



(51) МПК
C07C 47/228 (2006.01)
C11B 9/00 (2006.01)
C11D 3/50 (2006.01)

ФЕДЕРАЛЬНАЯ СЛУЖБА
 ПО ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНОЙ СОБСТВЕННОСТИ

(12) ОПИСАНИЕ ИЗОБРЕТЕНИЯ К ПАТЕНТУ

(52) СПК
C07C 47/228 (2019.05); *C11B 9/0061* (2019.05); *C11D 3/50* (2019.05)

(21)(22) Заявка: 2017113160, 09.10.2015

(24) Дата начала отсчета срока действия патента:
 09.10.2015

Дата регистрации:
 19.08.2019

Приоритет(ы):

(30) Конвенционный приоритет:
 10.11.2014 CN PCT/CN2014/090675

(43) Дата публикации заявки: 14.12.2018 Бюл. № 35

(45) Опубликовано: 19.08.2019 Бюл. № 23

(85) Дата начала рассмотрения заявки РСТ на
 национальной фазе: 13.06.2017

(86) Заявка РСТ:
 EP 2015/073374 (09.10.2015)

(87) Публикация заявки РСТ:
 WO 2016/074865 (19.05.2016)

Адрес для переписки:
 191036, Санкт-Петербург, а/я 24,
 "НЕВИНПАТ"

(72) Автор(ы):
 БОМГАРТНЕР Коринн (CH),
 ДЭВЕ Поль Николя (CH),
 ЦЗОУ Юэ (CN)

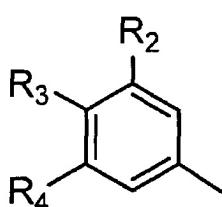
(73) Патентообладатель(и):
 ЖИВОДАН СА (CH)

(56) Список документов, цитированных в отчете
 о поиске: US 5527769 A1, 18.06.1996. DE
 3703584 A, 18.08.1988. Skouroumounis, G. et al.
Synthesis of 1,3,4,5-Tetrahydro-2-benzoxepin Derivatives as Conformationally Restricted Analogues of cyclamenaldehyde-type compounds and as intermediates for highly odour-active homologues. Helvetica Chimica Acta, 1996, 79(4), 1095-1109. Chen, H. et al. *Facile Synthesis* (см.
 прод.)

(54) СОЕДИНЕНИЯ НА ОСНОВЕ ФЕНИЛА, ЗАМЕЩЕННОГО АЛЬДЕГИДНЫМИ ФРАГМЕНТАМИ, И ИХ ПРИМЕНЕНИЕ В ПАРФЮМЕРИИ

(57) Реферат:

Настоящее изобретение относится к новому соединению, представленному формулой 2:



Формула 2

где R₂ представляет собой H или, когда R₃ представляет собой H, тогда R₂ представляет собой CHR₅CHR₆CHO, CR₅=CR₆CHO или C(CH₃)CHO, где R₅, R₆ каждый независимо может представлять собой H или метил; R₃ представляет собой H или, когда R₂ представляет собой H, тогда R₃ представляет собой CHR₅CHR₆CHO, CR₅=CR₆CHO или C(CH₃)CHO, где R₅, R₆ каждый независимо может представлять собой H или метил; и R₄ представляет собой разветвленный

2 6 9 7 7 0 8 C 2

R U 2 6 9 7 7 0 8 C 2

R U 2 6 9 7 7 0 8 C 2

R U 2 6 9 7 7 0 8 C 2

или линейный, насыщенный или ненасыщенный, незамещенный или замещенный C_2 - C_7 -алкильный или C_2 - C_7 алкенильный остаток, предпочтительно

изобутил, изоамил, являющемуся полезным в средствах личной гигиены или в бытовых средствах ухода. 6 н. и 7 з.п. ф-лы, 1 табл., 5 пр.

(56) (продолжение):

of (E)-Alkenyl Aldehydes from Allyl Arenes or Alkenes via Pd(II)-Catalyzed Direct Oxygenation of Allylic C–H Bond. *Organic Letters*, 2011, 13(5), 992-994. WO 2009027957 A2, 05.03.2009. SU 979322 A1, 07.12.1982.

R U
2 6 9 7 7 0 8

R U
2 6 9 7 7 0 8

RUSSIAN FEDERATION



(19) RU (11) 2 697 708⁽¹³⁾ C2

(51) Int. Cl.
C07C 47/228 (2006.01)
C11B 9/00 (2006.01)
C11D 3/50 (2006.01)

FEDERAL SERVICE
FOR INTELLECTUAL PROPERTY

(12) ABSTRACT OF INVENTION

(52) CPC
C07C 47/228 (2019.05); *C11B 9/0061* (2019.05); *C11D 3/50* (2019.05)

(21)(22) Application: 2017113160, 09.10.2015

(24) Effective date for property rights:
09.10.2015

Registration date:
19.08.2019

Priority:

(30) Convention priority:
10.11.2014 CN PCT/CN2014/090675

(43) Application published: 14.12.2018 Bull. № 35

(45) Date of publication: 19.08.2019 Bull. № 23

(85) Commencement of national phase: 13.06.2017

(86) PCT application:
EP 2015/073374 (09.10.2015)

(87) PCT publication:
WO 2016/074865 (19.05.2016)

Mail address:
191036, Sankt-Peterburg, a/ya 24, "NEVINPAT"

(72) Inventor(s):
BOMGARTNER Korinn (CH),
DEVE Pol Nikolya (CH),
TSZOU Yue (CN)

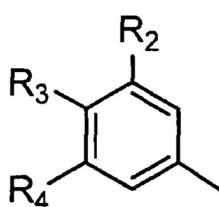
(73) Proprietor(s):
ZHIVODAN SA (CH)

(54) COMPOUNDS BASED ON PHENYL SUBSTITUTED WITH ALDEHYDE FRAGMENTS, AND THEIR USE IN PERFUMES

(57) Abstract:

FIELD: chemistry.

SUBSTANCE: present invention relates to a novel compound of formula 2:



Formula 2

formula 2, where R₂ is H or, when R₃ are H, then R₂ is CHR₅CHR₆CHO, CR₅=CR₆CHO or C(CH₃)CHO, where R₅, R₆ each independently can be H or methyl; R₃ is H or, when R₂ are H, then R₃ is CHR₅CHR₆CHO, CR₅=CR₆CHO or C(CH₃)CHO, where R₅, R₆ each independently can be H or methyl; and R₄ is a branched or linear, saturated or unsaturated, unsubstituted or substituted C₂-C₇-alkyl or C₂-C₇ alkenyl residue, preferably isobutyl, isoamyl.

EFFECT: compound is useful in personal hygiene products or in household care products.

13 cl, 1 tbl, 5 ex

Данное изобретение относится к парфюмерным ингредиентам и парфюмерным препаратам, содержащим эти ингредиенты. В частности, изобретение относится к указанным парфюмерным ингредиентам или парфюмерным препаратам, которые имеют запах зелени, что является важным аспектом запаха ландыша. Еще более 5 конкретно, изобретение относится к указанным парфюмерным препаратам, которые не содержат или по существу не содержат Lilial™. Изобретение дополнительно относится к способам получения указанных парфюмерных ингредиентов и парфюмерных препаратов, а также к применению указанных парфюмерных ингредиентов и парфюмерных препаратов в ароматизаторах с тонким запахом и потребительских 10 продуктах, таких как средства личной гигиены и товары по уходу за домом. Изобретение также относится к указанным ароматизаторам с тонким запахом и потребительским продуктам, содержащим указанные парфюмерные ингредиенты и парфюмерные препараты.

Соединения, имеющие запах ландыша являются очень востребованными

15 парфюмерными ингредиентами. Эти соединения являются важными ингредиентами в базовых композициях с цветочным запахом и могут выступать в качестве гармонизаторов во многих различных типах ароматических композиций. Соединения этого типа широко используют в потребительских товарах, таких как средства личной гигиены и потребительские средства ухода, а также в тонкой парфюмерии, для создания 20 приятных запахов или для маскировки неприятных запахов. Одним из важных аспектов характеристик запаха ландыша является запах зелени, в частности, альдегидный с оттенком зелени или цветочный с оттенком зелени.

Превосходным парфюмерным ингредиентом, который повсеместно ценят за его запах ландыша, является Lilial™. Lilial™ представляет собой пример арил-замещенного 25 алканала, а именно арилзамещенного пропаналя. Более конкретно, он имеет химическое название 3-(4-трет-бутилфенил)-2-метилпропаналь (CAS 80-54-6). Это соединение нашло широкое применение в тонкой парфюмерии, а также в личных и бытовых средствах для ухода. Тем не менее, его использование оказалось под строгим контролем ввиду последних данных о том, что оно оказывает токсическое воздействие на репродуктивные 30 органы самцов крыс и собак. Никаких последствий не было обнаружено при исследованиях на мышах, морских свинках и приматах, тем не менее, в рамках Всемирной гармонизированной системы классификации и маркировки химических веществ (GHS) это соединение классифицируется как материал CMR2 (CMR - вещества, оказывающие канцерогенное и мутагенное влияние, или обладающие репродуктивной 35 токсичностью). Для материалов CMR категории 2 необходимо установить, что количество, предлагаемое для использования, безвредно для потребителей. Учитывая нормативное положение для Lilial™, необходимо заменить его другими ингредиентами.

WO 2010105873 направлен на поиск путей замены Lilial™. Предлагаемое решение состоит в использовании смесей известных ингредиентов, обычно встречающихся в 40 парфюмерной палитре, для воссоздания характеристик запаха, по существу аналогичных характеристикам запаха Lilial™.

Аналогичным образом, в WO 2009027957 предлагают решение, состоящее в получении комбинаций из известных парфюмерных ингредиентов парфюмерной палитры.

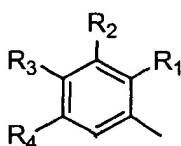
В WO 2013045301 также предлагают решение для замены Lilial™, которое заключается 45 в выборе смесей ингредиентов, включая соединение Lilyflore™ и определенное соединение инданилпропаналя, в сочетании с другими вторичными парфюмерными ингредиентами.

Теперь обнаружены соединения, которые могут быть использованы в качестве

парфюмерных ингредиентов в парфюмерных композициях и потребительских товарах. В частности, были обнаружены соединения, которые обладают требуемым запахом зелени, в частности, альдегидным запахом с оттенком зелени или цветочным запахом с оттенком зелени. В частности, были обнаружены соединения, которые обладают 5 характеристиками запаха, которые могут быть восприняты и признаны парфюмерами как связанные с запахом Lilial™ и, таким образом, могут служить заменителями Lilial™.

Кроме того, эти соединения могут иметь аналогичные или даже улучшенные парфюмерные качества по сравнению с Lilial™. Наконец, были обнаружены соединения, которые не вызывают проблем с нормативами, связанных с Lilial™. В частности, было 10 обнаружено, что парфюмерные ингредиенты на основе арилзамещенного алканала, которые структурно связаны с Lilial™, но содержат заместитель в арильном кольце, расположенный в орто- или мета-положении относительно группы, несущей альдегидную функциональную группу, обладают интересными характеристиками запаха, и, что удивительно, не создают или создают значительно меньшее количество 15 связанных с CMR проблем, которые есть у Lilial™, как показывают данные *in vitro*.

По первому аспекту настоящее изобретение относится к соединению, представленному формулой 1



Формула 1

где

²⁵ R_1 представляет собой H или, когда R_2 и R_3 представляют собой H, тогда R_1 представляет собой CHR_5CHR_6CHO , $CR_5=CR_6CHO$ или $C(CH_3)CHO$, где R_5 , R_6 каждый независимо может представлять собой H или метил;

R_2 представляет собой H или, когда R_1 и R_3 представляют собой H, тогда R_2 представляет собой CHR_5CHR_6CHO , $CR_5=CR_6CHO$ или $C(CH_3)CHO$, где R_5 , R_6 каждый независимо может представлять собой H или метил;

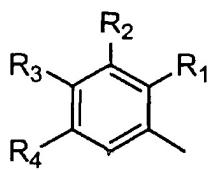
R_3 представляет собой H или, когда R_1 и R_2 представляют собой H, тогда R_3 представляет собой CHR_5CHR_6CHO , $CR_5=CR_6CHO$ или $C(CH_3)CHO$, где R_5 , R_6 каждый независимо может представлять собой H или метил; и

R_4 представляет собой метил или разветвленный или линейный, насыщенный или ненасыщенный, незамещенный или замещенный (возможно циклопропильными группами) C_2-C_7 -алкильный или C_2-C_7 -алкенильный остаток, предпочтительно изобутил, изоамил.

⁴⁰ Соединения по настоящему изобретению обладают специфическим запахом и хорошими рабочими характеристиками, и эти соединения могут быть использованы для воссоздания запаха Lilial™ и, таким образом, могут служить в качестве заменителей для Lilial™.

⁴⁵ Кроме того, соединения по настоящему изобретению могут создавать очень ощутимый и стойкий запах, и также они могут создавать очень ощутимый и стойкий запах ландыша.

Особенно предпочтительным является соединение, представленное формулой 1

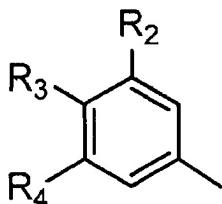
**Формула 1**

где

- 10 R_1 представляет собой Н или, когда R_2 и R_3 представляют собой Н, тогда R_1 представляет собой $C(CH_3)CHO$;
- 15 R_2 представляет собой Н или, когда R_1 и R_3 представляют собой Н, тогда R_2 представляет собой CHR_5CHR_6CHO , $CR_5=CR_6CHO$ или $C(CH_3)CHO$, где R_5 , R_6 каждый независимо может представлять собой Н или метил;
- 20 R_3 представляет собой Н или, когда R_1 и R_2 представляют собой Н, тогда R_3 представляет собой CHR_5CHR_6CHO , $CR_5=CR_6CHO$ или $C(CH_3)CHO$, где R_5 , R_6 каждый независимо может представлять собой Н или метил, и
- 25 R_4 представляет собой метил или разветвленный или линейный, насыщенный или ненасыщенный, незамещенный или замещенный (возможно циклопропильными группами) C_2-C_7 -алкильный или C_2-C_7 -алкенильный остаток, предпочтительно изобутил, изоамил.

По другому аспекту настоящее изобретение относится к соединению,

- 25 представленному формулой 2

**Формула 2**

где

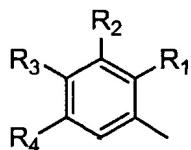
- 35 R_2 представляет собой Н или, когда R_3 представляет собой Н, тогда R_2 представляет собой CHR_5CHR_6CHO , $CR_5=CR_6CHO$ или $C(CH_3)CHO$, где R_5 , R_6 каждый независимо может представлять собой Н или метил;
- 40 R_3 представляет собой Н или, когда R_2 представляет собой Н, тогда R_3 представляет собой CHR_5CHR_6CHO , $CR_5=CR_6CHO$ или $C(CH_3)CHO$, где R_5 , R_6 каждый независимо может представлять собой Н или метил, и
- 45 R_4 представляет собой метил или разветвленный или линейный, насыщенный или ненасыщенный, незамещенный или замещенный (возможно циклопропильными группами) C_2-C_7 -алкильный или C_2-C_7 -алкенильный остаток, предпочтительно изобутил, изоамил.

Соединения, представленные формулой 2, обладают специфическим запахом и хорошими рабочими характеристиками, и эти соединения могут быть использованы

для воссоздания запаха Lilial™ и, таким образом, могут служить в качестве заменителей для Lilial™.

Кроме того, соединения по настоящему изобретению могут создавать очень ощутимый и стойкий запах зелени, и также они могут создавать очень ощутимый и стойкий запах ландыша.

По дополнительному аспекту настоящее изобретение относится к соединению, представленному формулой 3



Формула 3

где

R_1 представляет собой H или когда R_2 и R_3 представляют собой H, тогда R_1 представляет собой $C(CH_3)CHO$;

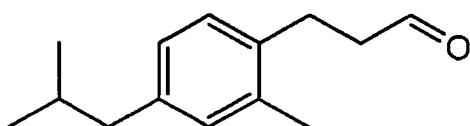
R_2 представляет собой H или когда R_1 и R_3 представляют собой H, тогда R_2 представляет собой $C(CH_3)CHO$;

R_3 представляет собой H или когда R_1 и R_2 представляют собой H, тогда R_3 представляет собой $C(CH_3)CHO$;

R_4 представляет собой метил или разветвленный или линейный, насыщенный или ненасыщенный, незамещенный или замещенный (возможно циклопропильными группами) C_2-C_7 -алкильный или C_2-C_7 -алкенильный остаток, предпочтительно изобутил, изоамил.

Некоторые из соединений по настоящему изобретению, представленные одной из формул 1, 2 или 3, являются особенно выразительными парфюмерными ингредиентами. Выразительность, которой обладает парфюмерный ингредиент, связана с его показателем запаха. Показатель запаха - это отношение давления паров к пороговой концентрации обнаружения.

Некоторые из соединений имеют относительно высокий показатель запаха. Например, соединение со следующей структурой,



у которого заместитель в арильном кольце находится в орто-положении по отношению к группировке с альдегидной группой, имеет показатель запаха 559071.

Родственные парфюмерные ингредиенты сравнительно не выразительны. Например, Lilial™ имеет показатель запаха только 32978, тогда как цикламенальдегид имеет показатель запаха только 21986.

Относительно высокий показатель запаха для нескольких соединений по настоящему изобретению имеет важное значение в том отношении, что существует потребность в стойких и выразительных парфюмерных ингредиентах, которые позволяют парфюмерам создавать требуемые ароматы при более низких концентрациях материалов.

Однако могут представлять интерес также и соединения по настоящему изобретению, имеющие более низкий показатель запаха, благодаря их специальному запаху.

По дополнительному аспекту настоящего изобретения неожиданно было обнаружено,

что некоторые соединения, представленные формулой 2, могут модифицировать запах 3-(4-изобутил-2-метилфенил)пропаналя. Поэтому предпочтительно получать смеси 3-(4-изобутил-2-метилфенил)пропаналя с не более 20% масс. предпочтительно не более 15% масс. и еще более предпочтительно не более 10% масс. общего количества

5 соединений, представленных формулой 2. Предпочтительно количество соединений, представленных формулой 2, в смесях с 3-(4-изобутил-2-метилфенил)пропаналем составляет не более 5% масс., и еще более предпочтительно не более 3,5% масс. Особенно предпочтительно общее количество соединений, представленных формулой 2, составляет не более 1,5% масс.

10 В конкретном аспекте по настоящему изобретению предпочтительно используют смесь из 3-(4-изобутил-2-метилфенил)пропаналя и 3-(2-изобутил-4-метилфенил)пропаналя в массовом соотношении 80:20, особенно предпочтительно 85:15, более предпочтительно 90:10, еще более предпочтительно 95:5.

15 Дополнительно, в конкретном аспекте по настоящему изобретению предпочтительно используют 3-(4-изобутил-2-метилфенил)пропаналь в смесях, содержащих не более 3,5% или даже не более 1,5% по массе 3-(2-изобутил-4-метилфенил)пропаналя.

Однако, при использовании отдельно или в смеси с другими парфюмерными ингредиентами эффективное количество соединений, представленных формулой 2, в частности 3-(2-изобутил-4-метилфенил)пропаналя, может быть значительно выше.

20 Проблемы нормативов, связанные с LilialTM, порождаются тем фактом, что оно разлагается ферментами крыс и собак с образованием трет-бутилбензойной кислоты (т-ББК), которая, как известно, ингибирует синтез глюкозы и синтез жирных кислот *in vitro* (McCune et al, Arch Biochem Biophys (1982) 214 (1): 124-133).

Известно, что трет-бутилбензойная кислота вызывает тестикулярные проявления у 25 самцов крыс (Hunter et al., Food Cosmet, Toxicol., 1965, 3: 289-298, Cagen et al., J. Am. Coll. Toxicol., 1989, 8 (5): 1027-1038). Напротив, соединения по настоящему изобретению не являются или, по меньшей мере, менее восприимчивы к фермент-опосредованной деградации с образованием соответствующих производных бензойной кислот *in vitro*. Это был действительно удивительный результат, учитывая их близкое структурное 30 сходство с LilialTM.

Неожиданное открытие того факта, что парфюмерные ингредиенты на основе арилзамещенных алканалей, которые имеют в кольце заместители, находящиеся в орто-или мета-положении относительно группы, несущей альдегидную функцию, не преобразуются в их соответствующие производные бензойной кислоты или 35 преобразуются в незначительном количестве, дает понимание сути явления, ранее не осознанное специалистами в данном уровне техники, что позволяет парфюмерам использовать класс соединений, которые, хотя и структурно связаны с LilialTM (и, следовательно, обладают заметными ольфакторными свойствами), но к которым тем не менее не предъявляют нормативных претензий.

40 Чтобы изучить метаболизм *in vitro* с помощью гепатоцитов крыс, LilialTM и соединения по настоящему изобретению можно инкубировать в присутствии гепатоцитов крыс в суспензии. Уменьшение концентрации LilialTM и концентрации соединений по настоящему изобретению и образование любого из соответствующих производных бензойной кислоты можно проанализировать с помощью ГХ-МС (газовая хроматография-масс-спектроскопия).

45 В другом аспекте по настоящему изобретению предложено соединение, определенное выше, которое после инкубации с выделенными из крыс гепатоцитами по существу не содержит соответствующей бензойной кислоты - продукта разложения. Под термином

"по существу не содержит" подразумевают, что если продукт разложения присутствует, то его концентрация находится ниже уровня обнаружения, например, составляет менее 1%, более предпочтительно составляет 0-1%. Как таковые, соединения по настоящему изобретению являются очень интересными парфюмерными ингредиентами.

- 5 Соответственно, изобретение обеспечивает в другом своем аспекте использование соединения, определенного выше, в качестве парфюмерного ингредиента. В другом своем аспекте изобретение обеспечивает применение соединения, определенного выше, в парфюмерной композиции, отдельно или в смесях, в качестве замены душистых веществ - арилзамещенных алканалей, более конкретно, душистых веществ - арилзамещенных пропаналей, которые не содержат заместителей в арильном кольце в орто- или мета-положении относительно заместителя, несущего альдегидную функциональную группу, в частности, Lilial™.
- 10

- 15 В другом аспекте по настоящему изобретению предложен способ придания парфюмерной композиции характеристики запаха зелени, причем указанный способ включает стадию включения соединения, определенного выше, в указанную парфюмерную композицию.

В еще одном аспекте по настоящему изобретению предложена парфюмерная композиция, содержащая соединение, определенное выше.

- 20 В еще одном аспекте по настоящему изобретению предложена парфюмерная композиция, обладающая нотами зелени характеристики запаха ландыша, содержащая соединение, определенное выше.

- 25 В еще одном аспекте по настоящему изобретению предложена парфюмерная композиция, содержащая соединение, определенное выше, которая не содержит каких-либо душистых веществ - арилзамещенных пропаналей, не содержащих заместителей в арильном кольце в орто- или мета-положении относительно заместителя, несущего альдегидную функциональную группу, или содержит их в малом количестве, в частности, Lilial™.

- 30 Парфюмерная композиция в соответствии с настоящим изобретением может быть изготовлена полностью из одного или нескольких соединений по настоящему изобретению. Однако, парфюмерная композиция может также содержать, в дополнение к одному или нескольким соединениям по настоящему изобретению, один или несколько дополнительных парфюмерных ингредиентов.

- 35 Соединения по настоящему изобретению могут присутствовать в парфюмерной композиции в любом количестве, в зависимости от конкретного ольфактивного эффекта, который парфюмер желает достичь. В конкретном воплощении по настоящему изобретению парфюмерная композиция по настоящему изобретению может содержать соединения, определенные выше, в количестве 0,1-100 масс. % от массы указанной композиции.

- 40 Если используют один или несколько дополнительных парфюмерных ингредиентов, то они могут быть выбраны из парфюмерных ингредиентов, известных в данной области техники.

- 45 Предпочтительно по меньшей мере один дополнительный парфюмерный ингредиент который может быть использован в парфюмерной композиции, обладает характеристиками запаха ландыша, как 3-(4-изобутил-2-метилфенил)пропаналь.

- 50 В частности, указанные парфюмерные ингредиенты, которые могут быть использованы в парфюмерной композиции в соответствии с изобретением, включают следующие соединения: (E/Z)-9-гидрокси-5,9-диметилдец-4-еналь, 6-метокси-2,6-диметилгептан-1-аль (метоксимелональ), 5,9-диметил-4,8-декадиеналь (геральдегид),

бета-метил-3-(1-метилэтил)бензолпропаналь (флоргидраль), октагидро-8,8-диметилнафталин-2-карбальдегид (цикломираль), альфа-метил-1,3-бензодиоксол-5-пропиональдегид (гелиональ), 5-метил-2-(1-метилбутил)-5-пропил-1,3-диоксан (троенан), 3-(о-этилфенил)-2,2-диметилпропиональдегид (флоралозон), фарнезол, 3,7,11-

- 5 триметилдодека-1,6,10-триен-3-ол, возможно в виде изомерной смеси (неролидол), 2-метил-4-фенилбутан-2-ол (диметилфенилэтилкарбинол), цис-4-(изо-пропил)циклогексанметанол (Mayol), 1-(1-гидроксиэтил)-4-(1-метилэтил)циклогексан (возможно в виде смеси диастереоизомеров) (мугетанол), (4-метил-3-пентенил)циклогексенкарбальдегид (Citrusal), циклогексилсалицилат, гексилсалицилат,
- 10 бензилсалицилат, амилсалицилат, 3-(п-(2-метилпропил) фенил)-2-метилпропиональдегид (сильвиаль), 3-п-куменил-2-метилпропиональдегид (цикламенальдегид), смеси из цистетрагидро-2-изобутил-4-метилпиран-4-ола, транс-тетрагидро-2-изобутил-4-метилпиран-4-ола, (флорола), триэтилцитрат и дипропиленгликоля.

Указанные парфюмерные ингредиенты могут дополнительно включать следующие

- 15 соединения: амилсалицилат (2050-08-0); Aurantiol® (89-43-0); бензилсалицилат (118-58-1); цис-3-гексенилсалицилат (65405-77-8); цитронеллилоксиацетальдегид (7492-67-3); циклемакс (7775-00-0); циклогексилсалицилат (25485-88-5); Cyclomyral® (68738-94-3); цитронеллол (106-22-9); гераниол (106-24-1); циклопентол Нс 937165 (84560-00-9); цималь (103-95-7); дупикаль (30168-23-1); этиллиналоол (10339-55-6); Floral Super (71077-31-1);
- 20 Florhydral® (125109-85-5); Florol® (63500-71-0); Gyrane (24237-00-1); гексилсалицилат (6259-76-3); Helional™ (1205-17-0); гидроксицитронеллаль (107-75-5); линалоол (78-70-6); Lyral® (31906-04-4); Majantol® (103694-68-4); Mayol® (13828-37-0); мелафлер ((68991-97-9); мелональ (106-72-9); мугетанол (63767-86-2); мугезия (56836-93-2); Muguet alcohol (13351-61-6); вердантиол (91-51-0); Peonile® (10461-98-0); Phenoxanol® (55066-48-3);
- 25 Rossitol® (215231-33-7); Silvial® (6658-48-6); Suzural (6658-48-6); Muguol® (18479-57-7); тетрагидролиналол (78-69-3); Acalea (84697-09-6); дигидро-изо-жасмонат (37172-53-5); гексилкоричный альдегид (101-86-0); Hedione® (24851-98-7); ацетоин (513-86-0); адоксаль (141-13-9); Aldolone® (207228-93-1); Ambrocenide® (211299-54-6); амброксан (3738-00-9); Azurone® (362467-67-2); Bacdanol® (28219-61-6); Calone 1951 ® (28940-11-6); Cetalox® (3738-00-9); коричный спирт (104-54-1); цитраль (5392-40-5); циклабут (67634-20-2); Cyclacet™ (5413-60-5); Cyclaprop™ (17511-60-3); циклогексадеканолид (109-29-5); циклогексадеценон (3100-36-5); циклопентадеканон (507-72-7); дамаскон дельта (57378-68-4); Ebanol® (67801-20-1); элинтааль форте (40910-49-4); этилванилини (121-32-4); этиленбрассилат (105-95-3); экзальтенон 942008 (14595-54-1); экзальтолид тотал 935985
- 30 (106-02-5); флоралозон (67634-14-4); фрукталат (72903-27-6); гамма-декалактон (706-14-9); хабанолид (111879-80-2); Helvetolide® (141773-73-1); гексаметилинданопиран (1222-05-5); Hydroxyambran®(118562-73-5); Iso E Super® (54464-57-2); изо-гексенилциклогексенилкарбоксальдегид (37677-14-8); джасмаль (1887-1-14-2); Javanol® (198404-98-7); лауриновый альдегид (112-54-9); мефраналь (55066-49-4); мусценон (63314-79-4);
- 35 Tonalid® (1506-02-1); Nectaryl® (95962-14-4); норлимбанол (70788-30-6); парагидроксифенилбутанон (5471-51-2); пино ацетальдегид (33885-51-7); Romandolide® (236391-76-7); санджинол (28219-61-6); Silvanone® Supra (109-29-5/507-72-7); терpineол (8000-41-7); ванилин (121-33-5) и Velvione® (37609-25-9), где цифры в круглых скобках представляют собой номера CAS.
- 40

- 45 Парфюмерная композиция не должна быть ограничена перечисленными выше парфюмерными ингредиентами. Можно использовать другие парфюмерные ингредиенты, обычно используемые в парфюмерии, например любой из ингредиентов, описанных в книге "Perfume and Flavour Chemicals", S. Arctander, Allured Publishing

Corporation, 1994, IL, USA, которая включена в настоящее описание посредством ссылки, включая эфирные масла, растительные экстракты, абсолюты, резиноиды, одоранты, полученные из натуральных продуктов, и тому подобное.

Парфюмерные ингредиенты, содержащиеся в указанной парфюмерной композиции,

5 описаны выше, но конечно, парфюмерная композиция может не ограничиваться указанными ингредиентами. В частности, парфюмерные смеси могут содержать вспомогательные вещества, которые обычно используют в парфюмерных композициях.

Термин "вспомогательные вещества" относится к ингредиенту, который может быть использован в парфюмерной композиции по причинам, отличным или не специфически

10 связанным с ольфакторным действием композиции. Например, вспомогательное вещество может представлять собой ингредиент, который выступает в качестве вспомогательного средства для обработки парфюмерного ингредиента или ингредиентов или композиции, содержащей указанный ингредиент (ингредиенты), или он может улучшить обработку или хранение парфюмерного ингредиента или композиции,

15 содержащей этот ингредиент. Оно также может представлять собой ингредиент, который обеспечивает дополнительные преимущества, например придает цвет или текстуру. Оно также может представлять собой ингредиент, который придает светостойкость или химическую стабильность одному или нескольким ингредиентам, содержащимся в парфюмерном ингредиенте или парфюмерной композиции, содержащей этот

20 ингредиент. Подробное описание природы и типа вспомогательных веществ, обычно используемых в парфюмерной смеси или парфюмерных композициях, содержащих эту смесь, не может быть исчерпывающим, но следует отметить, что указанные ингредиенты хорошо известны специалисту в данной области техники. Примеры вспомогательных веществ включают в себя растворители и сорасторители; поверхностно-активные

25 вещества и эмульгаторы; модификаторы вязкости и реологических свойств; загущающие и желирующие агенты; консервирующие вещества; пигменты, красители и подкрашивающие вещества; разбавители, наполнители и усиливающие агенты; стабилизаторы против вредного воздействия тепла и света, наполнителей, подкислителей, буферных агентов и антиоксидантов.

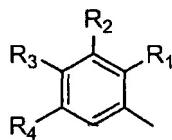
30 Кроме того, любые один или более парфюмерных ингредиентов или вспомогательных веществ, используемых в настоящем изобретении, могут быть включены в состав носителя, если это необходимо для обеспечения желаемого эффекта. Носители могут включать инкапсуляты. В качестве альтернативы, носитель может представлять собой твердый носитель, например, полимерный материал-носителя, с которым могут быть

35 химически или физически связаны один или более парфюмерных ингредиентов или вспомогательных веществ. Кроме того, один или более парфюмерных ингредиентов или вспомогательных веществ могут быть растворены или диспергированы в материале матрицы, который служит для регулирования скорости, с которой указанный ингредиент или ингредиенты выделяется из него. В еще одном альтернативном воплощении один

40 или более ингредиентов или вспомогательных веществ могут быть нанесены на пористую подложку, такую как циклодекстрин или цеолит, или другой неорганический материал. В еще одном воплощении один или более парфюмерных ингредиентов могут быть представлены в виде предшественника душистого вещества, который реагирует в подходящей среде, контролируя высвобождая парфюмерный ингредиент.

45 Предпочтительно, в случае, если дополнительные парфюмерные ингредиенты несут карбонильную функциональную группу, то соответствующий предшественник душистого вещества является продуктом реакции первичного и/или вторичного аминового соединения и парфюмерного ингредиента.

В частности, предпочтительно такой предшественник душистого вещества, также известный как предшественник ароматического вещества является продуктом реакции подходящего аминового соединения и соединения, представленного формулой 1,



Формула 1

10 где

R_1 представляет собой H или, когда R_2 и R_3 представляют собой H , тогда R_1 представляет собой $\text{CHR}_5\text{CHR}_6\text{CHO}$, $\text{CR}_5=\text{CR}_6\text{CHO}$ или $\text{C}(\text{CH}_3)\text{CHO}$, где R_5 , R_6 каждый независимо может представлять собой H или метил;

15 R_2 представляет собой H или, когда R_1 и R_3 представляют собой H , тогда R_2 представляет собой $\text{CHR}_5\text{CHR}_6\text{CHO}$, $\text{CR}_5=\text{CR}_6\text{CHO}$ или $\text{C}(\text{CH}_3)\text{CHO}$, где R_5 , R_6 каждый независимо может представлять собой H или метил;

20 R_3 представляет собой H или, когда R_1 и R_2 представляют собой H , тогда R_3 представляет собой $\text{CHR}_5\text{CHR}_6\text{CHO}$, $\text{CR}_5=\text{CR}_6\text{CHO}$ или $\text{C}(\text{CH}_3)\text{CHO}$, где R_5 , R_6 каждый независимо может представлять собой H или метил; и

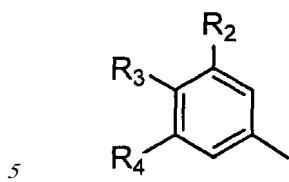
25 R_4 представляет собой метил или разветвленный или линейный, насыщенный или ненасыщенный, незамещенный или замещенный (возможно циклопропильными группами) $\text{C}_2\text{-C}_7$ -алкильный или $\text{C}_2\text{-C}_7$ -алкенильный остаток, предпочтительно изобутил, изоамил.

25 В результате такой реакции могут быть получены различные продукты, например, соответствующие имин, енамин, полуаминаль или аминаль.

Подходящее аминовое соединение для образования вышеуказанного предшественника душистого вещества может быть выбрано из группы, состоящей из ароматических аминов, в частности, метил 2-аминобензоата (метилантранилата), 2-аминоацетофенона, орто-, мета- или пара-аминобензоатов; первичных или вторичных алифатических аминов, предпочтительно $\text{C}_8\text{-C}_{30}$ линейных или разветвленных алкиламинов или алкилдиаминов; эфираргинов; этилен- и пропиленаминов; аминокислот и их производных; полиаминов, в частности первичных и вторичных полизифираминов, 35 полиэтилениминов, полипропилениминов, полиамидоаминов, полиаминокислот, поливиниламинов, поли(этиленгликоль) бис-(аминов), аминозамещенных поливиниловых спиртов; N-(3-аминопропил) имидазола, никекотамида, скатола и индола.

Предшественник душистого вещества подходит для высвобождения соединения, представленного формулой 1, как оно определено выше.

40 В предпочтительном воплощении такой предшественник душистого вещества, также известный как предшественник ароматического вещества, представляет собой продукт реакции между подходящим аминовым соединением и соединением, представленным формулой 2,



Формула 2

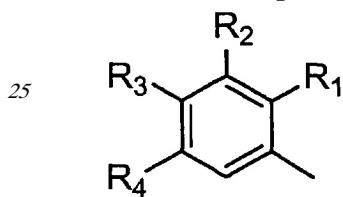
где

R₂ представляет собой H или, когда R₃ представляет собой H, тогда R₂ представляет собой CHR₅CHR₆CHO, CR₅=CR₆CHO или C(CH₃)CHO, где R₅, R₆ каждый независимо может представлять собой H или метил;

10 R₃ представляет собой H или, когда R₂ представляет собой H, тогда R₃ представляет собой CHR₅CHR₆CHO, CR₅=CR₆CHO или C(CH₃)CHO, где R₅, R₆ каждый независимо может представлять собой H или метил; и

15 R₄ представляет собой метил или разветвленный или линейный, насыщенный или ненасыщенный, незамещенный или замещенный (возможно циклопропильными группами) C₂-C₇-алкильный или C₂-C₇-алкенильный остаток, предпочтительно изобутил, изоамил.

20 В другом предпочтительном воплощении такой предшественник душистого вещества представляет собой продукт реакции между подходящим аминовым соединением и соединением, представленным формулой 3,



Формула 3

где

R₁ представляет собой H или когда R₂ и R₃ представляют собой H, тогда R₁ представляет собой C(CH₃)CHO;

30 R₂ представляет собой H или когда R₁ и R₃ представляют собой H, тогда R₂ представляет собой C(CH₃)CHO;

R₃ представляет собой H или когда R₁ и R₂ представляют собой H, тогда R₃ представляет собой C(CH₃)CHO; и

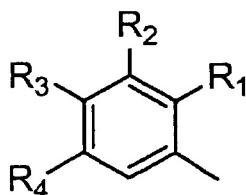
35 R₄ представляет собой метил или разветвленный или линейный, насыщенный или ненасыщенный, незамещенный или замещенный (возможно циклопропильными группами) C₂-C₇-алкильный или C₂-C₇-алкенильный остаток, предпочтительно изобутил, изоамил.

40 Альтернативно, предшественник душистого вещества, подходящий для высвобождения соединения формулы 1, в частности соединений формул 2 или 3, может быть представлен как продукт реакции конденсации по Кновенагелю или продукт альдольной конденсации, или как окислительно расщепляемый предшественник душистого вещества (например, производное 2-алкил-1-(4-(4-метоксифенил)бут-3-ен-1-ил)-4-метилбензола или производное 3-алкил-1-(4-(4-метоксифенил)бут-3-ен-1-ил)-5-

метилбензола), или ацеталь или полуацеталь.

Принимая во внимание вышесказанное, следует иметь в виду, что парфюмерная композиция может, по меньшей мере частично, находиться в твердой форме, в форме геля, в форме пены и/или в жидкой форме. Если она представлена в твердой форме,
5 тогда она может иметь форму гранул, порошка или таблеток.

Настоящее изобретение обеспечивает в другом своем аспекте ароматизатор с тонким запахом или потребительский продукт, такой как композиция для средств личной гигиены или для бытовых средств ухода, которые ароматизированы соединением, представленным формулой 1,



Формула 1

где

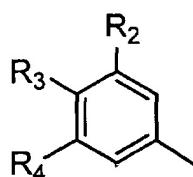
R_1 представляет собой Н или, когда R_2 и R_3 представляют собой Н, тогда R_1 20 представляет собой CHR_5CHR_6CHO , $CR_5=CR_6CHO$ или $C(CH_3)CHO$, где R_5 , R_6 каждый независимо может представлять собой Н или метил;

R_2 представляет собой Н или, когда R_1 и R_3 представляют собой Н, тогда R_2 представляет собой CHR_5CHR_6CHO , $CR_5=CR_6CHO$ или $C(CH_3)CHO$, где R_5 , R_6 каждый независимо может представлять собой Н или метил;

R_3 представляет собой Н или, когда R_1 и R_2 представляют собой Н, тогда R_3 представляет собой CHR_5CHR_6CHO , $CR_5=CR_6CHO$ или $C(CH_3)CHO$, где R_5 , R_6 каждый независимо может представлять собой Н или метил; и

R_4 представляет собой метил или разветвленный или линейный, насыщенный или 30 ненасыщенный, незамещенный или замещенный (возможно циклопропильными группами) C_2-C_7 -алкильный или C_2-C_7 -алкенильный остаток, предпочтительно изобутил, изоамил.

В конкретном воплощении по настоящему изобретению предложен ароматизатор с тонким запахом или потребительский продукт, такой как композиция для средств личной гигиены или бытовых средств ухода, которые ароматизированы соединением, 35 представленным формулой 2,



Формула 2

где

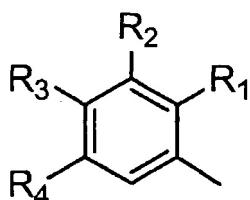
R_2 представляет собой Н или, когда R_3 представляет собой Н, тогда R_2 представляет собой CHR_5CHR_6CHO , $CR_5=CR_6CHO$ или $C(CH_3)CHO$, где R_5 , R_6 каждый независимо может представлять собой Н или метил;

R₃ представляет собой H или, когда R₂ представляет собой H, тогда R₃ представляет собой CHR₅CHR₆CHO, CR₅=CR₆CHO или C(CH₃)CHO, где R₅, R₆ каждый независимо может представлять собой H или метил; и

R₄ представляет собой метил или разветвленный или линейный, насыщенный или ненасыщенный, незамещенный или замещенный (возможно циклопропильными группами) C₂-C₇-алкильный или C₂-C₇-алкенильный остаток, предпочтительно изобутил, изоамил.

В другом конкретном воплощении по настоящему изобретению предложен

ароматизатор с тонким запахом или потребительский продукт, такой как композиция для средств личной гигиены или бытовых средств ухода, которые ароматизированы соединением, представленным формулой 3,



Формула 3

где

R₁ представляет собой H или когда R₂ и R₃ представляют собой H, тогда R₁ представляет собой C(CH₃)CHO;

R₂ представляет собой H или когда R₁ и R₃ представляют собой H, тогда R₂ представляет собой C(CH₃)CHO;

R₃ представляет собой H или когда R₁ и R₂ представляют собой H, тогда R₃ представляет собой C(CH₃)CHO; и

R₄ представляет собой метил или разветвленный или линейный, насыщенный или ненасыщенный, незамещенный или замещенный (возможно циклопропильными группами) C₂-C₇-алкильный или C₂-C₇-алкенильный остаток, предпочтительно изобутил, изоамил.

В еще более конкретных воплощениях по настоящему изобретению предложен ароматизатор с тонким запахом или потребительский продукт, такой как композиция для средств личной гигиены или бытовых средств ухода, который ароматизирован одним или более соединениями, выбранными из 3-(3-изобутил-5-метилфенил)пропаналя, 3-(2-изобутил-4-метилфенил)пропаналя, (E)-3-(2-изобутил-4-метилфенил)акрилового альдегида и 2-(2-изобутил-4-метилфенил)пропаналя.

Соединения, определенные выше, при добавлении в ароматизатор с тонким запахом или потребительский продукт, такой как композиции для средств личной гигиены или бытовых средств ухода, придают указанным композициям характерный запах, предпочтительно запах зелени. В соответствии с другим аспектом настоящего изобретения предлагается способ придания специфических характеристик запаха, предпочтительно характеристик запаха зелени, ароматизатору с тонким запахом или потребительскому продукту, такому как композиция для средств личной гигиены или бытовых средств ухода, включающей стадию добавления в указанную композицию соединения, определенного выше, или парфюмерной композиции, содержащей указанное соединение.

В еще одном аспекте по настоящему изобретению предложен способ приятия специфических характеристик запаха, в частности, характеристик запаха зелени ароматизатору с тонким запахом или потребительскому продукту, такому как композиция для средств личной гигиены или бытовых средств ухода, включающий 5 стадию селективного добавления к указанному ароматизатору с тонким запахом или потребительскому продукту определенного выше соединения - арилзамещенного алканала и селективное исключение из указанного ароматизатора с тонким запахом или потребительского продукта любых соединений - арилзамещенных алканалей, которые не содержат заместители в арильном кольце, расположенные в орто- или мета- 10 положениях относительно заместителя, несущего альдегидную функциональную группу.

В еще одном аспекте по настоящему изобретению предложен способ приятия специфических характеристик запаха, в частности, характеристик запаха зелени ароматизатору с тонким запахом или потребительскому продукту, такому как композиция для средств личной гигиены или бытовых средств ухода, включающий 15 стадию селективного добавления к указанному ароматизатору с тонким запахом или потребительскому продукту определенного выше соединения - арилзамещенного алканала и селективное исключение из указанного ароматизатора с тонким запахом или потребительского продукта любых соединений - арилзамещенных алканалей, которые не содержат заместители в арильном кольце, расположенные в орто- или мета- 20 положениях относительно заместителя, несущего альдегидную функцию, причем указанное селективное добавление или исключение основано на подверженности указанных соединений к ферментативно-опосредованному разложению до их производных бензойной кислоты при инкубации с гепатоцитами, выделенными из крыс, причем указанные соединения являются пригодными для добавления исходя из того, 25 что они не разлагаются до их производных бензойной кислоты в условиях испытаний, тогда как указанные соединения подлежат исключению исходя из того, что они разлагаются до их производных бензойной кислоты в условиях испытаний.

В еще одном аспекте по настоящему изобретению предложена парфюмерная композиция, включающая соединение - арилзамещенный алканаль, которое содержит 30 заместители в арильном кольце, расположенные в орто- или мета-положениях относительно заместителя, несущего альдегидную функциональную, в подходящем контейнере, с нанесенной на него маркировкой, что указанная композиция не содержит какое-либо соединение, классифицирующееся как материал CMR2.

Потребительские продукты, такие как композиции для средств личной гигиены или 35 бытовых средств ухода, включают следующие продукты (но не ограничиваются ими): средство для обработки текстильных изделий, средство для глажения, средство для чистки одежды, моющее средство для стирки, чистящее средство, в частности, для твердых и/или мягких поверхностей, бытовое чистящее средство, средство для ухода, моющее средство для ухода, средство для бережной стирки, ароматизатор для 40 помещений, освежитель воздуха, кондиционер, краска, кондиционер для текстильных изделий, кондиционирующий субстрат, фармацевтическая продукция, средство для защиты растений, полирующее средство, пищевой продукт, косметический продукт, удобрение, строительный материал, kleящее вещество, отбелитель, средство для удаления накипи, средство для ухода за автомобилем, средство для ухода за напольным 45 покрытием, средство для ухода за кухонной плитой, средство для ухода за кожей, средство для ухода за мебелью, губка для мытья посуды, дезинфицирующее средство, ароматизатор, средство для удаления плесени и/или предшественники вышеуказанных продуктов.

Специалист в данной области полностью осведомлен о применяемости парфюмерных ингредиентов и композиций для ароматизаторов с тонким запахом, а также о всех вариантах применения потребительских продуктов, таких как композиции для средств личной гигиены или бытовых средств ухода, и очень подробное описание таких

5 композиций здесь не оправдано. Однако особые композиции, которые могут быть упомянуты, включают чистящие композиции; композиции для ухода за автомобилем; косметические композиции; композиции для обработки текстильных изделий, композиции для освежения и ароматизации воздуха.

Чистящие средства включают следующее.

10 Чистящие средства для туалетов или чистящие средства для унитазов, другими словами, средства для очистки унитазов и писсуаров, причем эти продукты поставляют предпочтительно в виде порошков, блоков, таблеток или жидкостей, предпочтительно гелей. Помимо других типичных ингредиентов, таких как поверхностно-активные вещества, они обычно включают органические кислоты, например, лимонную кислоту 15 и/или молочную кислоту, или гидросульфат натрия, сульфаминовую кислоту или фосфорную кислоту для удаления известкового налета или отложений мочевины.

Чистящие средства для труб или чистящие средства для сточных труб. Это типично сильнощелочные продукты, которые обычно служат для удаления в трубах засоров, включающих органические материалы, такие как волосы, жиры, остатки пищи, 20 отложения мыла и тому подобное. Добавки порошка Al или Zn могут служить для образования газообразного H₂, что обеспечивает эффект всепенивания. Возможными ингредиентами обычно являются щелочи, соли щелочных металлов, окисляющие агенты и нейтральные соли. Фасовки в виде порошка предпочтительно также включают нитрат натрия и хлорид натрия. Чистящие средства для труб в жидкой форме могут 25 предпочитительно также включать гипохлорит. Существуют также чистящие средства для сточных труб на основе ферментов. Кислотосодержащие продукты также возможны.

Универсальные или многоцелевые чистящие средства или чистящие средства общего назначения. Это чистящие средства, которые можно использовать универсально для влажной чистки всех твердых поверхностей в домашнем хозяйстве и в торговле. Вообще 30 говоря, они представляют собой нейтральные, слабощелочные или слабокислые продукты, предпочтительно в жидкой форме. Универсальные чистящие средства или чистящие средства общего назначения обычно содержат поверхностно-активные вещества, моющие компоненты, растворители и гидротропные вещества, красители, консерванты и т.п.

35 Универсальные чистящие средства со специальными дезинфицирующими свойствами. Они дополнительно включают активные противомикробные ингредиенты (например, альдегиды, спирты, четвертичные аммониевые соединения, амфотерные поверхностно-активные вещества, триклозан).

Санитарные чистящие средства. Это продукты для уборки в ванной и туалете. 40 Щелочные санитарные чистящие средства используют предпочтительно для удаления жировых загрязнений, в то время как кислые санитарные чистящие средства используют, в частности, для удаления известкового налета. Санитарные чистящие средства преимущественно также обладают значительным дезинфицирующим действием, особенно сильнощелочные гигиенические чистящие средства, которые содержат хлор.

45 Чистящие средства для духовых шкафов или чистящие средства для гриля, которые могут поставлять в виде гелей или пенных аэрозолей. Они обычно служат для удаления сгоревших или обугленных остатков пищи. В чистящих средствах для духовых шкафов предпочтительно используют сильнощелочную композицию, которая содержит,

например, гидроксид натрия, метасиликат натрия или 2-аминоэтанол. Кроме того, они обычно содержат анионные и/или неионогенные поверхностно-активные вещества, водорастворимые растворители и, в некоторых случаях, загустители, такие как поликарбоксилаты и карбоксиметилцеллюлоза.

Полироли для металлов. Эти чистящие средства предназначены для конкретных типов металлов, таких как нержавеющая сталь или серебро. Чистящие средства для нержавеющей стали предпочтительно содержат помимо кислот (предпочтительно до 3% масс, например, лимонной кислоты или молочной кислоты) поверхностно-активные вещества (в частности, до 5% масс, предпочтительно неионогенных и/или анионных поверхностно-активных веществ), а также воду и растворители (предпочтительно до 15% масс.) для удаления жировых загрязнений, а также другие соединения, такие как загустители и консерванты. В полироли для предпочтительно светлых поверхностей из нержавеющей стали включают дополнительно очень мелкие полирующие структуры. В состав полиролей для серебра, в свою очередь, могут входить кислоты. В частности, для удаления черных отложений сульфида серебра добавляют предпочтительно комплексообразующие агенты (например, тиомочевину или тиосульфат натрия). Типичными формами изготовления являются полировочные салфетки, ванны для окунания, пасты и жидкости. Темные пятна (оксидные слои) удаляют с помощью чистящих средств для меди и чистящих средств для цветных металлов (например, для латуни и бронзы). Они обычно имеют слабощелочной состав (предпочтительно содержат аммиак), и обычно содержат полирующие средства, а также предпочтительно аммониевые мыла и/или комплексообразующие агенты.

Чистящие средства для стекла и чистящие средства для мытья окон. Эти продукты служат предпочтительно для удаления загрязнений, особенно жировых загрязнений, со стеклянных поверхностей. Предпочтительно они содержат соединения, такие как анионные и/или неионогенные поверхностно-активные вещества (в частности, до 5% масс.), аммиак и/или этаноламин (в частности, до 1% масс.), этанол и/или 2-пропанол, гликольэфиры (в частности, 10-30% масс.), воду, консерванты, красители, противотуманные средства и тому подобное.

Чистящие средства специального назначения, например, для стеклокерамических варочных поверхностей, а также для чистки ковров и пятновыводители.

Средства по уходу за автомобилем включают:

защитные средства для лакокрасочного покрытия, полироли для лакокрасочного покрытия, чистящие средства для лакокрасочного покрытия, защитные средства при мойке, шампуни для мытья автомобилей, продукты для натирания воском и мытья автомобилей, полироли для металлической отделки, защитные пленки для металлической отделки, очистители для пластмасс, средства удаления смол, очистители для ветрового стекла, очистители для двигателя и т.п.

Косметические средства включают:

(а) косметические средства для ухода за кожей, в частности, средства для ванн, средства для мытья и чистки кожи, средства для ухода за кожей, косметика для глаз, средства для ухода за губами, средства для ухода за ногтями, средства интимной гигиены, средства для ухода за ногами;

(б) косметические средства со специальными эффектами, в частности, солнцезащитные средства, средства от загара, депигментирующие средства, дезодоранты, антиперспиранты, средства для удаления волос, средства для бритья, духи;

(в) косметические средства для ухода за зубами, в частности, средства для ухода за зубами и полостью рта, средства для ухода за зубами, чистящие средства для зубных

протезов, клеи для зубных протезов; и

(г) косметические средства по уходу за волосами, в частности, шампуни для волос, средства по уходу за волосами, средства для укладки волос, средства для формирования волос и средства для окрашивания волос.

5 Средства для обработки текстиля включают:

моющие средства или кондиционеры для текстильных изделий, например, в жидкой или твердой форме.

Освежители воздуха и ароматизаторы для помещений включают:

Средства, которые содержат предпочтительно летучие и, как правило, приятные для 10 осознания соединения, которые с успехом могут даже в очень небольших количествах маскировать неприятные запахи. Освежители воздуха для жилых помещений содержат, в частности, натуральные и синтетические эфирные масла, такие как хвойные масла, цитрусовое масло, эвкалиптовое масло, лавандовое масло и тому подобное, в количестве, например, до 50% масс. Средства в виде аэрозолей, как правило, содержат меньшее 15 количество таких эфирных масел, например, менее 5% масс. или менее 2% масс., но дополнительно включают такие соединения, как ацетальдегид (в частности, менее 0,5% масс.), изопропиловый спирт (в частности, менее 5% масс., минеральное масло (в частности, менее 5% масс.) и пропелланты. Другие презентационные формы включают палочки и блоки. Их производят обычно, используя гелевый концентрат, содержащий 20 эфирные масла. Можно также добавлять формальдегид (для консервации) и хлорофилл (предпочтительно менее 5% масс.), а также дополнительные ингредиенты. Освежители воздуха, однако, не ограничены применением в жилых помещениях, их также можно применять для автомобилей, шкафов, посудомоечных машин, холодильников, обуви, и даже для пылесосов. В домашнем хозяйстве (например, в шкафах), например в 25 дополнение к средствам для улучшения запаха, применяют также дезинфицирующие средства, содержащие предпочтительно такие соединения, как фосфат кальция, тальк, стеарин и эфирные масла, причем этим продуктам придают форму, например, пакетиков.

Композиции для потребительских продуктов, упомянутые выше, особенно те, которые используют для стирки или чистки, могут содержать одно или несколько из следующих 30 веществ:

моющие субстанции, поверхностно-активные вещества, ферменты, отбеливающие агенты, такие как предпочтительно органические и/или неорганические пероксидные соединения, пероксидные активаторы, смешиваемые с водой органические растворители, комплексообразующие агенты, электролиты, регуляторы pH, загустители и другие 35 вспомогательные средства, такие как грязеотталкивающие активные вещества, оптические отбеливатели, ингибиторы потемнения, ингибиторы переноса цвета, регуляторы пенообразования и красители.

Поверхностно-активное вещество включает анионные поверхностно-активные вещества, неионогенные поверхностно-активные вещества и их смеси, а также катионные 40 поверхности-активные вещества. Подходящими неионогенными поверхностно-активными веществами являются, в частности, продукты этоксилирования и/или пропоксилирования алкилгликозидов и/или линейных или разветвленных спиртов, каждый из которых содержит от 12 до 18 атомов углерода в алкильной части и от 3 до 20, предпочтительно от 4 до 10 алкилэфирных групп. Также пригодны соответствующие 45 продукты этоксилирования и/или пропоксилирования N-алкиламинов, вицинальных диолов, сложных эфиров жирных кислот и амидов жирных кислот, которые, в терминах алкильной части, соответствуют указанным выше длинноцепочечным спиртовым производным, и алкилфенолов, имеющих от 5 до 12 атомов углерода в алкильном

остатке.

Подходящие анионные поверхностно-активные вещества включают мыла и те вещества, которые имеют сульфатные или сульфонатные группы, содержащие предпочтительно ионы щелочных металлов в качестве катионов. Мыла включают 5 щелочные соли насыщенных или ненасыщенных жирных кислот, имеющих от 12 до 18 атомов углерода. Такие жирные кислоты можно также использовать в частично нейтрализованной форме. Среди пригодных для использования поверхностно-активных веществ сульфатного типа являются соли полуэфиров серной кислоты с жирными спиртами, имеющими от 12 до 18 атомов углерода, и сульфатированные продукты 10 вышеуказанных неионогенных поверхностно-активных веществ, имеющих низкую степень этоксилирования. Среди пригодных для использования поверхностно-активных веществ сульфонатного типа являются линейные алкилбензолсульфонаты, имеющие от 9 до 14 атомов углерода в алкильной части, алкансульфонаты, имеющие от 12 до 18 атомов углерода, и олефисульфонаты, имеющие от 12 до 18 атомов углерода, которые 15 образуются в результате реакции соответствующих моноолефинов с триоксидом серы, а также сульфированные по альфа-положению сложные эфиры жирных кислот, которые образуются при сульфировании метиловых или этиловых эфиров жирных кислот.

Катионные поверхностно-активные вещества включают эстеркваты и/или четвертичные аммониевые соединения (QAC). Четвертичные аммониевые соединения 20 могут быть получены взаимодействием третичных аминов с алкилирующими агентами, такими как метилхлорид, бензилхлорид, диметилсульфат, додецилбромид, а также этиленоксид. Алкилирование третичных аминов, имеющих длинный алкильный остаток и две метильные группы, происходит особенно легко, а также кватернизация третичных аминов, имеющих два длинных остатка и одну метильную группу, также может быть 25 проведена с помощью метилхлорида в мягких условиях. Амины, которые имеют три длинных алкильных остатка или гидроксизамещенные алкильные остатки, обладают низкой реакционной способностью и кватернируются, например, с помощью диметилсульфата. Подходящими четвертичными аммониевыми соединениями являются, например, хлорид бензалкония (хлорид N-алкил-N,N-диметилбензиламмония), бензалкон 30 Б (хлорид м,п-дихлорбензилдиметил-C₁₂-алкиламмония), хлорид бензоксония (хлорид (бензилдодецилбис-(2-гидроксиэтил)аммония), бромид цетримония (бромид N-гексадецил-N,N-триметиламмония), хлорид бензетония (хлорид N,N-диметил-N-[2-[2-[п-(1,3,3-тетраметилбутил)фенокси]этокси]этил] бензиламмония), хлориды 35 диалкилдиметиламмония, такие как хлорид ди-н-декилдиметиламмония, бромид дидецилдиметиламмония, хлорид диоктилдиметиламмония, хлорид 1-цетилпиридиния и йодид тиазолина, а также их смеси. Предпочтительными четвертичными аммониевыми соединениями являются хлориды бензалкония, имеющие C₈-C₂₂-алкильные остатки, в частности C₁₂-C₁₄-алкилбензилдиметиламмонийхлорид.

40 Эстеркваты включают коммерчески доступные метосульфаты метилгидроксиалкилдиалкилоксиалкиламмония, поставляемые на рынок фирмой Stepan под торговой маркой Stepanex™, или продукты Cognis Deutschland GmbH, известные под торговой маркой Dehyquat™, или продукты Rewoquat™ компании Goldschmidt-Witco.

45 Количество поверхностно-активных веществ может составлять от 5 до 50% масс. в потребительском продукте по настоящему изобретению.

Моющие компоненты включают водорастворимые и/или нерастворимые в воде органические и/или неорганические моющие компоненты. В частности, они включают

водорастворимые органические вещества, такие как поликарбоновые кислоты, например, лимонную кислоту и сахарные кислоты, мономерные и полимерные аминополикарбоновые кислоты, в частности, метилглицидиндиуксусную кислоту, нитрилотриуксусную кислоту и этилендиаминтетрауксусную кислоту, а также

5 полиаспаргиновую кислоту и полифосфоновые кислоты, в частности, аминотрис (метиленфосфоновую кислоту), этилендиаминтетракис(метиленфосфоновую кислоту) и 1-гидроксиэтан-1,1-дифосфоновую кислоту, полимерные гидроксисоединения, такие как декстрин, а также полимерные (поли)карбоновые кислоты, полимерные акриловые кислоты, метакриловые кислоты, малеиновые кислоты и их смешанные полимеры,

10 которые также могут содержать небольшие количества способных к полимеризации веществ, которые не имеют карбоксильной функциональной группы. Относительная молекулярная масса гомополимеров ненасыщенных карбоновых кислот обычно составляет от 5000 до 200000, а сополимеров - от 2000 до 200000, в каждом случае они рассчитаны на свободную кислоту. Подходящими соединениями этого класса являются

15 сополимеры акриловой кислоты или метакриловой кислоты с виниловыми эфирами, такими как винилметиловые эфиры, виниловые сложные эфиры, этилен, пропилен и стирол, в которых доля кислоты равна, по меньшей мере, 50% масс. В качестве водорастворимых органических моющих компонентов добавок также можно использовать тройные сополимеры, которые содержат две ненасыщенные кислоты и/

20 или их соли в качестве мономеров, и в качестве третьего мономера виниловый спирт и/или производное винилового спирта или углевод. Первый кислый мономер или его соль могут являться производным этиленмононенасыщенной С₃-С₈-карбоновой кислоты. Второй кислотный мономер или его соль могут являться производным С₄-С₈-дикарбоновой кислоты, например, малеиновой кислотой. Третья мономерная

25 единица состоит из винилового спирта и/или этиерифицированного винилового спирта. Полимеры могут содержать от 60 до 95% масс., в частности, от 70 до 90% масс. (мет) акриловой кислоты или (мет)акрилата, а также от 5 до 40% масс. винилового спирта и/или винилацетата. Особыми полимерами являются те, в которых массовое соотношение (мет)акриловой кислоты, соответственно (мет)акрилата, к малеиновой кислоте или

30 малеату составляет от 1:1 до 4:1. Количество и массовые соотношения основаны в пересчете на кислоты. Второй кислотный мономер или его соль также могут быть производным аллилсульфокислоты, которая замещена по второму положению алкильным радикалом, например, С₁-С₄-алкильным радикалом или ароматическим

35 радикалом, который может быть производным от бензола или бензольными производными. Терполимеры могут содержать от 40 до 60% масс., в частности, от 45 до 55% масс. (мет)акриловой кислоты или (мет)акрилата, особенно предпочтительно акриловой кислоты или акрилата, от 10 до 30% масс., предпочтительно от 15 до 25% масс. металлилсульфоновой кислоты или металлилсульфоната, и в качестве третьего мономера от 15 до 40% масс., предпочтительно от 20 до 40% масс. углевода. Этот

40 углевод может быть, например, моно-, ди-, олиго- или полисахаридом, например, сахарозой. Терполимеры обычно имеют относительную молекулярную массу от 1000 до 200000. Другие сополимеры включают те сополимеры, которые включают в качестве мономеров акролеин и акриловую кислоту/соли акриловой кислоты или винилацетат.

45 Специально для производства жидких моющих средств органические моющие компоненты можно использовать в виде водных растворов, например, с содержанием от 30 до 50% масс. Все вышеуказанные кислоты могут быть использованы в форме их водорастворимых солей, в частности, солей щелочных металлов.

Органические моющие компоненты могут быть использованы в количестве до 40% масс.

Водорастворимые неорганические моющие компоненты включают силикаты щелочных металлов и полифосфаты, например, трифосфат натрия. Кристаллические или аморфные щелочные алюмосиликаты, например, кристаллические алюмосиликаты натрия, можно также использовать в качестве нерастворимых в воде, диспергируемых в воде неорганических моющих компонентов, в количестве до 50% масс., например, аллюмосиликаты обычно содержат частицы, имеющие размер менее 30 мкм.

Кристаллические силикаты щелочных металлов также могут быть использованы

либо отдельно, либо в сочетании с аморфными силикатами. В этих силикатах щелочных металлов, используемых в потребительских продуктах по настоящему изобретению в качестве моющих добавок, молярное соотношение оксида щелочного металла к SiO_2 может составлять меньше 0,95, в частности, составляет от 1:1,1 до 1:12, и они могут присутствовать в аморфном или кристаллическом виде. Силикаты щелочных металлов могут быть силикатом натрия, в частности, аморфным силикатом натрия, в котором молярное соотношение $\text{Na}_2\text{O}:\text{SiO}_2$ составляет от 1:2 до 1:2,8.

Содержание моющих компонентов в композициях для потребительских продуктов в соответствии с настоящим изобретением может составлять до 60% масс.

Пероксидные соединения включают органические пероксокислоты или пероксокислотные соли органических кислот, таких как фталимидопероксокапроновая кислота, пербензойная кислота, или соли дипероксадодекандиовой кислоты, пероксид водорода и неорганические соли, которые выделяют перекись водорода в условиях применения, такие как перборат, перкарбонат и/или персиликат. В случае твердых пероксидных соединений их можно использовать в форме порошков или гранулятов, которые, в принципе, также могут быть упакованы известным способом.

Пероксидные соединения можно применять в количествах до 50% масс. Может быть полезным добавление небольших количеств известных отбеливающих агентов-стабилизаторов, например фосфонатов, боратов, соответственно, метаборатов и метасиликатов, а также солей магния, таких как сульфат магния.

В качестве активаторов отбеливания могут быть использованы соединения, которые в условиях гидролиза дают алифатические пероксокарбоновые кислоты, имеющие предпочтительно от 1 до 10 атомов углерода, в частности от 2 до 4 атомов углерода, и/или (возможно замещенную) пербензойную кислоту. Подходящими являются вещества, которые содержат O- и/или N-ацильные группы, имеющие указанное выше число атомов углерода, и/или возможно замещенные бензоильные группы.

Могут быть использованы многократно ацилированные алкилендиамины, в частности, тетраацетилэтилендиамин (TAED), производные ацилированного триазина, в частности, 1,5-диацетил-2,4-диоксогексагидро-1,3,5-триазин (DADHT), ацилированные гликолурилы, в частности, тетраацетилгликолурил (TAGU), N-ацилимиды, в частности, N-наноноилсукцинимид (NOSI), ацилированные фенолсульфонаты, в частности, н-наноноил- или изо-наноноилоксибензолсульфонат (н- или изо-NOBS), ангидриды карбоновых кислот, в частности, ангидрид фталевой кислоты, ацилированные многоатомные спирты, в частности, триацетин, диацетат этиленгликоля, 2,5-диацетокси-2,5-дигидрофуран и сложные енольные эфиры, а также ацетилированный сорбит и манит, соответственно, их смеси (SORMAN), ацилированные производные сахаров, в частности, пентаацетилглюкоза (PAG), пентаацетилфруктоза, тетраацетилксилоза и октаацетиллактоза, а также ацетилированные, возможно N-алкилированный, глутамин и глюконолактон, и/или N-ацилированные лактамы, например, N-бензоилкапролактам.

Аналогичным образом могут быть использованы замещенные гидрофильными группами ацилацетаты и ациллактамы. Можно также использовать комбинации обычных активаторов отбеливания. Содержание таких активаторов отбеливания может находиться в обычном диапазоне количеств и предпочтительно составляет от 1 до 10% масс., в частности, от 2 до 8% масс. в расчете на весь агент.

В дополнение или вместо вышеупомянутых обычных активаторов отбеливания можно также использовать сульфонимины и/или интенсифицирующие отбеливание соли переходных металлов или комплексы переходных металлов в качестве отбеливающих катализаторов. В число подходящих соединений переходных металлов

входят, в частности, саленовые комплексы марганца, железа, кобальта, рутения или молибдена и их азотистые аналоги, карбонильные комплексы марганца, железа, кобальта, рутения или молибдена, комплексы марганца, железа, кобальта, рутения, молибдена, титана, ванадия и меди, имеющие азотсодержащие триподные лиганды, аминные комплексы кобальта, железа, меди и рутения. Аналогичным образом могут быть использованы комбинации активаторов отбеливания и катализаторов отбеливания на основе переходных металлов. Интенсифицирующие отбеливание комплексы переходных металлов, в частности, имеющие центральные атомы, такие как Mn, Fe, Co, Cu, Mo, V, Ti и/или Ru, могут быть использованы в обычных количествах, например, до 1% от массы композиции для потребительского продукта.

Подходящими ферментами, которые можно использовать в композициях, являются ферменты из класса протеаз, кутиназ, амилаз, пуллуланаз, гемицеллюлаз, целлюлаз, липаз, оксидаз и пероксидаз, а также их смеси. Также пригодны ферментативно активные вещества, выделенные из грибов или бактерий, такие как *Bacillus subtilis*, *Bacillus licheniformis*, *Streptomyces griseus*, *Humicola lanuginosa*, *Humicola insolens*, *Pseudomonas pseudoalcaligenes* или *Pseudomonas serarcia*. Используемые ферменты в зависимости от обстоятельств можно адсорбировать на вещества-носители и/или включать в инкапсулирующие вещества, чтобы защитить их от преждевременной инактивации. Они могут содержаться в моющих средствах в соответствии с настоящим изобретением в количестве, составляющим обычно меньше 5% масс.

Оптические отбеливатели включают производные диаминостильбендинсульфоновой кислоты или ее соли щелочных металлов. Подходящими, например, являются соли 4,4'-бис(2-анилино-4-морфолино-1,3,5-триазинил-6-амино)стильбен-2,2'-дисульфоновой кислоты или соединения аналогичной структуры, которые вместо морфолиновой группы содержат диэтаноламиновую группу, метиламиновую группу, анилиновую группу или 2-метоксиэтиламиновую группу. Также могут быть представлены отбеливатели на основе замещенного дифенилстирила, например, соли щелочных металлов 4,4'-бис(2-сульфостирил)дифенила, 4,4'-бис(4-хлор-3-сульфостирил)дифенила или 4-(4-хлорстирил)-4'-(2-сульфостирил)дифенила. Можно также использовать смеси вышеуказанных оптических отбеливателей.

Ингибиторы пенообразования включают органополисилоксаны и их смеси с мелкодисперсной возможно спланированной кремниевой кислотой, а также парафиновые воска и их смеси с спланированной кремниевой кислотой или бис-алкилендиамида жирных кислот. Можно также использовать смеси различных ингибиторов пенообразования, например, состоящие из силиконов, парафинов или восков. Ингибиторы пенообразования, в частности, ингибиторы пенообразования, содержащие силикон и/или парафин, предпочтительно связаны с гранулированным носителем, который является растворимым или диспергируемым в воде. В частности, могут быть использованы смеси из парафинов и дистеарилэтилендиамида.

Грязеотталкивающие активные вещества представляют собой такие соединения, которые положительным образом способствуют вымыванию масел и жиров из текстиля. Этот эффект становится особенно очевидным, когда загрязненный предварительно стираный текстиль несколько раз стирали моющим средством в соответствии с

- 5 настоящим изобретением, которое содержит этот масло- и жироотталкивающий компонент. Предпочтительные масло- и жироотталкивающие компоненты включают, например, неионогенные простые эфиры целлюлозы, такие как метилцеллюлоза и метилгидроксипропилцеллюлоза, содержание метоксигрупп в которых составляет от 15 до 30% масс., а гидроксипропоксильных групп от 1 до 15% масс. в каждом случае в
- 10 расчете на неионогенные простые эфиры целлюлозы, а также известные из уровня техники полимеры фталевой кислоты и/или терефталевой кислоты, соответственно, их производные с мономерными и/или полимерными диолами, в частности, полимеры этилентерефталатов и/или полиэтиленгликольтерефталатов, или их анионные и/или неионогенные модифицированные производные.

- 15 Ингибиторы переноса цвета включают полимеры винилпирролидона, винилимидазола, винилпиридин-N-оксида или их сополимеры. Также пригодны как поливинилпирролидоны с молекулярной массой от 15000 до 50000, так и поливинилпирролидоны с молекулярной массой более 1000000, в частности, равной от 1500000 до 4000000, сополимеры N-винилимидазола/N-винилпирролидона,
- 20 поливинилоксазолидоны, сополимеры на основе виниловых мономеров и амидов карбоновых кислот, содержащие пирролидоновые группы полиефиры и полiamиды, привитые полiamидоамины и полиэтиленимины, полимеры, содержащие амидные группы, образованные вторичными аминами, полиамино-N-оксидные полимеры, поливиниловые спирты и сополимеры на основе акриламидоалкенилсульфоновых
- 25 кислот. Однако также можно использовать ферментные системы, включающие пероксидазу и пероксид водорода или вещество, которое образует перекись водорода в воде.

- Ингибиторы потемнения представляют собой такие материалы, которые удерживают грязь, которая была отделена от текстильных волокон, во взвешенном состоянии в
- 30 промывной среде. Для этого пригодны водорастворимые коллоиды, обычно органические по природе, например, крахмал, клей, желатин, соли эфирокарбоновых или эфиросульфокислот крахмала или целлюлозы, или соли кислых эфиров серной кислоты целлюлозы или крахмала. Водорастворимые полiamиды, содержащие кислотные группы, также пригодны для этой цели. Также могут быть использованы
- 35 производные крахмала, помимо тех, которые перечислены выше, например, альдегидкрахмалы. Могут быть использованы простые эфиры целлюлозы, такие как карбоксиметилцеллюлоза (натриевая соль), метилцеллюлоза, гидроксиалкилцеллюлоза и смешанные эфиры, такие как метилгидроксизтилцеллюлоза, метилгидроксипропилцеллюлоза, метилкарбоксиметилцеллюлоза и их смеси, например,
- 40 в количествах от 0,1 до 5% от массы потребительского товара.

- Органические растворители включают спирты, имеющие от 1 до 4 атомов углерода, в частности, метанол, этанол, изопропанол и трет-бутанол, диолы, имеющие от 2 до 4 атомов углерода, в частности, этиленгликоль и пропиленгликоль, а также их смеси и простые эфиры, являющиеся производными указанных выше классов соединений.
- 45 Смешиваемые с водой растворители такого типа присутствуют в моющих средствах в соответствии с настоящим изобретением в количествах, обычно не превышающих 30% масс. Регуляторы pH включают лимонную кислоту, уксусную кислоту, винную кислоту, яблочную кислоту, молочную кислоту, гликолевую кислоту, янтарную кислоту,

глутаровую кислоту и/или адипиновую кислоту, но также и минеральные кислоты, в частности, серную кислоту или основания, в частности, гидроксиды аммония или гидроксиды щелочных металлов. Регуляторы pH такого типа содержатся в средствах согласно настоящему изобретению в количествах, составляющих предпочтительно не более 20% масс., в частности, от 1,2% до 17% масс.

Соединения могут быть, в частности, использованы для отдушки товаров бытовой химии, содержащих ферменты, как они определены выше, и, в частности, продуктов для обработки текстиля, таких как детергенты, содержащие ферменты.

Далее следуют примеры, которые служат для дополнительной иллюстрации

изобретения.

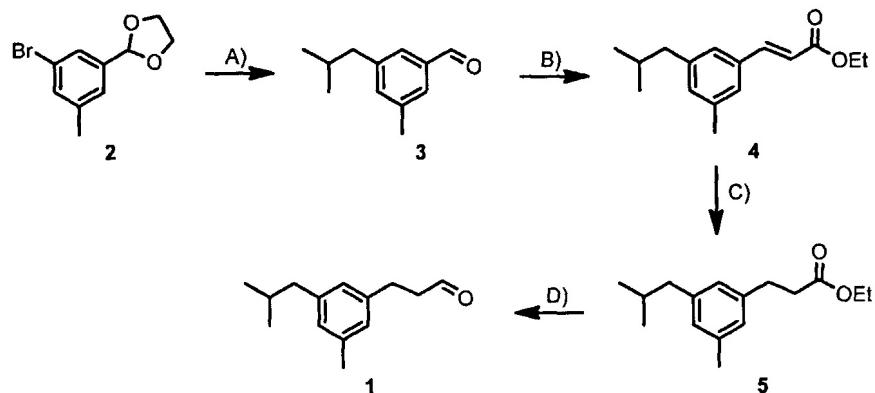
Пример 1: Синтез 3-(3-изобутил-5-метилфенил)пропаналя (1)

Соединение 1 по настоящему изобретению было получено в соответствии со схемой

1/

Схема 1:

15



20

25

30

35

А) Изобутилмагнийхлорид (2М раствор в ТГФ, 12,0 мл) добавили к суспензии $ZnCl_2$ (2,34 г, 17,2 ммоль) в ТГФ (8,5 мл) при 0°C. После перемешивания серо-белой густой суспензии при 25°C в течение 1 часа, ее добавили к суспензии, состоящей из $[PdCl_2(dppf)] \cdot CH_2Cl_2$ (93 мг, 0,11 ммоль), CuI (44 мг, 0,23 ммоль) и 2-(3-бром-5-метилфенил)-1,3-диоксолана (2, 2,78 г, 11,4 ммоль) в ТГФ (11,5 мл). Смесь перемешивали при 25°C в течение 2 ч и снова в течение 1 ч после добавления 2М водн. HCl (11,5 мл). Затем добавили H_2O и водный слой экстрагировали МТБЭ (2 раза). Органические фазы промыли соляным раствором, высушили ($MgSO_4$), отфильтровали и фильтрат сконцентрировали. Остаток очищали перегонкой в аппарате "Kugelrohr" (120°C, 0,009 кПа (0,09 мбар)), получая 1,93 г (96%) 3-изобутил-5-метилбензальдегида (3) в виде бесцветного масла.

40

¹Н-ЯМР ($CDCl_3$, 400 МГц): $\delta = 9,97$ (с, 1H), 7,52 (шир. с, 1H), 7,47 (шир. с, 1H), 7,25-7,23 (м, 1H), 2,52 (д, $J=7,3$ Гц, 2H), 2,41 (д, $J=0,5$ Гц, 3H), 1,90 (нонэт, $J=6,9$ Гц, 1H), 0,92 (д, $J=6,6$ Гц, 6H) ppm (частей на млн.).

45

Б) Этил 2-(диэтилфосфорил)ацетат (3,1 мл, 15,4 ммоль) добавили к суспензии NaH (50% дисперсия в минеральном масле, 0,74 г, 15,4 ммоль) в ТГФ (8 мл) при 0°C. После перемешивания суспензии при 25°C в течение 30 мин, ее опять охладили до 0°C, добавили 3-изобутил-5-метилбензальдегид (3, 2,46 г, 14,0 ммоль) в ТГФ (7 мл) и смесь перемешивали при 25°C в течение 5 часов. Затем добавили H_2O при 25°C и водный слой экстрагировали МТБЭ (2 раза). Органические фазы промыли соляным раствором, высушили ($MgSO_4$), отфильтровали и фильтрат сконцентрировали. Остаток очищали

перегонкой в аппарате "Kugelrohr" (130°C, 0,009 кПа (0,09 мбар)), получая 2,38 г (69%) (E)-этил-3-(3-изобутил-5-метилфенил)акрилат (4) в виде светло-желтого масла.

¹H-ЯМР (CDCl₃, 400 МГц): δ=7,66 (д, J=16,1 Гц, 1H), 7,18 (шир. с, 1H), 7,12 (шир. с,

⁵ 1H), 7,00 (шир. с, 1H), 6,43 (д, J=16,1 Гц, 1H), 4,27 (кв, J=7,1 Гц, 2H), 2,46 (д, J=7,3 Гц, 2H), 2,35 (с, 3H), 1,87 (нонет, J=6,9 Гц, 1H), 1,35 (т, J=7,1 Гц, 3H), 0,92 (д, J=6,6 Гц, 6H) ppm.

C) Pd/C (5 масс. %, 0,21 г) добавили к раствору (E)-этил-3-(3-изобутил-5-метилфенил)акрилата (4, 2,11 г, 8,57 ммоль) в EtOH (17 мл). Сусpenзию перемешивали в атмосфере H₂ (1 атм) при 25°C в течение 3 ч, отфильтровали через слой цеолита и промыли гексаном. Фильтрат сконцентрировали и остаток очищали перегонкой в аппарате "Kugelrohr" (130°C, 0,008 кПа (0,08 мбар)), получая 1,91 г (90%) этил 3-(3-изобутил-5-метилфенил)пропаноата (5) в виде бесцветного масла, имеющего сладкий, фруктовый аромат леденцов.

¹⁵ ¹H-ЯМР (CDCl₃, 400 МГц): δ=6,85 (шир. с, 1H), 6,82 (шир. с, 1H), 6,79 (шир. с, 1H), 4,14 (кв, J=7,1 Гц, 2H), 2,92-2,88 (м, 2H), 2,63-2,59 (м, 2H), 2,41 (д, J=7,1 Гц, 2H), 2,31 (д, J=0,5 Гц, 3H), 1,84 (нонет, J=6,9, 1H), 1,25 (т, J=7,1 Гц, 3H), 0,90 (д, J=6,6 Гц, 6H) ppm.

D) DIBAL-H (1M раствор в CH₂Cl₂, 4,0 мл) добавили к раствору этил 3-(3-изобутил-5-метилфенил)пропаноата (5, 1,01 г, 4,03 ммоль) в CH₂Cl₂ (16 мл) при -78°C и смесь перемешивали при -78°C в течение 3 часов. Затем смесь нагрели до 0°C, добавили МТБЭ и реакцию гасили H₂O (0,2 мл), 3M водным раствором NaOH (0,2 мл) и H₂O (0,4 мл) и энергично перемешивали в течение 10 мин. Добавили MgSO₄, смесь перемешивали в течение дополнительных 10 мин и белое твердое вещество отфильтровали. Фильтрат сконцентрировали и остаток очищали перегонкой в аппарате "Kugelrohr" (120°C, 0,007 кПа (0,07 мбар)), получая 0,77 г (94%) 3-(3-изобутил-5-метилфенил)пропаналя (1) в виде бесцветного масла.

¹⁶ ¹H-ЯМР (CDCl₃, 400 МГц): δ=9,83 (т, J=1,6 Гц, 1H), 6,85 (шир. с, 1H), 6,84 (шир. с, 1H), 6,79-6,77 (м, 1H), 2,91 (т, J=7,5 Гц, 2H), 2,79-2,75 (м, 2H), 2,42 (д, J=7,1 Гц, 2H), 2,31 (д, J=0,7 Гц, 3H), 1,85 (нонет, J=6,9 Гц, 1H), 0,91 (д, J=6,6 Гц, 6H) ppm.

¹⁷ ¹³C-ЯМР (CDCl₃, 100 МГц): δ=201,8 (д), 142,0 (с), 139,9 (с), 137,8 (с), 127,9 (д), 126,4 (д), 126,2 (д), 45,4 (т), 45,3 (т), 30,2 (д), 28,1 (т), 22,4 (2кв), 21,3 (кв) ppm.

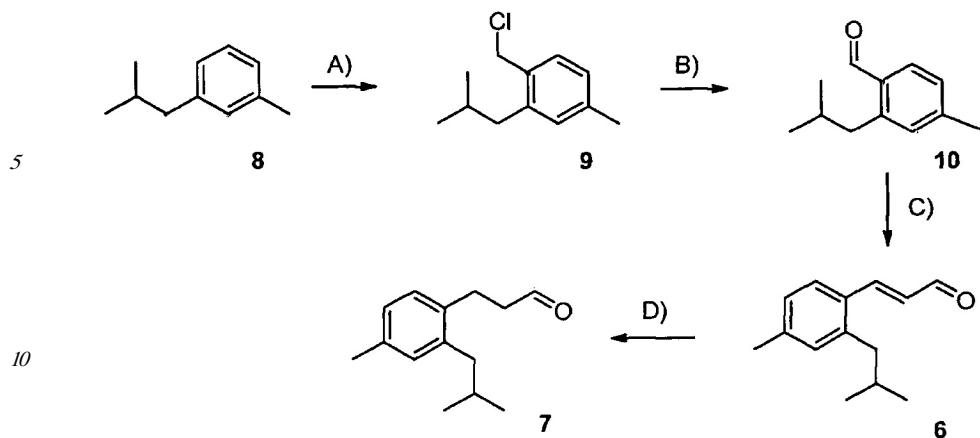
MC(ЭИ): m/z (%): 204 (M⁺, 23), 176 (9), 161 (12), 148 (18), 133 (53), 119 (100), 105 (44), 91 (33), 77 (12), 43 (14), 41 (19), 29 (9).

Описание запаха: альдегидный с оттенком зелени, сочный цитрусово-апельсиновый.

Пример 2 - Синтез (E)-3-(2-изобутил-4-метилфенил)акрилальдегида (6) и 3-(2-изобутил-4-метилфенил)пропаналя (7)

Соединения 6 и 7 получали в четыре или пять стадий, соответственно, в соответствии со схемой 2.

Схема 2:



А) Смесь, состоящую из ZnCl_2 (53,9 г, 395 ммоль), 1-изобутил-3-метилбензола (8, 293 г, 1,98 моль), параформальдегида (66,3 г, 2,21 моль) и AcOH (230 мл), в атмосфере аргона осторожно нагрели до 40°C. Газообразный хлористый водород барботировали в реакционный раствор в течение 2 ч при 40°C до тех пор, пока не прореагировал весь 1-изобутил-3-метилбензол. Реакционную смесь охладили до 25°C, добавили H_2O и реакционную смесь экстрагировали МТБЭ (3 раза). Объединенные органические слои промыли H_2O (5 раз), насыщенным водным раствором NaHCO_3 и соляным раствором.

Органический слой высушили (MgSO_4), отфильтровали и сконцентрировали. Сырой продукт перегнали в вакууме с получением бесцветной жидкости (275 г, выход 70%), которая представляла собой смесь 1-(хлорметил)-2-изобутил-4-метилбензола (9) и 1-(хлорметил)-4-изобутил-2-метилбензола в соотношении 22:78.

1-(хлорметил)-2-изобутил-4-метилбензол: ^1H -ЯМР (CDCl_3 , 300 МГц): $\delta=7,20$ (д, $J=7,4$ Гц, 1Н), 7,02 (д, $J=7,4$ Гц, 1Н), 6,98 (с, 1Н), 4,60 (с, 2Н), 2,57 (д, $J=7,6$ Гц, 2Н), 2,32 (с, 3Н), 1,96-1,81 (м, 1Н), 0,95 (д, $J=6,6$ Гц, 6Н) ppm.

1-(хлорметил)-4-изобутил-2-метилбензол: ^1H -ЯМР (CDCl_3 , 300 МГц): $\delta=7,20$ (д, $J=7,4$ Гц, 1Н), 7,02 (д, $J=7,4$ Гц, 1Н), 6,98 (с, 1Н), 4,60 (с, 2Н), 2,43 (д, $J=7,4$ Гц, 2Н), 2,40 (с, 3Н), 1,89-1,79 (м, 1Н), 0,90 (д, 6Н) ppm.

Б) Смесь, состоящую из 1-(хлорметил)-2-изобутил-4-метилбензола (9) и 1-(хлорметил)-4-изобутил-2-метилбензола (273 г, 1,39 моль в соотношении 22:78), гексаметилентетрамина (уротропин, 292 г, 2,08 ммоль) и AcOH (120 г, 2,00 моль) в EtOH (300 мл) и H_2O (200 мл) кипятили с обратным холодильником в атмосфере аргона в течение 10 часов. Реакционную смесь охладили до 25°C и органическую фазу отделили. Водную фазу экстрагировали МТБЭ (3 раза). Объединенные органические слои промыли H_2O (3 раза), насыщенным водным раствором NaHCO_3 и насыщенным раствором соли. Органический слой высушили (MgSO_4) отфильтровали и сконцентрировали.

Неочищенный продукт перегнали в вакууме с получением бесцветной жидкости (180 г), которая представляла собой смесь 2-изобутил-4-метилбензальдегида и 4-изобутил-2-метилбензальдегида в соотношении 22:78. Продукт далее подвергли фракционной перегонке, получая чистый 2-изобутил-4-метилбензальдегид (10, 15,0 г, выход 6%) и 4-изобутил-2-метилбензальдегид (95,0 г, выход 39%).

2-изобутил-4-метилбензальдегид: температура кипения 98-101°C/0,015 кПа (0,15 мбар); ^1H -ЯМР (CDCl_3 , 300 МГц): $\delta=10,22$ (с, 1Н), 7,73 (д, $J=7,8$ Гц, 1Н), 7,14 (д, $J=7,8$ Гц, 1Н), 7,02 (с, 1Н), 2,85 (д, $J=7,1$ Гц, 2Н), 2,38 (с, 3Н), 1,92-1,77 (м, 1Н), 0,93 (д, $J=6,6$ Гц,

6Н) ppm.

Описание запаха: с оттенком зелени и кожи, пряно-шафрановый.

5 4-изобутил-2-метилбензальдегид: температура кипения: 102-108°C/0,015 кПа (0,15 мбар); ^1H -ЯМР (CDCl_3 , 300 МГц): δ =10,20 (с, 1Н), 7,70 (д, J =7,8 Гц, 1Н), 7,13 (д, J =7,8 Гц, 1Н), 7,03 (с, 1Н), 2,64 (с, 3Н), 2,49 (д, J =7,2 Гц, 2Н), 1,99-1,81 (м, 1Н), 0,91 (д, J =6,6 Гц, 6Н) ppm.

Описание запаха: слабый, ароматический с оттенком зелени, запах душицы и тимьяна, смолистый, легкий запах изобутилбензоата;

10 С) К смеси, состоящей из 2-изобутил-4-метилбензальдегида (10, 11,0 г, 62,4 ммоль) и эфирата трифторида бора (0,044 г, 0,31 ммоль), в атмосфере аргона по каплям добавляли триметоксиметан (7,95 г, 74,9 ммоль) в течение 33 минут при 25°C. По завершении добавления реакционную смесь перемешивали в течение 20 мин при 25°C. Затем по каплям добавляли этоксиэтилен (5,40 г, 74,9 ммоль) в течение 20 мин при 30-15 35°C и реакционную смесь перемешивали в течение 30 мин. При перемешивании в течение 2 мин добавляли NaHCO_3 (1,0 г) и H_2O (0,50 мл), затем перемешивание прекратили. Чистый раствор декантировали и добавили метансульфоновую кислоту (0,090 г, 0,94 ммоль) в H_2O (5,0 мл). Реакционную смесь нагрели до кипения с обратным холодильником, и летучие продукты отгоняли, пока температура в реакционном сосуде 20 не достигла 105°C. Реакционную смесь охладили до 90°C и добавили толуол (40 мл). Полученную смесь промыли последовательно водным раствором H_2SO_4 (63%), соляным раствором и H_2O . Органический слой высушили (MgSO_4), отфильтровали и сконцентрировали. Неочищенный продукт очищали посредством колоночной хроматографии с последующей перегонкой в аппарате "Kugelrohr", получая (E)-3-(2-изобутил-4-метилфенил)акрилальдегид (6, 7,50 г, выход 59%) в виде бесцветной жидкости.

25 Температура кипения: 145-150°C/0,015 кПа (0,15 мбар). ^1H -ЯМР (CDCl_3 , 300 МГц): δ =9,70 (д, J =7,7 Гц, 1Н), 7,76 (д, J =15,7 Гц, 1Н), 7,53 (д, J =8,0 Гц, 1Н), 7,06 (д, J =8,0 Гц, 1Н), 7,02 (с, 1Н), 6,64 (дд, J =15,7; 7,7 Гц, 1Н), 2,62 (д, J =7,2 Гц, 2Н), 2,36 (с, 3Н) 1,88-1,77 (м, 1Н), 0,93 (д, J =6,6 Гц, 6Н) ppm.

30 ^{13}C -ЯМР (CDCl_3 , 75 МГц): δ =193,9 (д), 150,5 (д), 141,9 (с), 141,2 (с), 132,2 (д), 129,8 (с), 128,5 (д), 127,5 (д), 126,8 (д), 42,3 (т), 30,7 (д), 22,4 (кв), 22,4 (кв), 21,5 (кв) ppm.

MC m/z (%): 77 (3), 91 (13), 105 (3), 115 (20), 131 (23), 145 (100), 159 (20), 171 (2), 187

35 (3), 202 (6) [M^+].

Описание запаха: цветочный, с нотой зелени.

D) Смесь, состоящую из Pd/C (5 масс. %, 0,30 г), ацетата натрия (2,00 г, 24,4 ммоль), (E)-3-(2-изобутил-4-метилфенил)акрилальдегида (6, 7,00 г, 34,6 ммоль) и EtOAc (35 мл), перемешивали в атмосфере H_2 (1 атм) при 25°C в течение ночи. Реакционную смесь 40 отфильтровали через слой SiO_2 и промыли МТБЭ. Полученный фильтрат сконцентрировали. Неочищенный продукт очищали посредством колоночной хроматографии с последующей перегонкой в аппарате "Kugelrohr", получая 3-(2-изобутил-4-метилфенил)пропаналь (7, 3,50 г, 17,1 ммоль, выход 50%, чистота >99%) в виде бесцветной жидкости.

45 Температура кипения: 145-150°C/0,015 кПа (0,15 мбар). ^1H -ЯМР (CDCl_3 , 300 МГц): δ =9,83 (с, 1Н), 7,02 (д, J =7,7 Гц, 1Н), 6,95 (д, J =7,7 Гц, 1Н), 6,94 (с, 1Н), 2,92 (т, J =7,7 Гц, 2Н), 2,71 (т, J =7,7 Гц, 2Н), 2,45 (д, J =7,2 Гц, 2Н), 2,29 (с, 3Н), 1,91-1,77 (м, 1Н), 0,93 (д, J =

6,5 Гц, 6Н) ppm.

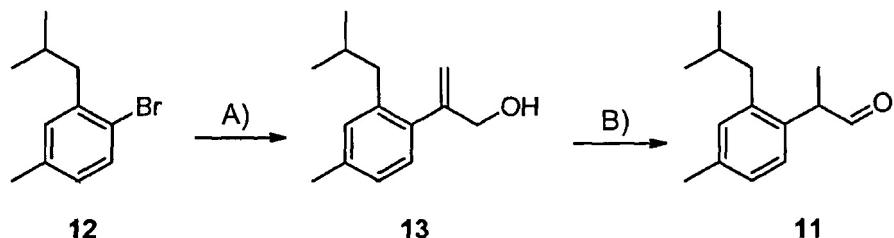
¹³C-ЯМР (CDCl₃, 75 МГц): δ=201,8 (д), 139,3 (с), 135,6 (с), 135,2 (с), 131,1 (д), 128,7 (д), 126,9 (д), 45,2 (т), 41,9 (т), 29,9 (д), 24,4 (т), 22,6 (кв), 22,6 (кв), 21,0 (кв) ppm.

MC m/z (%): 77 (6), 91 (15), 105 (18), 119 (100), 133 (12), 143 (28), 161 (30), 171 (2), 186 (10), 204 (5) [M⁺].

Описание запаха: цветочный, с нотой зелени, животный, запах костуса.

Пример 3: Синтез 2-(2-изобутил-4-метилфенил)пропаналя (11) Соединение 11 было получено в две стадии в соответствии со схемой 3.

Схема 3:



A) 1-Бром-2-изобутил-4-метилбензол (12, 182 г, 0,80 моль, 75%) в Et₂O (550 мл)

добавили к Mg (22,4 г, 0,92 моль) в Et₂O (50 мл), чтобы получить реагент Гриньяра. CuI (9,06 г, 48,1 ммоль) добавили при 25°C, и смесь перемешивали в течение 40 мин. Затем по каплям добавляли в течение 30 мин пропаргиловый спирт (18,0 г, 0,32 моль) в Et₂O (100 мл), поддерживая температуру ниже 30°C. После чего смесь кипятили с обратным холодильником в течение 80 мин, перемешивали в течение ночи и затем быстро охладили, выливая смесь в насыщенный водный раствор NH₄Cl (400 мл) и ледяную H₂O (400 мл).

Водную фазу экстрагировали Et₂O (2 раза) и объединенные органические фазы промыли H₂O (2 раза, до pH 6-7). Органическую фазу высушили (MgSO₄), отфильтровали и выпарили с получением неочищенного 2-(2-изобутил-4-метилфенил)проп-2-ен-1-ола (13, 126 г), который очищали фракционированием через колонку Вигре, собирая фракции, кипящие при 108-111°C (0,007 кПа (0,07 мбар)), (25,5 г, выход 39%).

Б) 2-(4-изобутил-2-метилфенил)проп-2-ен-1-ол (13, 11,9 г, 58,3 ммоль) растворили в CH₂Cl₂ (500 мл) в атмосфере аргона. CBr₄ (5,17 г, 15,6 ммоль) и PPh₃ (4,09 г, 15,6 ммоль) добавляли порциями совместно, поддерживая температуру ниже 25°C. После перемешивания в течение 125 часов смесь быстро охладили ледяной водой и водную фазу экстрагировали CH₂Cl₂. Органическую фазу промыли H₂O, высушили (MgSO₄), отфильтровали и растворитель выпарили с получением неочищенного продукта (18,2 г). Неочищенный продукт очищали перегонкой в аппарате "Kugelrohr" (115°C, 0,007 кПа (0,07 мбар)) с последующей фланш-хроматографией на SiO₂, при элюировании смесью гексан МТБЭ. В результате получили 2-(2-изобутил-4-метилфенил)пропаналь (11, 3,40 г, выход 29%, чистота 93%).

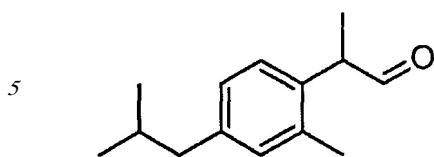
¹H-ЯМР (CDCl₃, 400 МГц): δ=9,64 (д, J=1,0 Гц, 1H), 7,03 (дд, J=7,8; 1,2 Гц, 1H), 7,01 (шир. с, 1H), 6,91 (д, J=7,8 Гц, 1H), 3,84 (кв. д, J=6,9, 1,0 Гц, 1H), 2,57-2,46 (м, 2H), 2,32 (с, 3H), 1,82 (ногет, J=6,9 Гц, 1H), 1,37 (д, J=6,9 Гц, 3H), 0,95 (д, J=6,6 Гц, 3H), 0,95 (д, J=6,6 Гц, 3H) ppm.

¹³C-ЯМР (CDCl₃, 100 МГц): δ=201,4 (д), 140,0 (с), 136,7 (с), 133,2 (с), 131,9 (д), 127,8 (д), 127,5 (д), 48,2 (д), 42,2 (т), 30,3 (д), 22,5 (кв), 22,5 (кв), 21,1 (кв), 15,5 (кв) ppm.

MC: m/z (%): 55 (20), 77 (5), 91 (14), 105 (14), 115 (15), 119 (21), 133 (100), 161 (9), 175

(39), 204(12) [M⁺].

Пример 4: 2-(4-изобутил-2-метилфенил)пропаналь (14)



14

1-Бром-4-изобутил-2-метилбензол был превращен в соответствии с процедурой, описанной в примере 3, через 2-(2-изобутил-4-метилфенил)проп-2-ен-1-ол в 2-(4-изобутил-2-метилфенил)пропаналь (14).

¹H-ЯМР (CDCl₃, 400 МГц): δ=9,64 (д, J=1,2 Гц, 1H), 7,01 (шир. с, 1H), 7,00 (дд, J=7,8; 1,7 Гц, 1H), 6,95 (J=7,6 Гц, 1H), 3,80 (кв. д, J=7,1; 1,2 Гц, 1H), 2,43 (д, J=7,3 Гц, 2H), 2,33 (с, 3H), 1,85 (нонет, J=6,9 Гц, 1H), 1,39 (д, J=7,1 Гц, 3H), 0,92 (д, J=6,6 Гц, 6H) ppm.

¹³C-ЯМР (CDCl₃, 100 МГц): δ=201,3 (д), 141,0 (с), 136,3 (с), 133,5 (с), 131,8 (д), 127,4 (д), 127,3 (д), 49,0 (д), 45,0 (т), 30,2 (д), 22,4 (кв), 22,4 (кв), 19,7 (кв) 14,3 (кв) ppm.

MC: m/z (%): 57 (12), 77 (5), 91 (14), 105 (14), 117 (17), 133 (26), 175 (100), 204 (9) [M⁺].

Пример 5: Исследование метаболизма *in vitro*. Сравнение соединений по настоящему изобретению и Lilial™.

Криоконсервированные гепатоциты самцов крыс (Sprague Dawley; Life Technologies) разморозили, промыли в криоконсервированной среде для восстановления гепатоцитов (CHRM; Lifetechnologies) и суспендировали в среде Williams E (WEM; Life Technologies). Lilial™ или соединения по настоящему изобретению (конечная концентрация: 100 мкММ) добавляли к клеткам (1×10⁶ жизнеспособных клеток/мл) и суспензии инкубировали в течение периода времени вплоть до 4 часов при температуре 37°C в шейкере, в двух сериях. Метаболизм тестостерона контролировали как положительный контроль. Снижение количества тестируемых соединений и образование соответствующего производного бензойной кислоты определяли с помощью ГХ-МС анализа метиловых эфиров, образовавшихся после дериватизации с триметилсилилдиазометаном (Sigma-Aldrich) в метаноле. Тестируемые соединения реагируют с диазометаном, образуя метилкетон, который использовали для количественного определения Lilial™ и соединения формулы (I). Метаболизм останавливали охлажденной льдом 1М HCl, образцы экстрагировали трет-бутилметиловым эфиром (МТБЭ) и анализировали с помощью ГХ-МС. Инкубаты, содержащие тестостерон в качестве контроля, также останавливали охлажденной льдом 1М HCl, центрифугировали для отделения клеток, фильтровали и уменьшение количества тестостерона анализировали с помощью ЖХ-МС. Для определения уменьшения количества тестируемых веществ и определения количества образовавшихся метаболитов бензойной кислоты были построены калибровочные кривые для эталонных материалов (Lilial™ и соединений по настоящему изобретению, трет-бутилбензойной кислоты (Fluka)) в среде инкубации гепатоцитов, и их анализ проводили, как анализ образцов с гепатоцитами.

Было отмечено быстрое уменьшение количества тестостерона в положительном контроле, указывающее на то, что гепатоциты метаболически активны. Соединения по настоящему изобретению и Lilial™ быстро метаболизировались в гепатоцитах крыс, и через 4 часа не было обнаружено остаточных количеств ни одного из соединений, за исключением одного соединения, количество которого через 4 часа составляло 2%. В

то время как трет-бутилбензойная кислота была обнаружена в качестве метаболита Lilial™ (3,4-3,9 мкМ), из соединений по настоящему изобретению не образовывались производные бензойной кислоты (Таблица 1). Предел обнаружения составлял <1 мкМ.

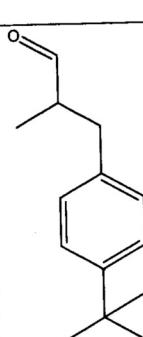
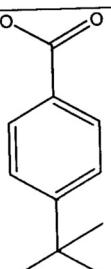
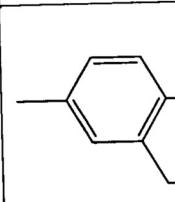
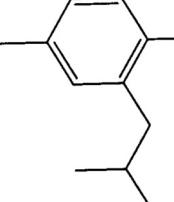
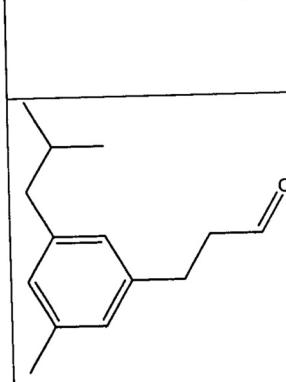
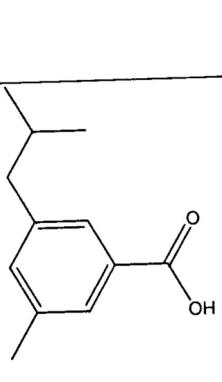
В Таблице 1 (ниже) показаны концентрации Lilial™ и соединений по настоящему

изобретению, а также концентрации метаболитов в виде соответствующих бензойных кислот в гепатоцитах крыс при инкубации в течение 4 часов. Начальная тестовая концентрация при инкубации составляла 100 мкМ (0 часов).

Из данных, представленных в Таблице 1, очевидно, что орто- или мета-заместитель в бензольном кольце соединений по настоящему изобретению влияет на образование соответствующего производного бензойной кислоты *in vitro*. В то время как производные бензойной кислоты, такие как трет-бутилбензойная кислота, образующаяся из Lilial™, оказывают токсическое воздействие на репродуктивную способность самцов крыс, эти токсические воздействия на самцов крыс предотвращают с помощью орто-заместителя или уменьшают с помощью мета-заместителя соединений по настоящему изобретению.

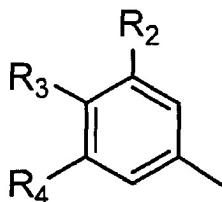
15

Таблица 1

Тестовое соединение	Остаточная концентрация (мкМ)	Производное бензойной кислоты	Концентрация (мкМ)
	0		3,5-3,9
	0		Не обнаружено
	1,5		0,7-1,0

(57) Формула изобретения

1. Соединение, представленное формулой 2:



10
Формула 2

где:

R_2 представляет собой H или, когда R_3 представляет собой H, тогда R_2 представляет собой $\text{CHR}_5\text{CHR}_6\text{CHO}$, $\text{CR}_5=\text{CR}_6\text{CHO}$ или $\text{C}(\text{CH}_3)\text{CHO}$, где R_5 , R_6 каждый независимо может представлять собой H или метил;

R_3 представляет собой H или, когда R_2 представляет собой H, тогда R_3 представляет собой $\text{CHR}_5\text{CHR}_6\text{CHO}$, $\text{CR}_5=\text{CR}_6\text{CHO}$ или $\text{C}(\text{CH}_3)\text{CHO}$, где R_5 , R_6 каждый независимо может представлять собой H или метил; и

R_4 представляет собой разветвленный или линейный, насыщенный или ненасыщенный, незамещенный или замещенный $C_2\text{-}C_7$ -алкильный или $C_2\text{-}C_7$ -алкенильный остаток, предпочтительно изобутил, изоамил.

2. Соединение по п. 1, в котором R_4 представляет собой разветвленный или линейный, насыщенный или ненасыщенный, незамещенный или замещенный циклопропильными группами $C_2\text{-}C_7$ -алкильный или $C_2\text{-}C_7$ -алкенильный остаток, предпочтительно изобутил, изоамил.

3. Применение соединения по п. 1 в качестве парфюмерного ингредиента.

4. Применение по п. 3, где парфюмерный ингредиент имеет характеристики запаха зелени.

5. Парфюмерная композиция, содержащая соединение по п. 1.

6. Парфюмерная композиция по п. 5, которая по существу не содержит какого-либо арилзамещенного пропаналя, душистых веществ, которые не содержат заместителей в арильном кольце в орто-положении относительно заместителя, несущего альдегидную функциональную группу, в частности не содержит LiliaTM.

7. Парфюмерная композиция по п. 5 или 6, содержащая один или более дополнительных парфюмерных ингредиентов, в частности 3-(4-изобутил-2-метилфенил)пропаналь.

8. Композиция для средств личной гигиены, включающая, по меньшей мере, соединение по п. 1 или парфюмерную композицию по любому из пп. 5-7.

9. Композиция для бытовых средств ухода, включающая, по меньшей мере, соединение по п. 1 или парфюмерную композицию по любому из пп. 5-7.

10. Композиция для средств личной гигиены или для бытовых средств ухода по п. 8 или 9, дополнительно включающая ферменты.

11. Композиция для бытовых средств ухода по п. 9 или 10, отличающаяся тем, что она представляет собой продукт для обработки текстильных изделий.

12. Композиция для средств личной гигиены или для бытовых средств ухода по любому из пп. 8-11, отличающаяся тем, что она представляет собой детергентную композицию.

13. Способ придания характеристик запаха ландыша ароматизатору с тонким запахом

или потребительскому продукту, включающий стадию добавления к ним соединения по п. 1, и селективное исключение из указанного ароматизатора с тонким запахом или потребительского продукта любых соединений - арилзамещенных алканалей, которые не содержат заместители в арильном кольце, расположенные в орто-положении

- 5 относительно заместителя, несущего альдегидную функциональную группу, причем указанное селективное добавление или исключение основано на подверженности указанных соединений к ферментативно-опосредованному разложению до их производных бензойной кислоты при инкубации с гепатоцитами, выделенными из крыс, причем указанные соединения являются пригодными для добавления исходя из того, 10 что они не разлагаются до их производных бензойной кислоты, тогда как указанные соединения подлежат исключению исходя из того, что они разлагаются до их производных бензойной кислоты.

15

20

25

30

35

40

45