烟草中提取以提供这样的香味。

[0228] 因此，本发明的人工调制组合物并非直接衍生自烟草提取物。据认为，在从烟草中提取化合物的过程中，可能存在其它杂质(即除目标化合物之外的化合物)。从提取中完全消除此类杂质是不可能的，或极为困难，这可能因各种原因而存在问题。

[0229] 结果，本发明的人工调制组合物具有明显的优点，即它们不需要含有对提供类烟草香味没有显著贡献的附加化合物，所述附加化合物可能存在于衍生自烟草的组合物中。此类化合物的一个实例可以是含有吡嗪部分的化合物，如2-乙基-3,6-二甲基吡嗪。

[0230] 在这方面，在本发明上下文中的术语“人工调制”是指通过组合多种单独和/或分离的化合物以形成组合物，而非经由提取过程，由此提取含有多种化合物的起始组合物并随后提纯或以其它方式改性以减少其组成组分所产生的组合物。

[0231] 但是，要注意的是，本发明的人工调制组合物可以包含本身被视为分离的提取物的组分。由此，该组合物的各组分和/或化合物本身可以衍生自提取物，但是该人工调制组合物本身随后通过组合这些提取物来形成。但是，通常此类化合物并非衍生自烟草。

[0232] 在一个实施方案中，该人工调制组合物的一种或多种组分并非直接衍生自烟草。在一个实施方案中，该人工调制组合物中的组分均不直接衍生自烟草。在一个实施方案中，该组合物不包含一种或多种作为或包含吡嗪部分的化合物。在一个实施方案中，该组合物不包含一种或多种作为或包含双乙酰部分的化合物。在一个实施方案中，该组合物不包含一种或多种作为或包含乙偶姻部分的化合物。

[0233] 由于该人工调制组合物不直接衍生自提取物，通常情况是该人工调制组合物包含相对较少数量的化合物。例如，在一个实施方案中，该人工调制组合物基本上由两种、三种、四种、五种、六种、七种、八种、九种、十种、十一种、十二种、十三种、十四种或十五种化合物组成。在一个实施方案中，该人工调制组合物基本上由15种或更少的化合物，如14种或更少的化合物、如13种或更少的化合物、如12种或更少的化合物、如11种或更少的化合物、如10种或更少的化合物、如9种或更少的化合物、如8种或更少的化合物、如7种或更少的化合物、如6种或更少的化合物、如5种或更少的化合物组成。

[0234] 在一个方面，本发明涉及制备本文中限定的人工调制组合物的方法，该方法包括以下步骤：

[0235] ●将来自本文中限定的组分A、B、C、D和E之一的至少一种化合物与组分A、B、C、D和E之一的不同化合物组合，其中所述化合物中的至少一种并非源自烟草提取物。

[0236] 在一个实施方案中，当组合落在任意组分A、B、C、D和E中的超过两种不同的化合物时，所述化合物的至少一种衍生自与该人工调制组合物中存在的其它化合物不同的提取物。

[0237] 在另一方面，本发明涉及制备本文中限定的人工调制组合物的方法，其中任意组分A、B、C、D和E的至少一种化合物并非衍生自提取物，该方法包括以下步骤：

[0238] ●将本文中限定的组分A、B、C和D的至少一种与组分A、B、C和D的另一种组合。

[0239] 在一个实施方案中，本发明的人工调制组合物可以基本上由本文中限定的组分A、B、C和D的化合物组成。

[0240] 如上文解释的那样，存在于本发明的组合物中的个别化合物本身可以衍生自天然来源。但是，虽然此类天然衍生的化合物可以获得和提纯，并随后添加到本发明的组合物

中，但这不会导致该人工调制组合物本身成为提取物。

[0241] 此外，本发明的人工调制组合物可以通过使组分A、B、C、D分布和/或在合适的溶剂中来制备。在这方面，合适的溶剂可以是乙醇或乙醚。应当注意，使用溶剂以辅助制备该人工调制组合物是任选的，并且仅便于该人工调制组合物的生产，而不会对该人工调制组合物产生的香味造成影响。在这方面，所用溶剂通常使得其在使用者能够甚至从嗅觉角度感知其存在之前从该人工调制组合物中蒸发。

[0242] 因此，在另一方面，本发明涉及本文中限定的人工调制组合物用于模拟烟草香味的用途。

[0243] 在一个实施方案中，本发明涉及基本上由落在本文中限定的组分A、B、C和D中的组分组成的人工调制组合物用于模拟烟草香味的用途。

[0244] 在本发明的另一方面，提供了一种包含本文中限定的人工调制组合物的配制品，其进一步包含以下的至少一种：

[0245] ●尼古丁；和/或

[0246] ●载体。

[0247] 存在于该配制品中的尼古丁可以是质子化和/或未质子化形式。在一个实施方案中，该配制品包含未质子化形式的尼古丁和单质子化形式的尼古丁。尽管据设想该配制品通常包含未质子化形式的尼古丁和单质子化形式的尼古丁，但仍可能存在少量双质子化的尼古丁。在一方面，该配制品包含未质子化形式的尼古丁、单质子化形式的尼古丁和双质子化形式的尼古丁。

[0248] 在本发明的配制品中提及成分的重量%是相对于该配制品的总重量计的。

[0249] 在一个实施方案中，存在于溶液中的尼古丁的1至80重量%为质子化形式。在一个实施方案中，存在于溶液中的尼古丁的2至80重量%为质子化形式。在一个实施方案中，存在于溶液中的尼古丁的3至80重量%为质子化形式。在一个实施方案中，存在于溶液中的尼古丁的4至80重量%为质子化形式。在一个实施方案中，存在于溶液中的尼古丁的5至80重量%为质子化形式。在一个实施方案中，存在于溶液中的尼古丁的10至80重量%为质子化形式。在一个实施方案中，存在于溶液中的尼古丁的15至80重量%为质子化形式。在一个实施方案中，存在于溶液中的尼古丁的20至80重量%为质子化形式。在一个实施方案中，存在于溶液中的尼古丁的25至80重量%为质子化形式。在一个实施方案中，存在于溶液中的尼古丁的30至80重量%为质子化形式。在一个实施方案中，存在于溶液中的尼古丁的35至80重量%为质子化形式。在一个实施方案中，存在于溶液中的尼古丁的40至80重量%为质子化形式。在一个实施方案中，存在于溶液中的尼古丁的45至80重量%为质子化形式。在一个实施方案中，存在于溶液中的尼古丁的50至80重量%为质子化形式。在一个实施方案中，存在于溶液中的尼古丁的55至80重量%为质子化形式。

[0250] 在一个实施方案中，存在于溶液中的尼古丁的5至80重量%为质子化形式。在一个实施方案中，存在于溶液中的尼古丁的5至75重量%为质子化形式。在一个实施方案中，存在于溶液中的尼古丁的5至70重量%为质子化形式。在一个实施方案中，存在于溶液中的尼古丁的5至65重量%为质子化形式。在一个实施方案中，存在于溶液中的尼古丁的5至60重量%为质子化形式。在一个实施方案中，存在于溶液中的尼古丁的5至55重量%为质子化形式。在一个实施方案中，存在于溶液中的尼古丁的5至50重量%为质子化形式。在一个实施方案中，

存在于溶液中的尼古丁的5至45重量%为质子化形式。在一个实施方案中，存在于溶液中的尼古丁的5至40重量%为质子化形式。在一个实施方案中，存在于溶液中的尼古丁的5至35重量%为质子化形式。在一个实施方案中，存在于溶液中的尼古丁的5至30重量%为质子化形式。在一个实施方案中，存在于溶液中的尼古丁的5至25重量%为质子化形式。在一个实施方案中，存在于溶液中的尼古丁的5至20重量%为质子化形式。在一个实施方案中，存在于溶液中的尼古丁的5至15重量%为质子化形式。在一个实施方案中，存在于溶液中的尼古丁的5至10重量%为质子化形式。

[0251] 在本文中规定了存在于该配制品中的质子化形式的尼古丁的相关量。本领域技术人员可以容易地计算这些量。尼古丁——3-(1-甲基吡咯烷-2-基)吡啶——是一种双质子碱，吡啶环具有3.12的pKa，吡咯烷环具有8.02的pKa。其可以以pH依赖性的质子化(单质子化和双质子化)和非质子化(游离碱)形式(其具有不同的生物利用度)存在。

[0252] 在不同pH增量下，质子化和非质子化的尼古丁的分布将有所不同。

[0253] 非质子化尼古丁的部分在高pH水平下占主要地位，而pH降低将看到质子化(单质子化或双质子化，取决于pH)尼古丁的部分增加。如果样品中质子化尼古丁的相对分数和尼古丁的总量是已知的，则可以计算质子化尼古丁的绝对量。

[0254] 溶液中质子化尼古丁的相对分数可以通过使用Henderson-Hasselbalch方程来计算/估算，该方程将pH描述为酸解离常数方程的推导，并且其广泛用于化学和生物体系。考虑以下平衡：

[0255] $$B + H^+ \rightleftharpoons BH^+$$

[0256] 该平衡的Henderson-Hasselbalch方程为：

[0257] $$pH = pKa + \log\frac{[B]}{[BH+]}$$

[0258] 其中[B]是非质子化尼古丁(即游离碱)的量，[BH+]是质子化尼古丁(即共轭酸)的量，且pKa是尼古丁的吡咯烷环氮的参考pKa值(pKa=8.02)。质子化尼古丁的相对分数可以如下由Henderson-Hasselbalch方程计算的非质子化尼古丁的α值推导出：

[0259] $$\%\text{质子化尼古丁} = 100 - \left\{\frac{\frac{[B]}{[BH+]}}{\left\{1+\frac{[B]}{[BH+]}\right\}} * 100\right\}$$

[0260] 尼古丁溶液的pKa值的确定可以采用“Spectroscopic investigations into the acid-base properties of nicotine at different temperatures”, Peter M. Clayton, Carl A. Vas, Tam T. T. Bui, Alex F. Drake和Kevin McAdam, .Anal. Methods, 2013,5, 81-88中描述的基本方法来进行。

[0261] 如本文中讨论的那样，该配制品可以附加地包含未质子化形式的尼古丁和质子化形式的尼古丁。如本领域技术人员所理解的那样，尼古丁的质子化形式可以通过使未质子化的尼古丁与酸反应来制备。该酸可以是来自组分组A、B、C和D之一的化合物。该酸是一种或多种合适的酸，如有机酸。在一个实施方案中，该酸是羧酸。该羧酸可以是任何合适的羧酸。在一个实施方案中，该酸是单羧酸。

[0262] 在一个实施方案中，该酸选自乙酸、苯甲酸、乙酰丙酸、乳酸、甲酸、柠檬酸、丙酮酸、琥珀酸、酒石酸、油酸、山梨酸、丙酸、苯乙酸及其混合物。在一个实施方案中，该酸是苯甲酸。

[0263] 该配制品的载体可以是任何合适的溶剂，以使得该配制品可以汽化来使用。在一个实施方案中，该溶剂选自甘油、丙二醇及其混合物。在一个实施方案中，该溶剂是至少甘油。在一个实施方案中，该溶剂基本上由甘油组成。在一个实施方案中，该溶剂由甘油组成。在一个实施方案中，该溶剂是至少丙二醇。在一个实施方案中，该溶剂基本上由丙二醇组成。在一个实施方案中，该溶剂由丙二醇组成。在一个实施方案中，该溶剂是至少丙二醇和甘油的混合物。在一个实施方案中，该溶剂基本上由丙二醇和甘油的混合物组成。在一个实施方案中，该溶剂由丙二醇和甘油的混合物组成。

[0264] 该配制品的载体可以以任何合适的量存在。在一个实施方案中，载体以基于该配制品计1至98重量%的量存在。在一个实施方案中，载体以基于该配制品计5至98重量%的量存在。在一个实施方案中，载体以基于该配制品计10至98重量%的量存在。在一个实施方案中，载体以基于该配制品计20至98重量%的量存在。在一个实施方案中，载体以基于该配制品计30至98重量%的量存在。在一个实施方案中，载体以基于该配制品计40至98重量%的量存在。在一个实施方案中，载体以基于该配制品计50至98重量%的量存在。在一个实施方案中，载体以基于该配制品计60至98重量%的量存在。在一个实施方案中，载体以基于该配制品计70至98重量%的量存在。在一个实施方案中，载体以基于该配制品计80至98重量%的量存在。在一个实施方案中，载体以基于该配制品计90至98重量%的量存在。在一个实施方案中，载体以基于该配制品计1至90重量%的量存在。在一个实施方案中，载体以基于该配制品计5至90重量%的量存在。在一个实施方案中，载体以基于该配制品计10至90重量%的量存在。在一个实施方案中，载体以基于该配制品计20至90重量%的量存在。在一个实施方案中，载体以基于该配制品计30至90重量%的量存在。在一个实施方案中，载体以基于该配制品计40至90重量%的量存在。在一个实施方案中，载体以基于该配制品计50至90重量%的量存在。在一个实施方案中，载体以基于该配制品计60至90重量%的量存在。在一个实施方案中，载体以基于该配制品计70至90重量%的量存在。在一个实施方案中，载体以基于该配制品计80至90重量%的量存在。

[0265] 在另一方面，本发明涉及包含本文中限定的配制品的容器。该容器可以是用于保存该配制品的任何合适的容器。例如，该容器可以是瓶。此外，该容器可以是气雾剂递送装置或系统(如雾化烟弹)的组件。

[0266] 在另一方面，本发明涉及制造气雾剂的方法，所述气雾剂模拟烟草香味，该方法包括使本文中限定的组合物或配制品气雾化的步骤。

[0267] 在另一方面，本发明涉及本文中限定的配制品用于模拟烟草香味的用途。

[0268] 现在将参考以下非限制性实施例来描述本发明。

实施例

[0269] 在表1中给出了用于制备本发明的示例性人工调制组合物的化合物。为了制备该人工调制组合物，制备化合物在乙醇中的储备溶液。如上文所解释的那样，使用溶剂如乙醇不会对本发明造成限制，实际上可以使用其它溶剂或者实际上可以不使用溶剂。

[0270] 表1- 用于人工调制组合物的化合物

[0271]

化合物	供应商	CAS
乙酸	Sigma-Aldrich	64-19-7
3-甲基丁酸	Sigma-Aldrich	503-74-2
2-甲基丁酸	Sigma-Aldrich	116-53-0
3-甲基-2,4-壬二酮	Penta Manufacturing	113486-29-6
β-二氢大马酮	Penta Manufacturing	23726-92-3
2-甲氧基苯酚	Sigma-Aldrich	90-05-1
β-大马烯酮	Penta Manufacturing	23726-91-2
β-紫罗兰酮	Sigma-Aldrich	14901-07-6
4-甲基-2-甲氧基苯酚	Sigma-Aldrich	93-51-6
3-羟基-2-甲基-4-吡喃酮	Sigma-Aldrich	118-71-8
4-丙基-2-甲氧基苯酚	Sigma-Aldrich	2785-87-7
3-羟基-4,5-二甲基-2(5H)-呋喃酮	Sigma-Aldrich	28664-35-9
2,6-二甲氧基苯酚	Sigma-Aldrich	91-10-1
苯乙酸	Sigma-Aldrich	103-82-2
α-紫罗兰酮	Sigma Aldrich	127-41-3
α-二氢大马酮	Penta Manufacturing	43052-87-5
β-环柠檬醛	Sigma Aldrich	432-25-7
藏红花醛	Sigma Aldrich	116-26-7
乙基麦芽酚	Sigma Aldrich	4940-11-8
甲基环戊烯醇酮	Sigma Aldrich	765-70-8
乙基甲基环戊烯醇酮	Sigma Aldrich	21835-01-8
3,5-二甲基环戊烯醇酮	Sigma Aldrich	13494-07-0
呋喃酮甲醚	Sigma Aldrich	4077-47-8
3-羟基-4-甲基-5-乙基-2(5H)呋喃酮	Sigma Aldrich	698-10-2
苯甲醛	Sigma Aldrich	100-52-7
α-紫罗兰醇	AldrichCPR	25312-34-9
4-烯丙基-2,6-二甲氧基苯酚	Sigma-Aldrich	6627-88-9

[0272] 试验1

[0273] 制备具有类烟草香味的组合物

[0274] 在乙醇中制备包含表2中描述化合物的人工调制组合物。

[0275] 特别地,在乙醇或乙醚中制备单独化合物的储备溶液。对于最终配制品,将各储备溶液的特定等分试样组合并使其达到限定的体积以实现目标浓度。如表2中详述的那样制备各种组合物。

[0276] 表2

[0277]

化合物	化合物组	实施例1	实施例2	实施例3	对比例1	对比例2
乙酸	A	x	x	x	x	x
3-甲基丁酸	A			x		x

3-甲基戊酸	A			x		
(E)-β-大马烯酮	B	x	x	x	x	
β-二氢大马酮	B				x	
β-紫罗兰酮	B			x	x	
麦芽酚	C	x	x	x		x
葫芦巴内酯	C	x		x		x
2-甲氧基苯酚	D			x	x	
4-甲基-2-甲氧基苯酚	D			x	x	
4-丙基-2-甲氧基苯酚	D			x	x	
2,6-二甲氧基苯酚	D	x	x	x		x
苯乙酸	D	x	x	x		x
3-甲基-2,4-壬二酮					x	
类烟草香味		0	0	0	Δ	Δ

[0278] 根据以下方案对该人工调制组合物进行感官分析：

[0279] 设置:将四种烟草样品的样本(四种烟草各自大约1克的混合物)放置在圆形滤纸上；

[0280] 将200微升的人工调制组合物移液到另外的圆形滤纸上并→挥动直到乙醇蒸发(滤纸上不再有可见的湿点)；

[0281] 五名专家组成员对烟草样品和人工调制组合物进行鼻前(orthonasally)比较。

[0282] 结果:5名专家组成员中的3名表示人工调制组合物令人联想到烟草-0，

[0283] 5名专家组成员中少于3名表示人工调制组合物不能令人联想到烟草-Δ。

[0284] 可以看出,已令人惊讶地发现,可以制备不必从烟草中提取也可以提供令人联想到烟草的香味的人工调制组合物。

[0285] 适于测试人工调制组合物的联想性的参考烟草样品包括来自“Rothmans Blue”香烟(由British American Tobacco供应)的烟草。

[0286] 试验2

[0287] 制备具有类烟草香味的其它组合物

[0288] 在乙醇中制备包含表3中描述的化合物的人工调制组合物。

[0289] 特别地,制备了在乙醚(经蒸馏)中的所有香味化合物的储备溶液。该储备溶液具有大约1毫克/毫升的浓度。将乙酸和麦芽酚直接称重。对于最终配制品,将各储备溶液的特定等分试样组合并用乙醇使其达到限定的体积以实现目标浓度。如表3中详述的那样制备各种组合物。

[0290] 表3

[0291]

实施例号	化合物	组(A、B、C、D)	浓度 [μg/10 mL]	类烟草特性
4 (重复实施例 2)	乙酸	A	36434.00	O
	β-大马烯酮	B	22.10	
	麦芽酚	C	1832.00	
	苯乙酸	D	631.00	
	2,6-二甲氧基苯酚	D	2258.00	
对比例 3	-		-	Δ
	β-大马烯酮	B	22.10	
	麦芽酚	C	1832.00	
	苯乙酸	D	631.00	
	2,6-二甲氧基苯酚	D	2258.00	
5	2-甲基丁酸	A	22.60	O
	β-大马烯酮	B	22.10	
	麦芽酚	C	1832.00	
	苯乙酸	D	631.00	
	2,6-二甲氧基苯酚	D	2258.00	
6	乙酸	A	36434.00	O
	α-紫罗兰酮	B	100.00	
	麦芽酚	C	1832.00	
	苯乙酸	D	631.00	
	2,6-二甲氧基苯酚	D	2258.00	
7	乙酸	A	36434.00	O
	β-环柠檬醛	B	100.00	
	麦芽酚	C	1832.00	
	苯乙酸	D	631.00	
	2,6-二甲氧基苯酚	D	2258.00	
8	乙酸	A	36434.00	O
	藏红花醛	B	100.00	
	麦芽酚	C	1832.00	
	苯乙酸	D	631.00	
	2,6-二甲氧基苯酚	D	2258.00	
9	乙酸	A	36434.00	O
	β-大马烯酮	B	22.10	
	乙基麦芽酚	C	1000.00	
	苯乙酸	D	631.00	
	2,6-二甲氧基苯酚	D	2258.00	
10	乙酸	A	36434.00	O
	β-大马烯酮	B	22.10	
	甲基环戊烯醇酮	C	100.00	
	苯乙酸	D	631.00	
	2,6-二甲氧基苯酚	D	2258.00	

[0292]

11	乙酸	A	36434.00	O
	β-大马烯酮	B	22.10	
	乙基甲基环戊烯醇酮	C	500.00	
	苯乙酸	D	631.00	
	2,6-二甲氧基苯酚	D	2258.00	
12	乙酸	A	36434.00	O
	β-大马烯酮	B	22.10	
	3,5-二甲基环戊烯醇酮	C	500.00	
	苯乙酸	D	631.00	
	2,6-二甲氧基苯酚	D	2258.00	
13	乙酸	A	36434.00	O
	β-大马烯酮	B	22.10	
	呋喃酮甲醚	C	50.00	
	苯乙酸	D	631.00	
	2,6-二甲氧基苯酚	D	2258.00	
14	乙酸	A	36434.00	O
	β-大马烯酮	B	22.10	
	3-羟基-4-甲基-5-乙基-2(5H)呋喃酮	C	0.22	
	苯乙酸	D	631.00	
	2,6-二甲氧基苯酚	D	2258.00	
15	乙酸	A	36434.00	O
	β-大马烯酮	B	22.10	
	麦芽酚	C	1832.00	
	苯甲醛	D	150.00	
	2,6-二甲氧基苯酚	D	2258.00	
16	乙酸	A	36434.00	O
	β-大马烯酮	B	22.10	
	麦芽酚	C	1832.00	
	2-甲氧基苯酚	D	87.81	
	2,6-二甲氧基苯酚	D	2258.00	
17	乙酸	A	36434.00	O
	β-大马烯酮	B	22.10	
	麦芽酚	C	1832.00	
	苯乙酸	D	631.00	
	4-烯丙基-2,6-二甲氧基苯酚	D	252.00	
18	乙酸	A	36434.00	O
	β-大马烯酮	B	22.10	
	麦芽酚	C	1832.00	
	苯乙酸	D	631.00	

[0293]

	2-甲氧基苯酚	D	88.00	
19	乙酸	A	36434.00	O
	α-紫罗兰醇	B	22.10	
	麦芽酚	C	1832.00	
	苯乙酸	D	631.00	
	2,6-二甲氧基苯酚	D	2258.00	
对比例 4	乙酸	A	36434.00	Δ
	-		-	
	麦芽酚	C	1832.00	
	苯乙酸	D	631.00	
	2,6-二甲氧基苯酚	D	2258.00	
对比例 5	乙酸	A	36434.00	Δ
	β-大马烯酮	B	22.10	
	-		-	
	苯乙酸	D	631.00	
	2,6-二甲氧基苯酚	D	2258.00	
对比例 6	乙酸	A	36434.00	Δ
	β-大马烯酮	B	22.10	
	麦芽酚	C	1832.00	
	-		-	
	2,6-二甲氧基苯酚	D	2258.00	
对比例 7	乙酸	A	36434.00	Δ
	β-大马烯酮	B	22.10	
	麦芽酚	C	1832.00	
	-		-	
	-		-	

[0294] *感官方案*

[0295] 设计了感官测试方案,并描述在下文中。

[0296] 将200微升的各测试共混物(各实施例)添加至纤维素基滤纸以制备测试样品。随后将测试样品呈现给专家组成员进行气味评估。将样品随机化,并在测试设计中包括阳性和阴性对照样品,并盲呈给专家组成员。

[0297] 此外,将四种烟草呈现给专家组成员以提供不同的天然烟草香味参考。

[0298] 五名专家组成员用于评估,在感官评价期间记录个人和共识的分数和描述符。

[0299] 将测试样品与参考烟草样品进行比较。

[0300] 如在试验1中那样,如果五名专家组成员中的三名或更多将样品描述为类似烟草,则该人工调制组合物被评定为类似烟草。

[0301] 适于测试该人工调制组合物的联想性的参考烟草样品包括来自“Rothmans Blue”香烟(由British American Tobacco供应)的烟草。

[0302] 结果与讨论

[0303] 在上文中可以看出,除去来自A组的化合物导致类烟草香味的丧失(参见对比例3与实施例2或实施例4之间的比较)。此外,可以用作来自A组的化合物的代表性酸是乙酸和2-甲基丁酸。

[0304] 此外，可以看出，除去来自B组的化合物导致类烟草香味的丧失(参见对比例4与实施例2或实施例4之间的比较)。此外，可以用作来自B组的化合物的代表性化合物是β-大马烯酮、β-环柠檬醛、藏红花醛、α-紫罗兰醇和β-紫罗兰酮。

[0305] 此外，可以看出，除去来自C组的化合物导致类烟草香味的丧失(参见对比例5与实施例2或实施例4之间的比较)。此外，可以用作来自C组的化合物的代表性化合物是麦芽酚、乙基麦芽酚、甲基环戊烯醇酮、乙基甲基环戊烯醇酮、呋喃酮甲醚(mesifurane)、3-羟基-4-甲基-5-乙基-2(5H)呋喃酮(maple furanone)、3-羟基-4-甲基-5-乙基-2(5H)呋喃酮和3,5-二甲基环戊烯醇酮(coronol)。

[0306] 此外，可以看出，除去来自D组的化合物导致类烟草香味的丧失(参见对比例6和7与实施例2或实施例4之间的比较)。此外，可以用作来自D组的化合物的代表性化合物是苯乙酸、苯甲醛、2-甲氧基苯酚和2,6-二甲氧基苯酚。

[0307] 鉴于上述情况，已令人惊讶地发现，当制备具有令人联想到烟草的香味的组合物时，包含来自每一个组A、B、C和D的化合物的人工调制组合物是优选的。

[0308] 为了解决各种问题并推进本领域技术，本公开的全部内容通过举例说明各种实施方案来显示，在所述各种实施方案中可以实施所要求保护的(一个或多个)发明，并提供具有令人联想到烟草的香味的优异的人工调制组合物。本公开的优点和特征仅仅是实施方案的代表性样本，而非穷举和/或排他的。它们仅用于帮助理解和教导所要求保护的特征。要理解的是，本公开的优点、实施方案、实施例、功能、特征、结构和/或其它方面不应视为对通过权利要求书限定的本公开的限制或对权利要求等同物的限制，并且可以采用其它实施方案，并可以进行修改，而不偏离本公开的范围和/或精神。此外，本公开包括目前尚未要求保护但可能在将来要求保护的其它发明。