



SCHWEIZERISCHE EIDGENOSSENSCHAFT
BUNDESAMT FÜR GEISTIGES EIGENTUM

Int. Cl.³: A 61 K 7/46

Erfindungspatent für die Schweiz und Liechtenstein
Schweizerisch-liechtensteinischer Patentschutzvertrag vom 22. Dezember 1978



PATENTSCHRIFT A5

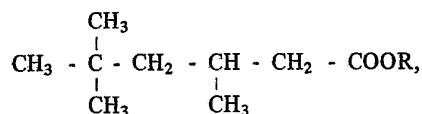
11

638 677

<p>⑳ Gesuchsnummer: 13128/78</p> <p>㉒ Anmeldungsdatum: 22.12.1978</p> <p>③① Priorität(en): 23.12.1977 DE 2757559</p> <p>㉔ Patent erteilt: 14.10.1983</p> <p>④⑤ Patentschrift veröffentlicht: 14.10.1983</p>	<p>⑦③ Inhaber: Henkel Kommanditgesellschaft auf Aktien, Düsseldorf-Holthausen (DE)</p> <p>⑦② Erfinder: Dr. Ulf-Armin Schaper, Düsseldorf (DE) Dr. Jens Conrad, Hilden (DE) Dr. Klaus Bruns, Krefeld-Traar (DE)</p> <p>⑦④ Vertreter: Kirker & Cie SA, Genève</p>
---	---

⑤④ **3,5,5-Trimethylhexansäureester enthaltende Riechstoffkomposition.**

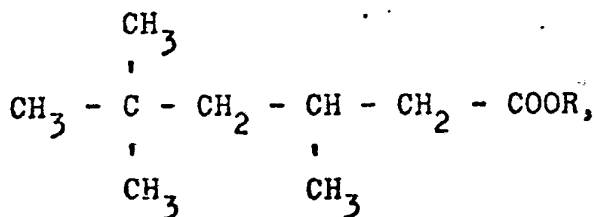
⑤⑦ Die Riechstoffkomposition enthält einen 3,5,5-Trimethylhexansäureester der Formel



in der R einen aliphatischen Kohlenwasserstoffrest mit 1 - 5 C-Atomen darstellt, als Riechstoff.

PATENTANSPRÜCHE

1. Riechstoffkomposition, gekennzeichnet durch einen Gehalt an einem 3,5,5-Trimethylhexansäureester der allgemeinen Formel

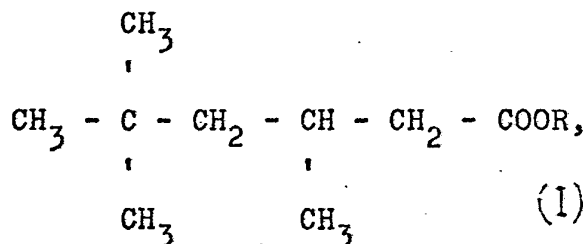


in der R einen gesättigten, ungesättigten, geradkettigen oder verzweigt-kettigen aliphatischen Kohlenwasserstoffrest mit 1-5 Kohlenstoffatomen darstellt, als Riechstoff.

2. Riechstoffkomposition nach Anspruch 1, dadurch gekennzeichnet, dass in der Formel des 3,5,5-Trimethylhexansäureesters R einen Methyl- oder Äthylrest darstellt.

3. Riechstoffkomposition nach Anspruch 1, dadurch gekennzeichnet, dass sie den 3,5,5-Trimethylhexansäureester in einer Menge von 1 bis 50 Gewichtsprozent, bezogen auf die gesamte Komposition, enthält.

Es wurde gefunden, dass 3,5,5-Trimethylhexansäureester der allgemeinen Formel



in der R einen gesättigten, ungesättigten, geradkettigen oder verzweigt-kettigen aliphatischen Kohlenwasserstoffrest mit 1-5 Kohlenstoffatomen darstellt, in vorteilhafter Weise als Riechstoffe der verschiedensten Geruchsnoten verwendet werden können.

Die Herstellung der in den erfindungsgemässen Riechstoffkompositionen enthaltenen 3,5,5-Trimethylhexansäureester erfolgt am besten nach üblichen Methoden der organischen Chemie durch Umsetzung der 3,5,5-Trimethylhexansäure oder des Säurechlorids mit den entsprechenden Alkoholen. Die 3,5,5-Trimethylhexansäure selbst entsteht als Hauptprodukt bei der Hydroformylierung von Diisobutylem mit nachfolgender Oxidation der gewonnenen Zwischenprodukte. Das Gemisch der so hergestellten Säuren ist unter dem Namen «Isononansäure» Handelsprodukt und enthält im allgemeinen ca. 90% der 3,5,5-Trimethylhexansäure. Es kann daher bei der Herstellung der 3,5,5-Trimethylhexansäureester der Formel I auch von der handelsüblichen Isononansäure ausgegangen werden, da sich die geringen Mengen an Nebenprodukten bei vielen Anwendungszwecken nicht nachteilig auswirken.

Als 3,5,5-Trimethylhexansäureester der Formel I sind zum Beispiel der 3,5,5-Trimethylhexansäuremethylester, -äthylester, -propylester, -isopropylester, -butylester, -isobutylester, -tert. butylester, -pentylester, -allylester, -propargylester zu nennen. Die grösste Bedeutung kommt dabei, auf

Grund ihrer interessanten Geruchsnoten, dem Methylester und Äthylester zu.

Die 3,5,5-Trimethylhexansäureester der Formel I sind wertvolle Riechstoffe mit charakteristischen Duftnoten, die von blumig, fruchtig bis holzig reichen. Ein besonderer Vorteil der Riechstoffe der Formel I ist ihre sehr gute Kombinationsfähigkeit zu neuartigen und interessanten Geruchsnuancen.

Die 3,5,5-Trimethylhexansäureester der Formel I können mit anderen Riechstoffen in den verschiedensten Mengenverhältnissen zu neuen Riechstoffkompositionen gemischt werden. Im allgemeinen wird sich der Anteil der 3,5,5-Trimethylhexansäureester in den Riechstoffkompositionen in den Mengen von 1-50 Gewichtsprozent, bezogen auf die gesamte Komposition, bewegen. Derartige Kompositionen können direkt als Parfüm oder auch zur Parfümierung von Kosmetika wie Cremes, Lotionen, Duftwässern, Aerosolen, Toiletteseifen, technischen Artikeln wie Wasch- und Reinigungsmitteln, Desinfektionsmitteln und Textilbehandlungsmitteln dienen.

Durch Reduktion des Hydroformylierungsproduktes von Diisobutylem wird «Isononylalkohol» gewonnen. Dieser handelsübliche Alkohol enthält als Hauptprodukt 3,5,5-Trimethylhexanol. Sowohl Isononylalkohol als auch sein Acetat werden in der Parfümindustrie als Parfümkomponenten eingesetzt. Der Duft dieser Verbindungen ist stark abweichend von demjenigen der 3,5,5-Trimethylhexansäureester der Formel I. Obwohl sowohl Methyl- als auch Äthylester der 3,5,5-Trimethylhexansäure bereits seit langer Zeit literaturbekannt sind (J. Chem. Soc. 1951, 2545 und J. Prakt. Chem. (4), 14, 71 [1961]), ist deren Verwendungsmöglichkeit als Riechstoffe bisher nicht beschrieben worden. Es konnte demnach aus der Eignung der Ester des Isononylalkohols als Parfümkomponente kein Schluss auf die Riechstoffeigenschaften der Ester der 3,5,5-Trimethylhexansäure gezogen werden.

Die nachfolgenden Beispiele sollen den Gegenstand der Erfindung näher erläutern, ohne ihn jedoch hierauf zu beschränken.

Beispiele

Auf üblichem Wege der Veresterung von 3,5,5-Trimethylhexansäure mit dem entsprechenden Alkohol wurden folgende erfindungsgemäss zu verwendende Ester hergestellt:

A) 3,5,5-Trimethylhexansäuremethylester

Kp₁₂ 70 °C n_D²⁰ 1,4200

Geruch: Bergamotte-Note

B) 3,5,5-Trimethylhexansäureäthylester

Kp₁₂ 79 °C n_D²⁰ 1,4205

Geruch: Apfelnote, Weinhefenote

C) 3,5,5-Trimethylhexansäurepropylester

Kp₁₅ 101 °C n_D²⁰ 1,4231

Geruch: fruchtig, Weinhefenote

D) 3,5,5-Trimethylhexansäureisopropylester

Kp₁₆ 91 °C n_D²⁰ 1,4193

Geruch: holzig, fruchtig

E) 3,5,5-Trimethylhexansäure-n-butylester

Kp₁₆ 117 °C n_D²⁰ 1,4268

Geruch: fettig, Walnussnote, Liebstocknote

F) 3,5,5-Trimethylhexansäureallylester

Kp₁₅ 101 °C n_D²⁰ 1,4328

Geruch: blumig, grün, fruchtig-sauer

G) 3,5,5-Trimethylhexansäurepropargylester

Kp₁₅ 112 °C n_D²⁰ 1,4387

Geruch: Geraniumnote, Pelargoniumnote, Carveylacetatnote

Beispiel 1

Kölnischwasser-Formulierung

3,5,5-Trimethylhexansäuremethylester	150 Gew.-Teile
Bergamottöl	260 Gew.-Teile
Citronenöl	250 Gew.-Teile
Petitgrainöl bigarade	100 Gew.-Teile
Portugalöl Guinea	80 Gew.-Teile
Neroliöl bigarade	50 Gew.-Teile
Lavendelöl franz.	35 Gew.-Teile
Rosmarinöl tunesisch	30 Gew.-Teile
Linalool	20 Gew.-Teile
Isonal, Givaudan	20 Gew.-Teile
Sauge Sclarée	5 Gew.-Teile
	<u>1000 Gew.-Teile</u>

Beispiel 2

Frucht/Grün-Komplex

3,5,5-Trimethylhexansäureäthylester	100 Gew.-Teile
Phenyläthylalkohol	250 Gew.-Teile
5 Portugalöl, süß, Guinea	180 Gew.-Teile
Bergamottöl	170 Gew.-Teile
Geranylacetat	100 Gew.-Teile
Diphenylmethan	70 Gew.-Teile
Hexylacetat	50 Gew.-Teile
10 Aldehyd C16 sog.	40 Gew.-Teile
Undecalacton	30 Gew.-Teile
Styrallylacetat	10 Gew.-Teile
	<u>1000 Gew.-Teile</u>