

(19)



(11)

EP 1 900 800 A2

(12)

EUROPÄISCHE PATENTANMELDUNG

(43) Veröffentlichungstag:

19.03.2008 Patentblatt 2008/12

(51) Int Cl.:

C11B 9/00 (2006.01)

(21) Anmeldenummer: **07115395.1**

(22) Anmeldetag: **31.08.2007**

(84) Benannte Vertragsstaaten:

**AT BE BG CH CY CZ DE DK EE ES FI FR GB GR
HU IE IS IT LI LT LU LV MC MT NL PL PT RO SE
SI SK TR**

Benannte Erstreckungsstaaten:

AL BA HR MK YU

(30) Priorität: **11.09.2006 DE 102006043226**

(71) Anmelder: **Symrise GmbH & Co. KG
37603 Holzminden (DE)**

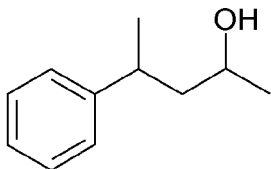
(72) Erfinder: **Hölscher, Bernd
37620, Halle (DE)**

(74) Vertreter: **Eisenführ, Speiser & Partner
Patentanwälte Rechtsanwälte
Postfach 10 60 78
28060 Bremen (DE)**

(54) **4-Phenyl-pentan-2-ol als Riech- und Aromastoff**

(57) Beschrieben wird die Verwendung von 4-Phenyl-pentan-2-ol (I)

als Riech- oder Aromastoff.



(I)

EP 1 900 800 A2

Beschreibung

[0001] Die vorliegende Erfindung betrifft die Verwendung von 4-Phenyl-pentan-2-ol als Riech- und Aromastoff. Die Erfindung betrifft zudem parfümierte oder aromatisierte Artikel umfassend diese Verbindung sowie entsprechende Verfahren zum Vermitteln, Modifizieren und/oder Verstärken bestimmter Geruchs- und/oder Geschmacksnoten. Beschrieben werden ferner Verfahren zur Herstellung von 4-Phenyl-pentan-2-ol.

[0002] Trotz einer Vielzahl bereits vorhandener Riechstoffe besteht in der Parfümindustrie auch weiterhin ein genereller Bedarf an neuen Riechstoffen. So besteht ein Bedarf an Riechstoffen mit interessanten grünen Duftnoten, die in der Lage sind (in Riechstoffkompositionen) neben einer grünen Duftnote weitere interessante Geruchsnoten, wie beispielsweise fruchtige Noten, zu erzeugen und mit ihren neuartigen bzw. originellen Dufteigenschaften die Möglichkeiten des Parfümeurs zu erweitern. Insbesondere besteht ein Interesse an Riechstoffen mit grünen und fruchtigen Duftnoten, welche in der Lage sind, eine harmonische Kombination mit blumig duftenden Riechstoffen einzugehen.

[0003] Vorzugsweise sollte eine Überlagerung der unterschiedlichen geruchlichen Aspekte und Noten erfolgen, um dadurch einen insgesamt komplexen Geruchseindruck zu erzeugen.

[0004] Für die Kreation neuartiger moderner Kompositionen besteht ein ständiger Bedarf an Riechstoffen mit besonderen geruchlichen Eigenschaften, die geeignet sind, als Grundlage für die Komposition von neuartigen modernen Parfüms mit komplexem Geruchscharakter zu dienen. Bevorzugte gesuchte Riechstoffe sollten neben einer grünen, fruchtigen Duftnote weitere Noten und Aspekte aufweisen, die ihnen geruchlichen Charakter und Komplexität verleihen.

[0005] Die Suche nach geeigneten Riechstoffen, die zur vorliegenden Erfindung führte, wurde durch folgende Sachverhalte erschwert:

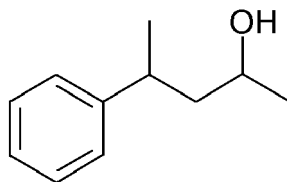
- Die Mechanismen der Geruchswahrnehmung sind nicht ausreichend bekannt.
- Die Zusammenhänge zwischen der speziellen Geruchswahrnehmung einerseits und der chemischen Struktur des zugehörigen Riechstoffs andererseits sind nicht hinreichend erforscht.
- Häufig bewirken bereits geringfügige Änderungen am strukturellen Aufbau eines bekannten Riechstoffs starke Änderungen der sensorischen Eigenschaften und beeinträchtigen die Verträglichkeit für den menschlichen Organismus.

[0006] Der Erfolg der Suche nach geeigneten Riechstoffen hängt deshalb stark von der Intuition des Suchenden ab.

[0007] Daher bestand die dieser Erfindung zugrunde liegende Aufgabe im Wesentlichen darin, Riechstoffe mit grünen, fruchtigen Duftnoten zu finden, welche vorzugsweise gepaart sind mit weiteren interessanten und originellen geruchlichen Eigenschaften, wodurch die gesuchten Riechstoffe neuartige und originelle Riechstoffkompositionen mit besonderen geruchlichen Noten und Aspekten ermöglichen. Insbesondere sollten Riechstoffe mit grünen, fruchtigen Duftnoten gefunden werden, welche insbesondere zur Kombination mit Riechstoffen geeignet sind, welche eine holzige und/oder blumige Duftnote aufweisen.

[0008] Daneben sollten die diese Hauptaufgabe erfüllenden Riechstoffe ferner vorzugsweise über ihre primären, nämlich geruchlichen, Eigenschaften hinaus zusätzliche positive Sekundäreigenschaften besitzen, wie z.B. eine höhere Stabilität unter bestimmten Anwendungsbedingungen, eine höhere Ausgiebigkeit, ein besseres Haftungsvermögen, eine hohe Substantivität, eine bemerkenswerte Booster-Wirkung oder ein starkes Blooming, so dass sensorisch bemerkenswerte Effekte oder aber auch bessere dermatologische und toxikologische Eigenschaften gegenüber vergleichbaren Riechstoffen erzielt werden können.

[0009] Erfindungsgemäß gelöst wird die primäre gestellte Aufgabe durch die Verwendung von 4-Phenyl-pentan-2-ol der Formel (I)



(I)

als Riech- oder Aromastoff.

[0010] Das erfindungsgemäß zu verwendende 4-Phenyl-pentan-2-ol der Formel (I) besitzt zwei chirale Zentren. Die Verbindung der Formel (I) kann dabei syn- oder antikfiguriert sein, als (R,R)-konfiguriertes Enantiomer, (R,S)-konfiguriertes Enantiomer, (S,R)-konfiguriertes Enantiomer, (S,S)-konfiguriertes oder als beliebiges Gemisch der Enantiomeren, insbesondere als Racemat, oder auch als beliebiges Gemisch der entsprechenden Diastereomeren, vorliegen.

[0011] Die gestellte Aufgabe wird zudem gelöst durch die Verwendung von 4-Phenyl-pentan-2-ol der Formel (I) als Riech- oder Aromastoff mit grünen, fruchtigen Noten.

[0012] Weitere Aspekte der Erfindung ergeben sich aus den beigefügten Patentansprüchen und der folgenden Beschreibung; diese Aspekte betreffen dabei insbesondere neue parfümierte oder aromatisierte Artikel und entsprechende Verfahren.

[0013] Die Geruchseigenschaften der erfindungsgemäß zu verwendenden Verbindung 4-Phenyl-pentan-2-ol der Formel (I) werden von den Parfümeuren wie folgt beschrieben: sehr stark strahlend, interessante grüne, fruchtige Duftnote in Richtung Grapefruit und Rhabarber, sehr natürlicher Geruchseindruck.

[0014] Insbesondere kann die Verbindung der Formel (I) zum Vermitteln, Modifizieren und/oder Verstärken einer grünen, fruchtigen Geruchs- und/oder Geschmacksnote eingesetzt werden.

[0015] In J. Chem. Soc., Chem. Commun. (1982), 348 wird die Synthese von (R,S)-4-Phenyl-pentan-2-ol mittels Hydrierung chiraler Homoallylalkohole beschrieben.

[0016] Eur. J. Org. Chem. 2002, 16, 2472-2757, J. Org. Chem. 2000, 65, 4281-4288, Chem. Commun. 1998, 19, 2127-2128 und Tetrahedron Lett. 1998, 39, 8829-8832 befassen sich mit der stereoselektiven radikalischen Arylmigration, wobei auch die Herstellung von 4-Phenyl-pentan-2-ol der Formel (I) eingehend untersucht wurde.

[0017] Eine sensorische Beschreibung von 4-Phenyl-pentan-2-ol der Formel (I) wurde bislang nicht angegeben.

[0018] Im Journal f. prakt. Chemie Band 319, Heft 4, 1977, 601 wird die katalytische Spaltung substituierter 1,3-Dioxane beschrieben, die erfindungsgemäß zu verwendende Verbindung 4-Phenyl-pentan-2-ol ist in diesem Artikel jedoch nicht erwähnt.

[0019] Die Geruchsbeschreibungen von aus eigenen Untersuchungen und aus der Literatur (S. Arctander, Perfume and Flavor Materials, Vol. I und II, Montclair, N. J. 1969, Eigenverlag) bekannten Phenylpentanolen lassen sich wie folgt zusammenfassen:

5-Phenyl-pentan-1-ol: süß-krautig, Citrus-Note, Verbena-Note

5-Phenyl-pentan-3-ol: balsamisch, blumig, erdig-grün-würzig

1-Phenyl-pentan-2-ol: leicht grün, süß, feucht-erdig

[0020] Eine gewisse strukturelle Ähnlichkeit der erfindungsgemäß einzusetzenden Verbindung der Formel (I) besteht auch zu dem als Riechstoff bekannten tertiären Alkohol 4-Phenyl-2-methyl-2-butanol (α,α -Dimethylphenylethylcarbinol), der allerdings einen trockenen, rosig-blumigen, lilienähnlichen Geruch aufweist.

[0021] Auch andere Phenylalkane, welche Seitenketten mit mehr oder weniger C-Atomen aufweisen als die erfindungsgemäß einzusetzende Verbindung der Formel (I), zeigen eine andere Geruchscharakteristik als diese (siehe Common Fragrance and Flavor Materials, 4th Edition, Wiley-VCH, Weinheim 2001):

Dihydrozimtalkohol (3-Phenylpropanol) besitzt einen fruchtigen Zimtgeruch.

2-Methyl-5-phenylpentanol (unter dem Namen Rosaphen kommerziell erhältlich) verfügt über einen Duft von Rosenblüten mit einer leicht wachsigen Note.

3-Methyl-5-phenylpentanol (unter dem Namen Phenoxanol kommerziell erhältlich) ist für seinen langanhaltenden diffusiven, frischen, floralen Rosengeruch bekannt.

[0022] Entsprechend dem beschriebenen Stand der Technik das Gebiet der Phenylpentanole als gut untersucht, und daher ist es besonders unerwartet, dass in diesem Gebiet ein weiterer wertvoller Riechstoff gefunden werden konnte. Die Verbindung der Formel (I) verfügt über ganz eigenständige olfaktorische Eigenschaften, die sich deutlich von den bekannten Riechstoffen ähnlicher Struktur abheben. Die Eignung der erfindungsgemäß zu verwendenden Verbindung der Formel (I) als Riech- oder Aromastoff für den Einsatz in der Riech- und Aromenindustrie war bislang nicht bekannt und ist überraschend.

[0023] Es ist besonders überraschend, dass das erfindungsgemäß zu verwendende 4-Phenyl-pentan-2-ol neben den grün-fruchtigen Aspekten eine ausdrucksstarke Rhabarber-Note mit zusätzlichen, teilweise sehr komplexen und facettenreichen Aspekten aufweist, denn aufgrund der Anwesenheit dieser weiteren zusätzlichen Aspekte unterscheidet sich die erfindungsgemäß zu verwendende Verbindung sehr deutlich von strukturell vergleichbaren und bekannten Substanzen (siehe oben) und vermittelt einen sehr komplexen und vielfältigen Geruchs- und Geschmackseindruck, der sonst

nur durch komplexe Mischungen mehrerer Komponenten erreicht werden kann (wie beispielsweise durch ätherische Öle oder Kräuter- bzw. Gewürzmischungen).

[0024] In Mischungen mit anderen Riechstoffen vermag das erfindungsgemäß einzusetzende 4-Phenyl-pentan-2-ol bereits in geringen Dosierungen die Intensität einer Riechstoffmischung zu verstärken und das Gesamtbild der Riechstoffmischung geruchlich abzurunden und zu harmonisieren sowie der Mischung mehr (Aus)Strahlung sowie Natürlichkeit zu verleihen.

[0025] Im Rahmen der erfindungsgemäßen Verwendung von 4-Phenyl-pentan-2-ol als Riech- oder Aromastoff (insbesondere mit grüner fruchtiger Note) betrifft die vorliegende Erfindung auch die Verwendung zum Versehen von (a) Haaren, (b) Haut oder (c) textilen Fasern mit einem -Duft, insbesondere einem grünen fruchtigen Duft (hinsichtlich weiterer Geruchs- bzw. Geschmacksnoten s. oben). Die vorliegende Erfindung betrifft auch entsprechende Verfahren und (vorzugsweise tensidhaltige) Mischungen. Gemäß einem verwandten Aspekt betrifft die vorliegende Erfindung auch die Verwendung von 4-Phenyl-pentan-2-ol als Mittel zum Erhöhen der Substantivität und/oder Retention einer Riechstoffmischung und/oder als Fixateur und/oder als Mittel zum Erhöhen des über einer tensidhaltigen wässrigen Lösung wahrgenommenen Geruches anderer Riechstoffe.

[0026] Im Zusammenhang mit der bevorzugten Verwendung zum Modifizieren und/oder Verstärken einer Geruchs- und/oder Geschmacksnote steht auch die Erkenntnis, dass das erfindungsgemäß zu verwendende 4-Phenyl-pentan-2-ol hervorragend als sogenannter Booster (Verstärker; Enhancer) fungieren kann.

[0027] Das erfindungsgemäß zu verwendende 4-Phenyl-pentan-2-ol besitzt über seine primären, nämlich geruchlichen Eigenschaften hinaus zusätzliche positive Sekundäreigenschaften, wie z. B. eine hohe Stabilität unter bestimmten Anwendungsbedingungen, eine hohe Ausgiebigkeit, ein gutes Haftungsvermögen, eine hohe Substantivität. 4-Phenyl-pentan-2-ol der Formel (I) kann insbesondere eingesetzt werden, um einer Riech- oder Aromastoffkomposition (Aus) Strahlung, Abrundung und/oder Harmonie zu verleihen und/oder vorhandene Geruchs- und/oder Geschmacksnoten zu verstärken.

[0028] Die vorliegende Erfindung betrifft auch parfümierte oder aromatisierte Artikel umfassend

(a) die Verwendung von 4-Phenyl-pentan-2-ol der Formel (I), vorzugsweise in einer Menge, die ausreicht, eine Geruchs- oder Geschmacksnote des Typs grün, fruchtig, insbesondere in Richtung Grapefruit und Rhabarber, zu vermitteln, zu modifizieren und/oder zu verstärken sowie

(b) einen, zwei, drei oder mehr weitere Riech- oder Aromastoffe wobei der oder die weiteren Riech- oder Aromastoffe vorzugsweise einen holzigen und/oder blumigen Geruch und/oder Geschmack vermitteln.

[0029] Die vorstehend und nachfolgend mit Blick auf die erfindungsgemäßen Verwendungen beschriebenen bevorzugten Ausgestaltungen der Erfindung gelten entsprechend auch für erfindungsgemäße parfümierte oder aromatisierte Artikel.

[0030] 4-Phenyl-pentan-2-ol wird im Rahmen der erfindungsgemäßen Verwendung üblicherweise in sensorisch wirksamen Mengen eingesetzt. Häufig soll das erfindungsgemäß zu verwendende 4-Phenyl-pentan-2-ol mit anderen Riech- oder Aromastoffen gemischt oder kombiniert werden. Das Gewichtsverhältnis der Gesamtmenge an 4-Phenyl-pentan-2-ol zu der Gesamtmenge an weiteren Riech- oder Aromastoffen liegt dann vorzugsweise im Bereich von 1: 1000 bis 1: 0,5, vorzugsweise 1: 100 bis 1: 0,5.

[0031] Vorzugsweise handelt es sich bei einem erfindungsgemäßen parfümierten oder aromatisierten Artikel um eine Riech- oder Aromastoffkomposition. Durch Kombination von 4-Phenyl-pentan-2-ol mit einem, zwei, drei oder mehr weiteren Riech- oder Aromastoffen (mit vorzugsweise holzigem und/oder blumigem Geruch oder Geschmack) lassen sich neue Riech- oder Aromastoffkompositionen bilden. Auf diese Weise lassen sich besonders interessante und natürliche neue und originelle Duftnoten kreieren. Riechstoffe (als Komponente (b)), die zur Kombination mit 4-Phenyl-pentan-2-ol vorteilhafterweise geeignet sind, finden sich z. B. in S. Arctander, Perfume and Flavor Materials, Vol. I und II, Montclair, N. J. 1969, Eigenverlag, oder K. Bauer et al., Common Fragrance and Flavor Materials, 4th Edition, Wiley-VCH, Weinheim 2001. Im einzelnen seien genannt:

(i) Extrakte aus natürlichen Rohstoffen wie Etherische Öle, Concretes, Absolues, Resine, Resinoide, Balsame, Tinkturen wie z. B.

Ambratinktur; Amyrisöl; Angelicasamenöl; Angelicawurzelöl; Anisöl; Baldrianöl; Basilikumöl; Baummoos -Absolue; Bayöl; Beifußöl; Benzoeresin; Bergamotteöl; Bienenwachs-Absolue; Birkenteeröl; Bittermandelöl; Bohnenkrautöl; Buccoblätteröl; Cabreuvaöl; Cadeöl; Calmusöl; Campheröl; Canangaöl; Cardamomenöl; Cascarellaöl; Cassiaöl; Cassie-Absolue; Castoreum-absolue; Cedernblätteröl; Cedernholzöl; Cistusöl; Citronellöl; Citronenöl; Copaivabalsam; Copaivabalsamöl; Corianderöl; Costuswurzelöl; Cuminöl; Cypressenöl; Davanaöl; Dillkrautöl; Dillsamenöl; Eau de brouts-Absolue; Eichenmoos-Absolue; Elemiöl; Estragonöl; Eucalyptus-citriodora-Öl; Eucalyptusöl; Fenchelöl; Fichtennadelöl; Galbanumöl; Galbanumresin; Geraniumöl; Grapefruitöl; Guajakholzöl; Gurjunbalsam;

Gurjunbalsamöl; Helichrysum-Absolue; Helichrysumöl; Ingweröl; Iriswurzel-Absolue; Iriswurzelöl; Jasmin-Absolue; Kalmusöl; Kamillenöl blau; Kamillenöl römisch; Karottensamenöl; Kaskarillaöl; Kiefernadelöl; Krauseminzöl; Kümmelöl; Labdanumöl; Labdanum-Absolue; Labdanumresin; Lavandin-Absolue; Lavandinöl; Lavendel-Absolue; Lavendelöl; Lemongrasöl; Liebstocköl; Limetteöl destilliert; Limetteöl gepreßt; Linaloeöl; Litsea-cubeba-Öl; Lorbeerblätteröl; Macisöl; Majoranöl; Mandarinenöl; Massoirindenöl; Mimosa-Absolue; Moschuskörneröl; Moschustinktur; Muskateller-Salbei-Öl; Muskatnußöl; Myrrhen-Absolue; Myrrhenöl; Myrtenöl; Nelkenblätteröl; Nelkenblütenöl; Neroliöl; Olibanum-Absolue; Olibanumöl; Opopanaxöl; Orangenblüten-Absolue; Orangenöl; Origanumöl; Palmarosaöl; Patchouliöl; Perillaöl; Perubalsamöl; Petersilienblätteröl; Petersiliensamenöl; Petitgrainöl; Pfefferminzöl; Pfefferöl; Pimentöl; Pineöl; Poleyöl; Rosen-Absolue; Rosenholzöl; Rosenöl; Rosmarinöl; Salbeiöl dalmatinisch; Salbeiöl spanisch; Sandelholzöl; Selleriesamenöl; Spiklavendelöl; Sternanisöl; Styraxöl; Tagetesöl; Tannennadelöl; Tea-tree-Öl; Terpentinöl; Thymianöl; Tolubalsam; Tonka-Absolue; Tuberosen-Absolue; Vanilleextrakt; Veilchenblätter-Absolue; Verbenaöl; Vetiveröl; Wacholderbeeröl; Weinhefenöl; Wermutöl; Wintergrünöl; Ylangöl; Ysopöl; Zibet-Absolue; Zimtblätteröl; Zimtrindenöl sowie Fraktionen davon, bzw. daraus isolierten Inhaltsstoffen;

(ii) Einzel-Riechstoffe aus der Gruppe der Kohlenwasserstoffe, wie z.B. 3-Caren; α -Pinen; β -Pinen; α -Terpinen; γ -Terpinen; p-Cymol; Bisabolen; Camphen; Caryophyllen; Cedren; Farnesen; Limonen; Longifolen; Myrcen; Ocimen; Valencen; (E,Z)-1,3,5-Undecatrien; Styrol; Diphenylmethan;

der aliphatischen Alkohole wie z.B. Hexanol; Octanol; 3-Octanol; 2,6-Dimethylheptanol; 2-Methyl-2-heptanol; 2-Methyl-2-octanol; (E)-2-Hexenol; (E)- und (Z)-3-Hexenol; 1-Octen-3-ol; Gemisch von 3,4,5,6,6-Pentamethyl-3/4-hepten-2-ol und 3,5,6,6-Tetramethyl-4-methyleneheptan-2-ol; (E,Z)-2,6-Nonadienol; 3,7-Dimethyl-7-methoxyoctan-2-ol; 9-Decenol; 10-Undecenol; 4-Methyl-3-decen-5-ol;

der aliphatischen Aldehyde und deren Acetale wie z.B. Hexanal; Heptanal; Octanal; Nonanal; Decanal; Undecanal; Dodecanal; Tridecanal; 2-Methyloctanal; 2-Methylnonanal; (E)-2-Hexenal; (Z)-4-Heptenal; 2,6-Dimethyl-5-heptenal; 10-Undecenal; (E)-4-Decenal; 2-Dodecenal; 2,6,10-Trimethyl-9-undecenal; 2,6,10-Trimethyl-5,9-undecadienal; Heptanaldiethylacetal; 1,1-Dimethoxy-2,2,5-trimethyl-4-hexen; Citronellyloxyacetaldehyd; 1-(1-Methoxy-propoxy)-(E/Z)-3-hexen;

der aliphatischen Ketone und deren Oxime wie z.B. 2-Heptanon; 2-Octanon; 3-Octanon; 2-Nonanon; 5-Methyl-3-heptanon; 5-Methyl-3-heptanonoxim; 2,4,4,7-Tetramethyl-6-octen-3-on; 6-Methyl-5-hepten-2-on;

der aliphatischen schwefelhaltigen Verbindungen wie z.B. 3-Methylthio-hexanol; 3-Methylthiohexylacetat; 3-Mercaptohexanol; 3-Mercaptohexylacetat; 3-Mercaptohexylbutyrat; 3-Acetylthiohexylacetat; 1-Menthen-8-thiol;

der aliphatischen Nitrile wie z.B. 2-Nonensäurenitril; 2-Undecensäurenitril; 2-Tridecensäurenitril; 3,12-Tridecadiensäurenitril; 3,7-Dimethyl-2,6-octadien-säurenitril; 3,7-Dimethyl-6-octensäurenitril;

der Ester von aliphatischen Carbonsäuren wie z.B. (E)- und (Z)-3-Hexenylformiat; Ethylacetoacetat; Isoamylacetat; Hexylacetat; 3,5,5-Trimethylhexylacetat; 3-Methyl-2-butenylacetat; (E)-2-Hexenylacetat; (E)- und (Z)-3-Hexenylacetat; Octylacetat; 3-Octylacetat; 1-Octen-3-ylacetat; Ethylbutyrat; Butylbutyrat; Isoamylbutyrat; Hexylbutyrat; (E)- und (Z)-3-Hexenyl-isobutyrate; Hexylcrotonat; Ethylisovalerianat; Ethyl-2-methylpentanoat; Ethylhexanoat; Allylhexanoat; Ethylheptanoat; Allylheptanoat; Ethyloctanoat; Ethyl-(E,Z)-2,4-decadienoat; Methyl-2-octinat; Methyl-2-noninat; Allyl-2-isoamylxyacetat; Methyl-3,7-dimethyl-2,6-octadienoat; 4-Methyl-2-pentylcrotonat;

der acyclischen Terpenalkohole wie z. B. Citronellol; Geraniol; Nerol; Linalool; Lavandulol; Nerolidol; Farnesol; Tetrahydrolinalool; Tetrahydrogeraniol; 2,6-Dimethyl-7-octen-2-ol; 2,6-Dimethyloctan-2-ol; 2-Methyl-6-methylen-7-octen-2-ol; 2,6-Dimethyl-5,7-octadien-2-ol; 2,6-Dimethyl-3,5-octadien-2-ol; 3,7-Dimethyl-4,6-octadien-3-ol; 3,7-Dimethyl-1,5,7-octatrien-3-ol; 2,6-Dimethyl-2,5,7-octatrien-1-ol; sowie deren Formiate, Acetate, Propionate, Isobutyrate, Butyrate, Isovalerianate, Pentanoate, Hexanoate, Crotonate, Tiglinate und 3-Methyl-2-butennoate;

der acyclischen Terpenaldehyde und -ketone wie z. B. Geranial; Neral; Citronellal; 7-Hydroxy-3,7-dimethyloctanal; 7-Methoxy-3,7-dimethyloctanal; 2,6,10-Trimethyl-9-undecenal; Geranylaceton; sowie die Dimethyl- und Diethylacetale von Geranial, Neral, 7-Hydroxy-3,7-dimethyloctanal;

der cyclischen Terpenalkohole wie z. B. Menthol; Isopulegol; α -Terpineol; Terpinenol-4; Menthan-8-ol;

Menthan-1-ol; Menthan-7-ol; Borneol; Isoborneol; Linalooloxid; Nopol; Cedrol; Ambrinol; Vetiverol; Guajol; sowie deren Formiate, Acetate, Propionate, Isobutyrate, Butyrate, Isovalerianate, Pentanoate, Hexanoate, Crotonate, Tigllinate und 3-Methyl-2-butenooate;

der cyclischen Terpenaldehyde und -ketone wie z. B. Menthon; Isomenthon ; 8-Mercaptomenthan-3-on ; Carvon; Campher; Fenchon; alpha-Ionon; beta-Ionon; alphan-Methylionon; beta-n-Methylionon; alpha-Isomethylionon; beta-Isomethylionon; alpha-Iron; alpha-Damascon; beta-Damascon; beta-Damascenon; delta-Damascon; gamma-Damascon; 1-(2,4,4-Trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)-2-buten-1-on; 1,3,4,6,7,8a-Hexahydro-1,1,5,5-tetramethyl-2H-2,4a-methanonaphthalen-8(5H)-on; 2-Methyl-4-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)-2-butenal; Nootkaton ; Dihydronootkaton ; 4,6,8-Megastigmatrien-3-on; alpha-Sinensal ; beta-Sinensal ; acetyliertes Cedernholzöl (Methylcedrylketon);

der cyclischen Alkohole wie z.B. 4-tert.-Butylcyclohexanol ; 3,3,5-Trimethylcyclohexanol; 3-Isocamphylcyclohexanol; 2,6,9-Trimethyl-2,2,5,9-cyclododecatrien-1-ol; 2-Isobutyl-4-methyltetrahydro-2H-pyran-4-ol;

der cycloaliphatischen Alkohole wie z.B. alpha,3,3-Trimethylcyclohexylmethanol; 1-(4-Isopropylcyclohexyl)ethanol; 2-Methyl-4-(2,2,3-trimethyl-3-cyclopent-1-yl)butanol; 2-Methyl-4-(2,2,3-trimethyl-3-cyclopent-1-yl)-2-buten-1-ol; 2-Ethyl-4-(2,2,3-trimethyl-3-cyclopent-1-yl)-2-buten-1-ol; 3-Methyl-5-(2,2,3-trimethyl-3-cyclopent-1-yl)-pentan-2-ol; 3-Methyl-5-(2,2,3-trimethyl-3-cyclopent-1-yl)-4-penten-2-ol; 3,3-Dimethyl-5-(2,2,3-trimethyl-3-cyclopent-1-yl)-4-penten-2-ol; 1-(2,2,6-Trimethylcyclohexyl)pentan-3-ol; 1-(2,2,6-Trimethylcyclohexyl)hexan-3-ol;

der cyclischen und cycloaliphatischen Ether wie z.B. Cineol; Cedrylmethylether; Cyclododecylmethylether; 1,1-Dimethoxycyclododecan; (Ethoxymethoxy)cyclododecan; alpha-Cedrenepoxid; 3a,6,6,9a-Tetramethyldodecahydronaphtho[2,1-b]furan; 3a-Ethyl-6,6,9a-trimethyldodecahydronaphtho[2,1-b]furan; 1,5,9-Trimethyl-13-oxabicyclo[10.1.0]trideca-4,8-dien; Rosenoxid; 2-(2,4-Dimethyl-3-cyclohexen-1-yl)-5-methyl-5-(1-methylpropyl)-1,3-dioxan; 2,4,6-Trimethyl-4-phenyl-1,3-dioxan (Vertacetal®; bevorzugte Kombination, siehe unten)

der cyclischen und makrocyclischen Ketone wie z.B. 4-tert.-Butylcyclohexanon; 2,2,5-Trimethyl-5-pentylcyclopentanon; 2-Heptylcyclopentanon; 2-Pentylcyclopentanon; 2-Hydroxy-3-methyl-2-cyclopenten-1-on; 3-Methyl-cis-2-penten-1-yl-2-cyclopenten-1-on; 3-Methyl-2-pentyl-2-cyclopenten-1-on; 3-Methyl-4-cyclopentadecenon; 3-Methyl-5-cyclopentadecenon; 3-Methylcyclopentadecanon; 4-(1-Ethoxyvinyl)-3,3,5,5-tetramethylcyclohexanon; 4-tert.-Pentylcyclohexanon; 5-Cyclohexadecen-1-on; 6,7-Dihydro-1,1,2,3,3-pentamethyl-4(5H)-indanon; 8-Cyclohexadecen-1-on; 9-Cycloheptadecen-1-on; Cyclopentadecanon; Cyclohexadecanon;

der cycloaliphatischen Aldehyde wie z.B. 2,4-Dimethyl-3-cyclohexencarbaldehyd; 2-Methyl-4-(2,2,6-trimethylcyclohexen-1-yl)-2-butenal; 4-(4-Hydroxy-4-methylpentyl)-3-cyclohexencarbaldehyd; 4-(4-Methyl-3-penten-1-yl)-3-cyclohexencarbaldehyd;

der cycloaliphatischen Ketone wie z. B. 1-(3,3-Dimethylcyclohexyl)-4-penten-1-on; 2,2-Dimethyl-1-(2,4-dimethyl-3-cyclohexen-1-yl)-1-propanon; 1-(5,5-Dimethyl-1-cyclohexen-1-yl)-4-penten-1-on; 2,3,8,8-Tetramethyl-1,2,3,4,5,6,7,8-octahydro-2-naphthalenylmethylketon; Methyl-2,6,10-trimethyl-2,5,9-cyclododecatrienylketon; tert.-Butyl-(2,4-dimethyl-3-cyclohexen-1-yl)keton;

der Ester cyclischer Alkohole wie z.B. 2-tert-Butylcyclohexylacetat; 4-tert-Butylcyclohexylacetat; 2-tert-Pentylcyclohexylacetat; 4-tert-Pentylcyclohexylacetat; 3,3,5-Trimethylcyclohexylacetat; Decahydro-2-naphthylacetat; 2-Cyclopentylcyclopentylcrotonat; 3-Pentyltetrahydro-2H-pyran-4-ylacetat; Decahydro-2,5,5,8a-tetramethyl-2-naphthylacetat; 4,7-Methano-3a,4,5,6,7,7a-hexahydro-5, bzw. 6-indenylacetat; 4,7-Methano-3a,4,5,6,7,7a-hexahydro-5, bzw. 6-indenylpropionat; 4,7-Methano-3a,4,5,6,7,7a-hexahydro-5, bzw. 6-indenylisobutyrat; 4,7-Methanooctahydro-5, bzw. 6-indenylacetat;

der Ester cycloaliphatischer Alkohole wie z.B. 1-Cyclohexylethylcrotonat;

der Ester cycloaliphatischer Carbonsäuren wie z. B. Allyl-3-cyclohexylpropionat; Allylcyclohexyloxyacetat; cis- und trans-Methyldihydrojasmonat; cis- und trans-Methyljasmonat; Methyl-2-hexyl-3-oxocyclopentancarboxylat; Ethyl-2-ethyl-6,6-dimethyl-2-cyclohexencarboxylat; Ethyl-2,3,6,6-tetramethyl-2-cyclohexencarboxylat; Ethyl-2-methyl-1,3-dioxolan-2-acetat;

der araliphatischen Alkohole wie z.B. Benzylalkohol; 1-Phenylethylalkohol; 2-Phenylethylalkohol; 3-Phenylpropanol; 2-Phenylpropanol; 2-Phenoxyethanol; 2,2-Dimethyl-3-phenylpropanol; 2,2-Dimethyl-3-(3-methylphenyl)propanol; 1,1-Dimethyl-2-phenylethylalkohol; 1,1-Dimethyl-3-phenylpropanol; 1-Ethyl-1-methyl-3-phenylpropanol; 2-Methyl-5-phenylpentanol; 3-Methyl-5-phenylpentanol; 3-Phenyl-2-propen-1-ol; 4-Methoxybenzylalkohol; 1-(4-Isopropylphenyl)ethanol;

der Ester von araliphatischen Alkoholen und aliphatischen Carbonsäuren wie z.B. Benzylacetat; Benzylpropionat; Benzylisobutyrat; Benzylisovalerianat; 2-Phenylethylacetat; 2-Phenylethylpropionat; 2-Phenylethylisobutyrat; 2-Phenylethylisovalerianat; 1-Phenylethylacetat; alpha-Trichlormethylbenzylacetat; alpha,alpha-Dimethylphenylethylacetat; alpha,alpha-Dimethylphenylethylbutyrat; Cinnamylacetat; 2-Phenoxyethylisobutyrat; 4-Methoxybenzylacetat;

der araliphatischen Ether wie z.B. 2-Phenylethylmethylether; 2-Phenylethylisoamylether; 2-Phenylethyl-1-ethoxyethylether; Phenylacetaldehyddimethylacetal; Phenylacetaldehyddiethylacetal; Hydratropaaldehyddimethylacetal; Phenylacetaldehydglycerinacetal; 2,4,6-Trimethyl-4-phenyl-1,3-dioxan; 4,4a,5,9b-Tetrahydroindeno[1,2-d]-m-dioxin; 4,4a,5,9b-Tetrahydro-2,4-dimethylindeno[1,2-d]-m-dioxin;

der aromatischen und araliphatischen Aldehyde wie z. B. Benzaldehyd; Phenylacetaldehyd; 3-Phenylpropanal; Hydratropaaldehyd; 4-Methylbenzaldehyd; 4-Methylphenylacetaldehyd; 3-(4-Ethylphenyl)-2,2-dimethylpropanal; 2-Methyl-3-(4-isopropylphenyl)propanal; 2-Methyl-3-(4-tert.-butylphenyl)propanal; 2-Methyl-3-(4-isobutylphenyl)propanal; 3-(4-tert.-Butylphenyl)propanal; Zimtaldehyd; alpha-Butylzimtaldehyd; alpha-Amylzimtaldehyd; alpha-Hexylzimtaldehyd; 3-Methyl-5-phenylpentanal; 4-Methoxybenzaldehyd; 4-Hydroxy-3-methoxybenzaldehyd; 4-Hydroxy-3-ethoxybenzaldehyd; 3,4-Methylendioxybenzaldehyd; 3,4-Dimethoxybenzaldehyd; 2-Methyl-3-(4-methoxyphenyl)propanal; 2-Methyl-3-(4-methylenedioxyphenyl)propanal;

der aromatischen und araliphatischen Ketone wie z.B. Acetophenon; 4-Methylacetophenon; 4-Methoxyacetophenon; 4-tert.-Butyl-2,6-dimethylacetophenon; 4-Phenyl-2-butanon; 4-(4-Hydroxyphenyl)-2-butanon; 1-(2-Naphthalenyl)ethanon; 2-Benzofuranylethanon; (3-Methyl-2-benzofuranyl)ethanon; Benzophenon; 1,1,2,3,3,6-Hexamethyl-5-indanylmethylketon; 6-tert.-Butyl-1,1-dimethyl-4-indanylmethylketon; 1-[2,3-dihydro-1,1,2,6-tetramethyl-3-(1-methylethyl)-1H-5-indenyl]ethanon; 5',6',7',8'-Tetrahydro-3',5',5',6',8',8'-hexamethyl-2-acetonaphthon;

der aromatischen und araliphatischen Carbonsäuren und deren Ester wie z.B. Benzoesäure; Phenylelessigsäure; Methylbenzoat; Ethylbenzoat; Hexylbenzoat; Benzylbenzoat; Methylphenylacetat; Ethylphenylacetat; Geranylphenylacetat; Phenylethylphenylacetat; Methylcinnamat; Ethylcinnamat; Benzylcinnamat; Phenylethylcinnamat; Cinnamylcinnamat; Allylphenoxyacetat; Methylsalicylat; Isoamylsalicylat; Hexylsalicylat; Cyclohexylsalicylat; Cis-3-Hexenylsalicylat; Benzylsalicylat; Phenylethylsalicylat; Methyl-2,4-dihydroxy-3,6-dimethylbenzoat; Ethyl-3-phenylglycidat; Ethyl-3-methyl-3-phenylglycidat;

der stickstoffhaltigen aromatischen Verbindungen wie z.B. 2,4,6-Trinitro-1,3-dimethyl-5-tert.-butylbenzol; 3,5-Dinitro-2,6-dimethyl-4-tert.-butylacetophenon; Zimtsäurenitril; 3-Methyl-5-phenyl-2-pentensäurenitril; 3-Methyl-5-phenylpentansäurenitril; Methylantranilat; Methy-N-methylantranilat; Schiff'sche Basen von Methylantranilat mit 7-Hydroxy-3,7-dimethyloctanal, 2-Methyl-3-(4-tert.-butylphenyl)propanal oder 2,4-Dimethyl-3-cyclohexencarbaldehyd; 6-Isopropylchinolin; 6-Isobutylchinolin; 6-sec.-Butylchinolin; 2-(3-Phenylpropyl)pyridin; Indol; Skatol; 2-Methoxy-3-isopropylpyrazin; 2-Isobutyl-3-methoxypyrazin;

der Phenole, Phenylether und Phenylester wie z.B. Estragol; Anethol; Eugenol; Eugenylmethylether; Isoeugenol; Isoeugenylmethylether; Thymol; Carvacrol; Diphenylether; beta-Naphthylmethylether; beta-Naphthylethylether; beta-Naphthylisobutylether; 1,4-Dimethoxybenzol; Eugenylacetat; 2-Methoxy-4-methylphenol; 2-Ethoxy-5-(1-propenyl)phenol; p-Kresylphenylacetat;

der heterocyclischen Verbindungen wie z.B. 2,5-Dimethyl-4-hydroxy-2H-furan-3-on; 2-Ethyl-4-hydroxy-5-methyl-2H-furan-3-on; 3-Hydroxy-2-methyl-4H-pyran-4-on; 2-Ethyl-3-hydroxy-4H-pyran-4-on;

der Lactone wie z.B. 1,4-Octanolid; 3-Methyl-1,4-octanolid; 1,4-Nonanolid; 1,4-Decanolid; 8-Decen-1,4-olid; 1,4-Undecanolid; 1,4-Dodecanolid; 1,5-Decanolid; 1,5-Dodecanolid; 4-Methyl-1,4-decanolid; 1,15-Pentadecanolid; cis- und trans-11-Pentadecen-1,15-olid; cis- und trans-12-Pentadecen-1,15-olid; 1,16-Hexadecanolid; 9-Hexadecen-1,16-olid; 10-Oxa-1,16-hexadecanolid; 11-Oxa-1,16-hexadecanolid; 12-Oxa-1,16-hexadecanolid;

Ethylen-1,12-dodecandioat; Ethylen-1,13-tridecandioat; Cumarin; 2,3-Dihydrocumarin; Octahydrocumarin.

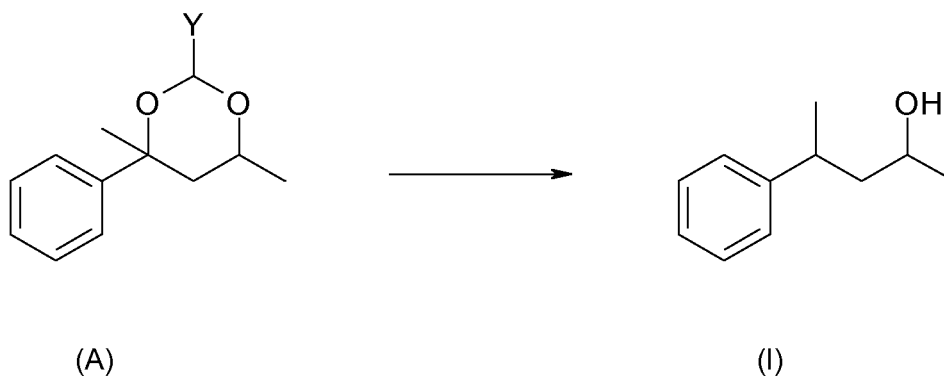
[0032] Eine erfindungsgemäße Riech- oder Aromastoffkomposition lässt sich beispielsweise herstellen, indem 4-Phenyl-pentan-2-ol als Komponente (a) mit einer oder mehreren weiteren Riech- oder Aromastoffen (als Komponente (b)) vermischt wird. Die Komponente (a) wird dabei regelmäßig in einer Menge eingesetzt, die ausreicht, in der fertigen Komposition eine Geruchs- oder Geschmacksnote des Typs grün, fruchtig zu vermitteln, zu modifizieren und/oder zu verstärken.

[0033] Eine erfindungsgemäße Riech- oder Aromastoffkompositionen umfasst vorzugsweise eine Gesamtmenge von 4-Phenyl-pentan-2-ol (Komponente (a)) im Bereich von 0,01 bis 50 Gew.-%, vorzugsweise 0,1 bis 25 Gew.-% und besonders bevorzugt 0,5 bis 20 Gew.-%, bezogen auf die Gesamtmenge der Riech- oder Aromastoffkomposition.

[0034] Sofern das erfindungsgemäß zu verwendende 4-Phenyl-pentan-2-ol hauptsächlich eingesetzt wird, um einer Riech- oder Aromastoffkomposition mehr (Aus)Strahlung, Abrundung und/oder Harmonie zu verleihen und/oder bestimmte Noten zu verstärken, liegt ihre Gesamtmenge vorzugsweise vergleichsweise niedrig und besonders bevorzugt im Bereich von 0,01 bis 5 Gew.-%, bevorzugt im Bereich von 0,1 bis 2 Gew.-%, bezogen auf die Gesamtmenge der Riech- oder Aromastoffkomposition. Sofern innerhalb der bevorzugten Konzentrationsbereiche eine vergleichsweise niedrige Konzentration gewählt wird, kommt es in Abhängigkeit von den weiteren Komponenten der jeweiligen Komposition in manchen Fällen noch nicht zu der Vermittlung der oben angegebenen Eigengeruchs- oder -geschmacksnoten.

[0035] Die Herstellung des erfindungsgemäß zu verwendenden 4-Phenyl-pentan-2-ol kann mittels an sich bekannter Reaktionen und Verfahren erfolgen.

[0036] Zum Beispiel kann 4-Phenyl-pentan-2-ol der Formel (I) in Anlehnung an die Literatur (Journal f. prakt. Chemie Band 319, Heft 4, 1977, 601-610) über eine katalytische Spaltung substituierter 1,3-Dioxane der Formel (A) hergestellt werden (siehe nachfolgendes Formelschema).



wobei Y entweder Wasserstoff oder einen Alkylrest mit 1 bis 10 C-Atomen bedeutet, vorzugsweise bedeutet Y Methyl oder Ethyl.

[0037] Bevorzugtes Edukt der Formel (A) ist 2,4,6-Trimethyl-4-phenyl-1,3-dioxan (Formel (A) mit Y = Methyl), welches in US 6,114,301 beschrieben und unter dem Namen Vertacetal® oder Vertacetal® Coeur (Symrise GmbH & Co. KG, Deutschland) kommerziell erhältlich ist. Dieses Edukt besitzt selber einen Geruch in Richtung Grapefruit und Rhabarber und kann hervorragend mit 4-Phenyl-pentan-2-ol kombiniert werden, um neue Artikel wie Riech- oder Aromastoffkompositionen zur Verfügung zu stellen.

[0038] Die katalytische Hydrierung wird in Gegenwart eines Hydrierkatalysators vorzugsweise im Bereich von 160 - 240 °C bei einem Wasserstoffdruck im Bereich von 20 bis 50 durchgeführt.

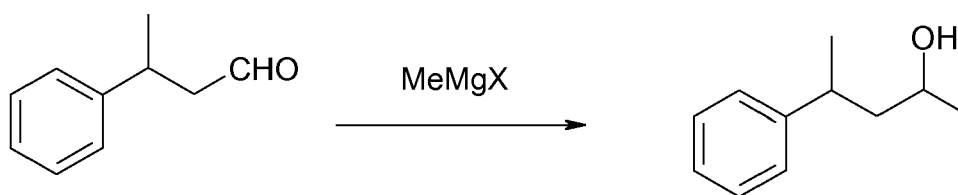
[0039] Geeignete Hydrierkatalysatoren können beispielsweise Ruthenium, Rhodium, Iridium, Nickel, Palladium oder Platin enthalten. Vorteilhafte Hydrierkatalysatoren enthalten Palladium, Platin, Ruthenium oder Rhodium, besonders bevorzugter Hydrierkatalysator ist (elementares) Palladium.

[0040] Die erfindungsgemäß zu verwendenden Hydrierkatalysatoren können auf organische oder anorganische Trägermaterialien aufgebracht sein. Die Hydrierkatalysatoren können ein Trägermaterial oder Mischungen von Trägermaterialien enthalten. Als vorteilhafte Trägermaterialien seien genannt: Aktivkohle, Kohle, Aluminiumoxide, Metalloxide, Kieselgele, Zeolithe, Tone, Tongranulate, amorphe Aluminiumsilicate und sonstige anorganische Träger. Ein bevorzugtes Trägermaterial ist Aktivkohle.

[0041] Ganz besonders bevorzugte Katalysatoren sind Palladium auf Aktivkohle und Palladium auf Aluminiumoxid. Das 4-Phenyl-pentan-2-ol umfassende Produktgemisch kann Reste des Dioxans der Formel (A) umfassen, die - insbe-

sondere im Falle des Vertacetal - zum sensorischen Gesamteindruck positiv beitragen können.

[0042] 4-Phenyl-pentan-2-ol kann auch ausgehend von 3-Phenylbutyraldehyd via Grignard-Reaktion mit MeMgX (X = Cl, Br oder I) hergestellt werden, wie das nachstehende Formelschema verdeutlicht.



(I)

[0043] Erfindungsgemäße Riech- oder Aromastoffkompositionen, welche 4-Phenyl-pentan-2-ol der Formel (I) enthalten, können in flüssiger Form, unverdünnt oder mit einem Lösungsmittel verdünnt zur Parfümierung oder Aromatisierung eingesetzt werden. Geeignete Lösungsmittel hierfür sind z.B. Ethanol, Isopropanol, Diethylenglycolmonoethylether, Glycerin, Propylenglycol, 1,2-Butylenglycol, Dipropylenglycol, Diethylphtalat, Triethylcitrat, Isopropylmyristat, Triacetin usw.

[0044] Erfindungsgemäße Riech- oder Aromastoffkompositionen, welche 4-Phenyl-pentan-2-ol der Formel (I) enthalten, können an einem Trägerstoff adsorbiert sein, der sowohl für eine feine Verteilung der Riech- oder Aromastoffe im Produkt als auch für eine kontrollierte Freisetzung bei der Anwendung sorgt. Derartige Träger können poröse anorganische Materialien wie Leichtsulfat, Kieselgele, Zeolithe, Gipse, Tone, Tongranulate, Gasbeton usw. oder organische Materialien wie Hölzer, Cellulosebasierende Stoffe, Zucker, Dextrine (z.B. Maltodextrin) oder Kunststoffe wie PVC, Polyvinylacetate oder Polyurethane sein. Die Kombination aus erfindungsgemäßer Komposition und Trägerstoff stellt einen beispielhaften erfindungsgemäßen Artikel dar.

[0045] Erfindungsgemäße Riech- oder Aromastoffkompositionen, die 4-Phenyl-pentan-2-ol der Formel (I) enthalten, können auch mikroverkapselt, sprühgetrocknet, als Einschluss-Komplexe oder als Extrusions-Produkte (d. h. erfindungsgemäße Artikel) vorliegen und in dieser Form z. B. einem zu parfümierenden oder aromatisierenden Produkt hinzugefügt werden.

[0046] Gegebenenfalls können die Eigenschaften der derart modifizierten Kompositionen durch sog. "Coaten" mit geeigneten Materialien im Hinblick auf eine gezieltere Duftfreisetzung weiter optimiert werden, wozu vorzugsweise wachsartige Kunststoffe wie z.B. Polyvinylalkohol verwendet werden. Die resultierenden Produkte stellen wiederum erfindungsgemäße Artikel dar.

[0047] Die Mikroverkapselung der erfindungsgemäßen Riech- oder Aromastoffkompositionen zu erfindungsgemäßen Artikeln kann beispielsweise durch das sogenannte Koazervationsverfahren mit Hilfe von Kapselmaterialein z.B. aus polyurethanartigen Stoffen oder Weichgelatine, erfolgen. Die sprühgetrockneten Riech- oder Aromastoffkompositionen können beispielsweise durch Sprühtrocknung einer die Riech- oder Aromastoffkomposition enthaltenden Emulsion bzw. Dispersion hergestellt werden, wobei als Trägerstoffe modifizierte Stärken, Proteine, Dextrin und pflanzliche Gummen verwendet werden können. Einschluss-Komplexe können z.B. durch Eintragen von Dispersionen von der Riech- oder Aromastoffkomposition und Cyclodextrinen oder Harnstoffderivaten in ein geeignetes Lösungsmittel, z.B. Wasser, hergestellt werden. Extrusions-Produkte können durch Verschmelzen der Riech- oder Aromastoffkompositionen mit einem geeigneten wachsartigen Stoff und durch Extrusion mit nachfolgender Erstarrung, ggf. in einem geeigneten Lösungsmittel, z.B. Isopropanol, erhalten werden.

[0048] 4-Phenyl-pentan-2-ol der Formel (I) und Riech- oder Aromastoffkompositionen, die 4-Phenyl-pentan-2-ol enthalten, können in konzentrierter Form, in Lösungen oder in oben beschriebener modifizierter Form verwendet werden für die Herstellung von erfindungsgemäßen parfümierten Artikeln wie z. B. Parfüm-Extrakte, Eau de Parfums, Eau de Toilettes, Rasierwässer, Eau de Colognes, Pre-shave-Produkte, Splash-Colognes und parfümierten Erfrischungstüchern sowie die Parfümierung von sauren, alkalischen und neutralen Reinigungsmitteln, wie z.B. Fußbodenreinigern, Fenster-glasreinigern, Geschirrspülmitteln, Bad- und Sanitärreinigern, Scheuermilch, festen und flüssigen WC-Reinigern, pulver- und schaumförmigen Teppichreinigern, Textilerfrischern, Bügelhilfen, flüssigen Waschmitteln, pulverförmigen Wasch-mitteln, Wäschevorbehandlungsmitteln wie Bleichmittel, Einweichmittel und Fleckenentfernern, Wäscheweichspülern, Waschseifen, Waschtabletten, Desinfektionsmitteln, Oberflächendesinfektionsmitteln sowie von Luftverbesserern in flüssiger, gelartiger oder auf einem festen Träger aufgebracht Form, Aerosolsprays, Wachsen und Polituren wie

Möbelpolituren, Fußbodenwachsen, Schuhcremes sowie Körperpflegemitteln wie z.B. festen und flüssigen Seifen, Duschgelen, Shampoos, Rasierseifen, Rasierschäumen, Badeölen, kosmetischen Emulsionen vom Öl-in-Wasser-, vom Wasser-in-Öl- und vom Wasser-in-Öl-in-Wasser-Typ wie z.B. Hautcremes- und -lotionen, Gesichtscremes und -lotionen, Sonnenschutzcremes- und -lotionen, After-sun-cremes und -lotionen, Handcremes und -lotionen, Fußcremes und -lotionen, Enthaarungscremes und -lotionen, After-shave-Cremes und -lotionen, Bräunungscremes und -lotionen, Haarpflegeprodukten wie z.B. Haarsprays, Haargelen, festigenden Haarlotionen, Haarspülungen, permanenten und semi-permanenten Haarfärbemitteln, Haarverformungsmitteln wie Kaltwellen und Haarglättungsmitteln, Haarwässern, Haarcremes und -lotionen, Deodorantien und Antiperspirantien wie z.B. Achselsprays, Roll-ons, Deosticks, Deocremes, Produkten der dekorativen Kosmetik wie z.B. Lidschatten, Nagellacke, Make-ups, Lippenstifte, Mascara sowie von Kerzen, Lampenölen, Räucherstäbchen, Insektiziden, Repellentien und Treibstoffen.

[0049] 4-Phenyl-pentan-2-ol der Formel (I) kann in aromatisierte oder zu aromatisierende Artikel eingearbeitet werden, insbesondere in der Ernährung, der Mundpflege oder dem Genuss dienende Zubereitungen.

[0050] Der Ernährung oder dem Genuss dienende Zubereitungen sind z.B. Backwaren (z.B. Brot, Trockenkekse, Kuchen, sonstiges Gebäck), Süßwaren (z.B. Schokoladen, Schokoladenriegelprodukte, sonstige Riegelprodukte, Fruchtgummi, Hart- und Weichkaramellen, Kaugummi), alkoholische oder nicht-alkoholische Getränke (z.B. Kaffee, Tee, Wein, weinhaltige Getränke, Bier, bierhaltige Getränke, Liköre, Schnäpse, Weinbrände, fruchthaltige Limonaden, isotonische Getränke, Erfrischungsgetränke, Nektare, Obst- und Gemüsesäfte, Frucht- oder Gemüsesaftzubereitungen), Instantgetränke (z.B. Instant-Kakao-Getränke, Instant-Tee-Getränke, Instant-Kaffeegetränke), Fleischprodukte (z.B. Schinken, Frischwurst- oder Rohwurstzubereitungen, gewürzte oder marinierte Frisch- oder Pökelfleischprodukte), Eier oder Eiprodukte (Trockenei, Eiweiß, Eigelb), Getreideprodukte (z.B. Frühstückscerealien, Müsliriegel, vorgegarte Fertigeris-Produkte), Milchprodukte (z.B. Milchgetränke, Milcheis, Joghurt, Kefir, Frischkäse, Weichkäse, Hartkäse, Trockenmilchpulver, Molke, Butter, Buttermilch, teilweise oder ganz hydrolisierte Milchprotein-haltige Produkte), Produkte aus Sojaprotein oder anderen Sojabohnen-Fraktionen (z.B. Sojamilch und daraus gefertigte Produkte, Sojalecithin-haltige Zubereitungen, fermentierte Produkte wie Tofu oder Tempe oder daraus gefertigte Produkte, Sojasoßen), Fruchtzubereitungen (z.B. Konfitüren, Fruchteis, Fruchtsoßen, Fruchtfüllungen), Gemüsezubereitungen (z.B. Ketchup, Soßen, Trockengemüse, Tiefkühlgemüse, vorgegarte Gemüse, in Essig eingelegte Gemüse, eingekochte Gemüse), Knabberartikel (z.B. gebackene oder frittierte Kartoffelchips oder Kartoffelteigprodukte, Brotteigprodukte, Extrudate auf Mais- oder Erdnussbasis), Produkte auf Fett- und Ölbasis oder Emulsionen derselben (z.B. Mayonnaise, Remoulade, Dressings, Würzzubereitungen), sonstige Fertiggerichte und Suppen (z.B. Trockensuppen, Instant-Suppen, vorgegarte Suppen), Gewürze, Würzmischungen sowie insbesondere Aufstreuwürzungen (englisch: Seasonings), die beispielsweise im Snackbereich Anwendung finden. Nach Einarbeiten der erfindungsgemäßen Verbindung Formel (I) sind diese Zubereitungen erfindungsgemäße Zubereitungen (als Beispiel erfindungsgemäßer Artikel).

[0051] Erfindungsgemäße Zubereitungen können z. B. als Halbfertigware oder als Würzmischung vorliegen.

[0052] Erfindungsgemäße Zubereitungen können insbesondere als Halbfertigware zur Herstellung weiterer der Ernährung oder dem Genuss dienenden Zubereitungen dienen, insbesondere in sprühgetrockneter Form. Erfindungsgemäße Zubereitungen können auch in Form von Kapseln, Tabletten (nichtüberzogene sowie überzogene Tabletten, z.B. magensaftresistente Überzüge), Dragees, Granulaten, Pellets, Feststoffmischungen, Dispersionen in flüssigen Phasen, als Emulsionen, als Pulver, als Lösungen, als Pasten oder als andere schluck- oder kaubare Zubereitungen als Nahrungsergänzungsmittel vorliegen.

[0053] Der Mundpflege dienende erfindungsgemäße Zubereitungen sind insbesondere Mund- und/oder Zahnpflegemittel wie Zahnpasten, Zahngel, Zahnpulver, Mundwässer, Kaugummis und andere Mundpflegemittel.

[0054] Weitere übliche Wirk-, Grund-, Hilfs- und Zusatzstoffe für der Ernährung, der Mundpflege oder dem Genuss dienende erfindungsgemäße Zubereitungen können in Mengen von 5 bis 99,999999 Gew.-%, vorzugsweise 10 bis 80 Gew.-%, bezogen auf das Gesamtgewicht der Zubereitung, enthalten sein. Ferner können die Zubereitungen Wasser in einer Menge bis zu 99,999999 Gew.-%, vorzugsweise 5 bis 80 Gew.-%, bezogen auf das Gesamtgewicht der Zubereitung, aufweisen.

[0055] Erfindungsgemäße Zubereitungen (als Beispiele erfindungsgemäßer Artikel), enthaltend 4-Phenyl-pentan-2-ol, werden gemäß einer bevorzugten Ausgestaltung hergestellt, indem das 4-Phenyl-pentan-2-ol der Formel (I) als Substanz, als Lösung (z. B. in Ethanol, Wasser oder 1,2-Propylenglycol) oder in Form eines Gemisches mit einem festen oder flüssigen Trägerstoff (z.B. Maltodextrin, Stärke, Silicagel), sonstigen Aromen oder Aromastoffen und gegebenenfalls weiteren Hilfsmitteln und/oder Stabilisatoren (z.B. natürliche oder künstliche Polysaccharide und/oder Pflanzengummen wie modifizierte Stärken oder Gummi Arabicum) in eine der Ernährung, der Mundpflege oder dem Genuss dienende Basis-Zubereitung eingearbeitet wird. Vorteilhafterweise können als Lösung und/oder Suspension oder Emulsion vorliegende erfindungsgemäße Zubereitungen auch durch Sprühtrocknung in eine feste erfindungsgemäße Zubereitung (Halbfertigware) überführt werden.

[0056] Die erfindungsgemäßen sprühgetrockneten festen Zubereitungen (als Beispiel erfindungsgemäßer Artikel) sind als Halbfertigwaren besonders gut zur Herstellung von weiteren erfindungsgemäßen Zubereitungen geeignet. In den erfindungsgemäßen sprühgetrockneten festen Zubereitungen sind vorzugsweise 50 bis 95 % Gew.-% Trägerstoffe,

insbesondere Maltodextrin und/oder Stärke, 5 bis 40 % Hilfsstoffe, bevorzugt natürliche oder künstliche Polysaccharide und/oder Pflanzengummen wie modifizierte Stärken oder Gummi Arabicum enthalten.

[0057] Gemäß einer weiteren bevorzugten Ausführungsform werden zur Herstellung erfindungsgemäßer Zubereitungen das 4-Phenyl-pentan-2-ol und gegebenenfalls andere Bestandteile der erfindungsgemäßen Zubereitung zunächst in Emulsionen, in Liposomen, z.B. ausgehend von Phosphatidylcholin, in Microsphären, in Nanosphären oder auch in Kapseln, Granulaten oder Extrudaten aus einer für Lebens- und Genussmittel geeigneten Matrix, z.B. aus Stärke, Stärkederivaten (z.B. modifizierte Stärke), Cellulose oder Cellulosederivaten (z.B. Hydroxypropylcellulose), anderen Polysacchariden (z.B. Dextrin, Alginat, Curdlan, Carageenan, Chitin, Chitosan, Pullulan), natürlichen Fetten, natürlichen Wachsen (z.B. Bienenwachs, Carnaubawachs), aus Proteinen, z.B. Gelatine oder sonstigen Naturprodukten (z.B. Schellack) eingearbeitet. Dabei können je nach Matrix die Produkte durch Sprühtrocknung, Sprühgranulation, Schmelzgranulation, Koazervation, Koagulation, Extrusion, Schmelzextrusion, Emulsionsverfahren, Beschichtung (Coating) oder andere geeignete Verkapselungsverfahren und gegebenenfalls eine geeignete Kombination der vorgenannten Verfahren erhalten werden. In einem weiteren bevorzugten Herstellungsverfahren für eine erfindungsgemäße Zubereitung wird das 4-Phenyl-pentan-2-ol zunächst mit einem oder mehreren Komplexbildnern, beispielsweise mit Cyclodextrinen oder Cyclodextrinderivaten, bevorzugt α - oder β -Cyclodextrin, komplexiert und in dieser komplexierten Form eingesetzt.

[0058] Besonders bevorzugt ist eine erfindungsgemäße Zubereitung, bei der die Matrix so gewählt ist, dass das 4-Phenyl-pentan-2-ol der Formel (I) verzögert von der Matrix freigegeben wird, so dass eine langanhaltende Wirkung erzielt wird. Besonders bevorzugt ist insoweit eine Fett-, Wachs-, Polysaccharid- oder Proteinmatrix.

[0059] Als weitere Bestandteile für erfindungsgemäße, der Ernährung oder dem Genuss dienende Zubereitungen können übliche Grund-, Hilfs- und Zusatzstoffe für Nahrungs- oder Genussmittel verwendet werden, z.B. Wasser, Gemische frischer oder prozessierter, pflanzlicher oder tierischer Grund- oder Rohstoffe (z.B. rohes, gebratenes, getrocknetes, fermentiertes, geräuchertes und/oder gekochtes Fleisch, Knochen, Knorpel, Fisch, Gemüse, Früchte, Kräuter, Nüsse, Gemüse- oder Fruchtsäfte oder -pasten oder deren Gemische), verdauliche oder nicht verdauliche Kohlenhydrate (z.B. Saccharose, Maltose, Fructose, Glucose, Dextrine, Amylose, Amylopektin, Inulin, Xylane, Cellulose, Tagatose), Zuckeralkohole (z.B. Sorbit, Erythritol), natürliche oder gehärtete Fette (z.B. Talg, Schmalz, Palmfett, Kokosfett, gehärtetes Pflanzenfett), Öle (z.B. Sonnenblumenöl, Erdnussöl, Maiskeimöl, Olivenöl, Fischöl, Sojaöl, Sesamöl), Fettsäuren oder deren Salze (z.B. Kaliumstearat), proteinogene oder nichtproteinogene Aminosäuren und verwandte Verbindungen (z.B. γ -Aminobuttersäure, Taurin), Peptide (z.B. Glutathion), native oder prozessierte Proteine (z.B. Gelatine), Enzyme (z.B. Peptidasen), Nukleinsäuren, Nucleotide, Geschmackskorrigenzen für unangenehme Geschmackseindrücke, weitere Geschmacksmodulatoren für weitere, in der Regel nicht unangenehme Geschmackseindrücke, andere geschmacksmodulierende Stoffe (z.B. Inositolphosphat, Nucleotide wie Guanosinmonophosphat, Adenosinmonophosphat oder andere Stoffe wie Natriumglutamat oder 2-Phenoxypropionsäure), Emulgatoren (z.B. Lecithine, Diacylglycerole, Gummi arabicum), Stabilisatoren (z.B. Carageenan, Alginat), Konservierungsstoffe (z.B. Benzoesäure, Sorbinsäure), Antioxidantien (z.B. Tocopherol, Ascorbinsäure), Chelatoren (z.B. Citronensäure), organische oder anorganische Säuerungsmittel (z.B. Äpfelsäure, Essigsäure, Citronensäure, Weinsäure, Phosphorsäure), Bitterstoffe (z.B. Chinin, Coffein, Limonin, Amarogentin, Humolone, Lupolone, Catechine, Tannine), mineralische Salze (z.B. Natriumchlorid, Kaliumchlorid, Magnesiumchlorid, Natriumphosphate), die enzymatische Bräunung verhindernde Stoffe (z.B. Sulfit, Ascorbinsäure), etherische Öle, Pflanzenextrakte, natürliche oder synthetische Farbstoffe oder Farbpigmente (z.B. Carotinoide, Flavonoide, Anthocyane, Chlorophyll und deren Derivate), Gewürze, trigeminal wirksame Stoffe oder Pflanzenextrakte, enthaltend solche trigeminal wirksamen Stoffe, synthetische, natürliche oder naturidentische Aromastoffe oder Riechstoffe sowie Geruchskorrigentien.

[0060] Zahnpflegemittel (als Basis für die Mundpflege dienende Zubereitungen), die 4-Phenyl-pentan-2-ol enthalten, umfassen im Allgemeinen ein abrasives System (Schleif- oder Poliermittel), wie z.B. Kieselsäuren, Calciumcarbonate, Calciumphosphate, Aluminiumoxide und/oder Hydroxylapatite, oberflächenaktive Substanzen wie z.B. Natriumlaurylsulfat, Natriumlaurylsarcosinat und/oder Cocamidopropylbetain, Feuchthaltemitteln wie z.B. Glycerin und/oder Sorbit, Verdickungsmittel, wie z.B. Carboxymethylcellulose, Polyethylenglycole, Carrageenan und/oder Laponite®, Süßstoffe, wie z.B. Saccharin, Geschmackskorrigenzen für unangenehme Geschmackseindrücke, Geschmackskorrigenzen für weitere, in der Regel nicht unangenehme Geschmackseindrücke, geschmacksmodulierende Stoffe (z.B. Inositolphosphat, Nucleotide wie Guanosinmonophosphat, Adenosinmonophosphat oder andere Stoffe wie Natriumglutamat oder 2-Phenoxypropionsäure), Kühlwirkstoffen wie z.B. Menthol, Mentholderivate (z.B. L-Menthol, L-Menthylactat, L-Menthylalkylcarbonate, Menthonketale, Menthancarbonsäureamide), 2,2,2-Trialkylelessigsäureamiden (z.B. 2,2-Diisopropylpropionsäuremethylester), Icilin und Icilin-Derivate, Stabilisatoren und aktive Wirkstoffe, wie z.B. Natriumfluorid, Natriummonofluorophosphat, Zinnfluorid, quartären Ammoniumfluoriden, Zinkcitrat, Zinksulfat, Zinnpyrophosphat, Zinnchlorid, Mischungen verschiedener Pyrophosphate, Triclosan, Cetylpyridiniumchlorid, Aluminiumlactat, Kaliumcitrat, Kaliumnitrat, Kaliumchlorid, Strontiumchlorid, Wasserstoffperoxid, Aromen und/oder Natriumbicarbonat oder Geruchskorrigentien.

[0061] Kaugummis (als weiteres Beispiel für die Mundpflege dienende Zubereitungen), welche 4-Phenyl-pentan-2-ol enthalten, umfassen im allgemeinen eine Kaugummibase, d.h. eine beim Kauen plastisch werdende Kaumasse, Zucker

verschiedener Arten, Zuckeraustauschstoffe, andere süß schmeckende Stoffe, Zuckeralkoholen, Geschmackskorrigentien für unangenehme Geschmackseindrücke, andere Geschmacksmodulatoren für weitere, in der Regel nicht unangenehme Geschmackseindrücke, geschmacksmodulierende Stoffe (z.B. Inositolphosphat, Nucleotide wie Guanosinmonophosphat, Adenosinmonophosphat oder andere Stoffe wie Natriumglutamat oder 2-Phenoxypropionsäure),

Feuchthaltemittel, Verdicker, Emulgatoren, Aromen und Stabilisatoren oder Geruchskorrigentien.

[0062] Bevorzugt enthalten die erfindungsgemäßen Zubereitungen neben 4-Phenyl-pentan-2-ol eine Aromakomposition, um den Geschmack und/oder Geruch der Zubereitung abzurunden und zu verfeinern. Geeignete (zusätzliche) Aromakompositionen enthalten z.B. synthetische, natürliche oder naturidentische Aroma-, Riech- und Geschmacksstoffe sowie geeignete Hilfs- und Trägerstoffe.

[0063] Weitere Aspekte der vortragenden Erfindung ergeben sich aus dem nachfolgenden Beispielen und den beigefügten Patentansprüchen.

[0064] Nachfolgend wird die Erfindung anhand von Beispielen näher erläutert. Sofern nicht anders angegeben, beziehen sich alle Angaben auf das Gewicht.

[0065] Beispiel 1: Herstellung von 4-Phenyl-pentan-2-ol Formel (I) (in Anlehnung an das Verfahren gemäß Literatur Journal f. prakt. Chemie Band 319, Heft 4, 1977, 601-610)

[0066] In einen 1 l Rührautoklav wurden 206 g (1 mol) 2,4,6-Trimethyl-4-phenyl-(1,3)-dioxan (Vertacetal®) in 250 ml Ethanol/Wasser 9:1, mit 0,2 g Palladium (5% auf Aktivkohle) vorgelegt. Anschließend wurde bei 180°C und einem Druck von 20 bar 8 Stunden unter Rühren bis zur Aufnahme von 2 mol Wasserstoff hydriert. Danach wurde auf Raumtemperatur abgekühlt, die Reaktionslösung filtriert und eingengt. Das Rohprodukt (165 g) wurde an einer 30 cm Vigreux-Kolonne im Vakuum fraktioniert.

Ausbeute: 150,9 g (92% d. Th.) Sdp.: 130°-135°C/8 mbar

Reinheit nach GC 99,5%ig, Diastereomerenverhältnis (ca. 1:1)

Beispiel 2: Herstellung von 4-Phenyl-pentan-2-ol der Formel (I) via Grignard-Reaktion

[0067] In einen 2 l Rührwerk wurden 148 g (1 mol) 3-Phenylbutyraldehyd in 500 ml THF abs. vorgelegt. Anschließend wurde innerhalb einer Stunde unter Rühren und Kühlen bei 0°C mit 81,8 g Methylmagnesiumchlorid (22%ige Lösung in THF (1,1 mol)) versetzt. Danach wurde 1,5 Stunden unter Rückfluss nachgerührt. Nach Abkühlen auf Raumtemperatur wurde die Reaktionslösung mit 300 ml 10%iger NaOH vorsichtig zerlegt, die wässrige Phase abgetrennt, die organische Phase mit Wasser neutral gewaschen und eingengt. Das Rohprodukt (167,8 g) wurde an einer 30 cm Vigreux-Kolonne im Vakuum fraktioniert.

Ausbeute: 147 g (89,6% d. Th.) Sdp.: 130°-135°C/8 mbar.

Reinheit nach GC 99,5%ig, Diastereomerenverhältnis (ca. 1:1)

[0068] Es wurden die spektroskopischen Daten von 4-Phenyl-pentan-2-ol der Formel (I) ermittelt. Die Daten der Diastereomere (ca. 1:1) sind nachfolgend angegeben.

¹H-NMR (CDCl₃, 400 MHz, TMS= 0): 1,12, 1,18 (d, J= 6,2, 3H); 1,26, 1,27 (d, J=7, 3H); 1,61-1,86 (m, 2H); 2,81-3,01 (m, 1H); 3,53-3,59 (m, 1H); 7,18-7,32 (m, arom. 5H).

¹³C-NMR (CDCl₃, 100 MHz): 147,3 (s), 146,8 (s); 128,6 (d), 128,5 (d); 127,1 (d), 126,9 (d); 126,2 (d), 126,1 (d); 66,4 (d), 65,9 (d); 47,9 (t), 47,7 (t); 37,0 (d), 36,6 (d); 24,2 (q), 23,7 (q); 23,1 (q), 22,3 (q).

MS: m/z (%) = 164 (3, M⁺), 146 (32), 131 (89), 106 (49), 105 (100), 91 (55), 78 (20), 77 (24), 45 (18).

MS: m/z (%) = 164 (3, M⁺), 146 (34), 131 (98), 106 (45), 105 (100), 91 (55), 78 (20), 77 (25), 45 (18).

Beispiel 3: Parfümkomposition (Riechstoffkomposition)

[0069]

Gewichtsteile

Agrumex LC	10,00
Amarocit® 10%ig in DPG	10,00
Ambroxid	10,00
Basilikumöl	10,00
Calone 1951 10%ig in DPG	10,00
Cedernholzöl	10,00
Cedrol	50,00
Citral 10%ig in DPG	10,00
Citronellol	5,00

EP 1 900 800 A2

(fortgesetzt)

		Gewichtsteile
	Cumin	10,00
5	Cyclogalbanat® 10%ig in DPG	15,00
	Dihydromyrcenol	80,00
	Farenal® 10%ig in DPG	5,00
	Galbex 10%ig in DPG	25,00
10	Globalide®	80,00
	Globanone®	40,00
	Hedion	90,00
	Helional	20,00
	Heliotropin	5,00
15	Hexenol cis-3 10%ig in DPG	15,00
	Hexenylsalicylat cis-3	10,00
	Beta-Ionon	5,00
	Iso E Super	180,00
20	Isodamascon® 10%ig in DPG	10,00
	Isomuscone (Cyclohexadecanon)	20,00
	Isoraldein 70	20,00
	Ketamber 10%ig in TEC	25,00
	Lavandinöl Grosso Nat.	15,00
25	Lilial	20,00
	Linalool	20,00
	Linalylacetat	40,00
	Mandarinenöl brasil. grün	50,00
	Timberol®	40,00
30	Vanillin	5,00
	Veloutone 10%ig in DPG	20,00
	Ysamber K®	10,00
	Gesamt	1000,00
35	DPG: Dipropylenglycol, TEC = Triethylcitrat	

[0070] Geruchsbeschreibung der Parfümkomposition ohne Zusatz von Verbindung der Formel (I): holzig, blumig, herb

[0071] Nach Meinung der Parfümeure wird diese Parfümkomposition durch den Zusatz von 3 Gew.-% 4-Phenyl-pentan-2-ol aus Beispiel 2 frischer, strahlender, abgerundeter und harmonischer, wobei eine grün-fruchtige und süße Note hinzukommt und die holzigen und blumigen Aspekte verstärkt werden. Das eingesetzte 4-Phenyl-pentan-2-ol der Formel (I) verleiht der Komposition durch seinen Eigengeruch sowie durch seine modifizierende und verstärkende Wirkung (Booster-Wirkung) einen eigenen Charakter und verbindet die unterschiedlichen geruchlichen Elemente.

Beispiel 4: Parfümkomposition (Riechstoffkomposition)

[0072]

		Gewichtsteile
	Allylcyclohexylpropionat	3,00
50	Amylsalicylat	2,00
	Benzylacetat	64,00
	Citronellol	122,00
	Citral 10% ig in DPG	2,00
55	Cyclamenaldehyd	10,00
	Dihydromyrcenol	3,00
	Dimethylbenzylcarbinyacetat	3,00

EP 1 900 800 A2

(fortgesetzt)

		Gewichtsteile
5	Ethylsalicylat 10% ig in DPG	2,00
	Eugenol	3,00
	Indoflor 10%ig in DPG	16,00
	Galaxolide 50%ig in DPG	164,00
	Geraniol	35,00
10	Dihydromethyljasmonat	6,00
	Heliotropin	4,00
	Hexylzimtaldehyd	121,00
	Vertocitral	4,00
	Hedion	42,00
15	Indol	2,00
	Isobutylsalicylat	6,00
	Lavandinöl Grosso Nat.	6,00
	Acetylcedren	10,00
20	Majantol	190,00
	Linalool	35,00
	Linalylacetat	10,00
	Methylantranilat 10%ig in DPG	5,00
	Nerol	10,00
25	Orangenöl	6,00
	Phantolide	4,00
	Phenylacetaldehyddimethylacetal	6,00
	Phenylethylalkohol	75,00
30	Florol	6,00
	Sandelholzöl	3,00
	Sandranol	16,00
	Trifernal	2,00
	Tonalid	2,00
35	Gesamt	1000,00
	DPG: Dipropylenglycol	

[0073] Geruchsbeschreibung der Parfümkomposition ohne Zusatz von Verbindung der Formel (I): blumig, Maiglöckchen.

[0074] Nach Meinung der Parfümeure erwacht diese Parfümkomposition durch den Zusatz von 6 Gew.-% 4-Phenylpentan-2-ol der Formel (I) aus Beispiel 1 zu neuem Leben. Der Eindruck von Blumigkeit wird erheblich verstärkt. Die Komposition wirkt strahlender, abgerundeter und harmonischer, wobei eine grün-fruchtige und natürliche Note hinzukommt. Das eingesetzte 4-Phenylpentan-2-ol der Formel (I) verleiht der Komposition durch seinen Eigengeruch sowie durch seine modifizierende und verstärkende Wirkung (Booster-Wirkung) einen eigenen Charakter und verbindet die unterschiedlichen geruchlichen Elemente.

[0075] Durch weiteren Zusatz von 0,1 Gew.-% Vertacetal® werden die genannten Aspekte in harmonischer Weise noch weiter betont.

Beispiel 5: Shampoo

4-Phenylpentan-2-ol der Formel (I) aus Beispiel 1 wurde in einer Dosierung von 0,5 Gew.-% in eine Shampoo-Grundmasse folgender Zusammensetzung eingearbeitet:

[0076]

Natriumlauryl ethersulfat (z.B. Texapon NSO, Fa. Cognis Deutschland GmbH)	12%
Cocamidopropylbetain (z.B. Dehyton K, Fa. Cognis Deutschland GmbH)	2%

(fortgesetzt)

	Natriumchlorid	1,4%
	Citronensäure	1,3%
5	Phenoxyethanol, Methyl-, Ethyl-, Butyl-, und Propylparaben	0,5%
	Wasser	82,8%

10 **[0077]** Der pH-Wert der Shampoo-Grundmasse lag bei etwa 6. Hieraus wurden 100 mL einer 20 Gew.-%-igen wässrigen Shampoo-Lösung hergestellt. In dieser Shampoo-Lösung wurden 2 Haarsträhnchen gemeinsam für 2 Minuten gewaschen und anschließend 20 Sekunden unter fließendem handwarmen Wasser gespült. Eine Haarsträhne wurde nass in Aluminiumfolie eingepackt und die zweite Haarsträhne mit einem Fön getrocknet. Beide Haarsträhnen wurden von einem Panel geruchlich beurteilt.

15 **[0078]** Geruchsbeschreibung jeweils: strahlend, interessante grüne Duftnote in Richtung Grapefruit und Rhabarber, sehr natürliche Ausstrahlung.

Beispiel 6: Weichspüler

20 **[0079]** Die Parfümkomposition aus Beispiel 3 (nach Zusatz von 3 Gew.-% 4-Phenyl-pentan-2-ol Formel (I) aus Beispiel 2) wurde in einer Dosierung von 0,5 Gew.-% in eine Weichspüler-Grundmasse folgender Zusammensetzung eingearbeitet:

	Quaternäres Ammoniummethosulfat (Esterquat), ca. 90% (z.B. Rewoquat WE 18, Fa. Witco Surfactants GmbH)	5,5%
25	Alkyldimethylbenzylammoniumchlorid, ca. 50% (z.B. Preventol R50, Fa. Bayer AG)	0,2%
	Farblösung, ca. 1%-ig	0,3%
	Wasser	94,0%

30 **[0080]** Der pH-Wert der Weichspüler-Grundmasse lag im Bereich von 2 bis 3. Zwei Stofflappen wurden mit 370 g einer 1%-igen wässrigen Weichspüler-Lösung auf Basis der 0,5% Gew.-% von Verbindung Formel (I) umfassenden Weichspüler-Grundmasse in einer Linetest-Maschine im Weichspülprogramm 30 Minuten bei 20°C gespült. Die Lappen wurden ausgewrungen und anschließend 20 Sekunden geschleudert. Ein Lappen wurde nass eingeschweißt, und einer zum Trocknen aufgehängt. Anschließend wurden beide Lappen durch ein Panel geruchlich beurteilt.

35 **[0081]** Geruchsbeschreibung jeweils: blumig, holzig, frisch, strahlend, grün-fruchtige Aspekte mit leichten süßen Untertönen, abgerundeter und harmonischer Geruchseindruck.

Beispiel 7: Waschpulver

40 **[0082]** Die Parfümkomposition aus Beispiel 4 (nach Zusatz von 6 Gew.-% von Verbindung Formel (I) aus Beispiel 1) wurde in einer Dosierung von 0,4 Gew.-% in eine Waschpulver-Grundmasse der folgenden Rezeptur eingearbeitet:

	Lineares Na-Alkylbenzolsulfonat	8,8 %
	Ethoxylierter Fettalkohol C12-18 (7 EO)	4,7 %
45	Na-Seife	3,2 %
	Entschäumer	
	DOW CORNING(R) 2-4248S	
	POWDERED ANTIFOAM,	
	Silikonöl auf Zeolith als Trägermaterial	3,9 %
50	Zeolith 4A	28,3 %
	Na-Carbonat	11,6 %
	Na-Salz eines Copolymers aus Acryl- und Maleinsäure (Sokalan CP5)	2,4 %
	Na-Silikat	3,0 %
55	Carboxymethylcellulose	1,2 %
	Dequest 2066	2,8 %
	([[(Phosphonomethyl)imino]bis[(ethylennitrilo)bis (methylen)]]tetrakis-phosphonsäure, Natriumsalz)	

(fortgesetzt)

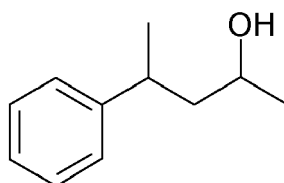
Optischer Aufheller	0,2 %
Na-Sulfat	6,5 %
Protease	0,4 %
Natriumperborattetrahydrat	22,0 %
TAED	1,0%

[0083] Zwei Stofflappen wurden mit 370 g einer 1%-igen wässrigen Waschpulverlauge auf Basis des 0,4 Gew.-% der Parfümölkomposition aus Beispiel 4 umfassenden Waschpulver-Grundmasse (der pH-Wert der Waschpulverlauge liegt deutlich im basischen Bereich) in einer Linetest-Maschine im Hauptwaschgang 45 Minuten bei 60°C gewaschen. Die Lappen wurden zunächst 5 Minuten mit kaltem Wasser gespült, ausgewrungen und anschließend 20 Sekunden geschleudert. Ein Lappen wurde nass eingeschweißt, und einer zum Trocknen aufgehängt. Anschließend wurden beide Lappen durch ein Panel geruchlich beurteilt.

[0084] Geruchsbeschreibung jeweils: stark blumig, strahlend, grün-fruchtig und natürliche Note mit leichten süßen und holzigen Untertönen, abgerundeter und harmonischer Geruchseindruck.

Patentansprüche

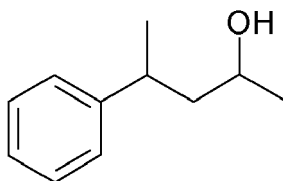
1. Verwendung von 4-Phenyl-pentan-2-ol (I)



(I)

als Riech- oder Aromastoff.

2. Verwendung von 4-Phenyl-pentan-2-ol (I)



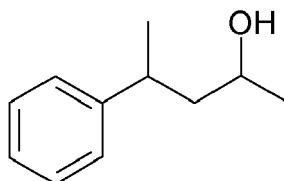
(I)

als Riech- oder Aromastoff mit grüner, fruchtiger Note.

3. Verwendung nach einem der vorangehenden Ansprüche, zum Vermitteln, Modifizieren und/oder Verstärken einer Geruchs- und/oder Geschmacksnote mit folgenden Aspekten: grün, fruchtig.

4. Parfümierter oder aromatisierter Artikel umfassend

(a) 4-Phenyl-pentan-2-ol (I)



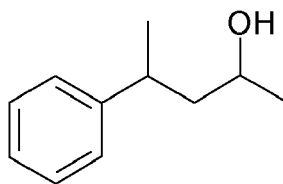
(I)

sowie

(b) einen, zwei, drei oder mehr weitere Riech- oder Aromastoffe.

5. Parfümierter oder aromatisierter Artikel nach Anspruch 4, wobei der oder die weiteren Riech- oder Aromastoffe (Komponente (b)) einen holzigen und/oder blumigen Geruch und/oder Geschmack vermitteln.
6. Parfümierter oder aromatisierter Artikel nach Anspruch 4 oder 5, umfassend als weiteren Riechstoff 2,4,6-Trimethyl-4-phenyl-1,3-dioxan.
7. Parfümierter oder aromatisierter Artikel nach einem der Ansprüche 4 bis 6, wobei das Gewichtsverhältnis der Gesamtmenge an 4-Phenyl-pentan-2-ol zu der Gesamtmenge an weiteren Riech- oder Aromastoffen im Bereich von 1: 1000 bis 1: 0,5 liegt.
8. Parfümierter oder aromatisierter Artikel nach einem der Ansprüche 4 bis 7, wobei der Artikel eine Riech- oder Aromastoffkomposition ist.
9. Riech- oder Aromastoffkomposition nach Anspruch 8, umfassend 4-Phenyl-pentan-2-ol in einer Menge, die ausreicht, eine Geruchs- oder Geschmacksnote des Typs grün, fruchtig zu vermitteln, zu modifizieren und/oder zu verstärken.
10. Riech- oder Aromastoffkomposition nach einem der Ansprüche 8 oder 9, **dadurch gekennzeichnet, dass** die Riech- oder Aromastoffkomposition eine Gesamtmenge an 4-Phenyl-pentan-2-ol im Bereich von 0,01 bis 50 Gew.-%, vorzugsweise 0,01 bis 25 Gew.-% und besonders bevorzugt 0,5 bis 20 Gew.-%, umfasst, bezogen auf die Gesamtmenge der Riech- oder Aromastoffkomposition.
11. Parfümierter oder aromatisierter Artikel nach einem der Ansprüche 4 bis 7, vorzugsweise umfassend eine Riech- oder Aromastoffkomposition nach einem der Ansprüche 6 bis 8, wobei der Artikel ausgewählt ist aus der Gruppe bestehend aus: Parfüm-Extraits, Eau de Parfums, Eau de Toilettes, Rasierwässer, Eau de Colognes, Pre-shave-Produkte, Splash-Colognes, parfümierte Erfrischungstüchern, saure, alkalische und neutrale Reinigungsmitteln, Textilerfrischern, Bügelhilfen, flüssigen Waschmitteln, pulverförmigen Waschmitteln, Wäschevorbehandlungsmitteln, Wäscheweichspülern, Waschseifen, Waschtabletten, Desinfektionsmitteln, Oberflächendesinfektionsmitteln, Luftverbesserern, Aerosolsprays, Wachse und Polituren, Körperpflegemitteln, Handcremes und -lotionen, Fußcremes und -lotionen, Enthaarungscremes und -lotionen, After-shave-Cremes und -lotionen, Bräunungscremes und -lotionen, Haarpflegeprodukten, Deodorantien und Antiperspirantien, Produkten der dekorativen Kosmetik, Kerzen, Lampenölen, Räucherstäbchen, Insektiziden, Repellentien und Treibstoffen.
12. Verfahren zum Vermitteln, Modifizieren und/oder Verstärken eines Geruchs oder Geschmacks mit einer, mehreren oder sämtlichen der Noten grün, fruchtig, wobei eine sensorisch wirksame Menge von

(i) 4-Phenyl-pentan-2-ol der Formel (I)

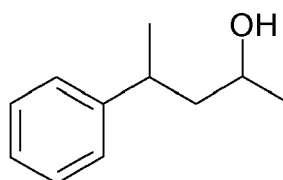


(I)

oder

(ii) einer 4-Phenyl-pentan-2-ol umfassenden Riech- oder Aromastoffkomposition nach einem der Ansprüche 8 bis 10 mit einem Erzeugnis in Kontakt gebracht oder gemischt wird.

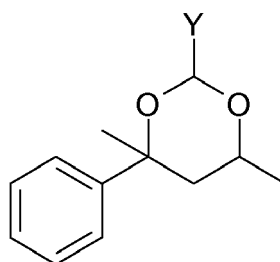
13. Verfahren zur Herstellung von (i)



(I)

oder (ii) einer Mischung umfassend 4-Phenyl-pentan-2-ol, mit folgendem Schritt:

katalytische Spaltung eines substituierten 1,3-Dioxans der Formel (A)



(A)

wobei Y Wasserstoff oder einen Acylrest mit 1 bis 10 C-Atomen bedeutet.

14. Verfahren nach Anspruch 13, wobei Y Methyl oder Ethyl bedeutet.

15. Verfahren nach Anspruch 13 oder 14, wobei Y Methyl bedeutet.

16. Verfahren nach einem der Ansprüche 13 bis 15, wobei die 4-Phenyl-pentan-2-ol umfassende Mischung (ii) einen

Anteil des substituierten 1,3-Dioxans der Formel (A) umfasst.

5

10

15

20

25

30

35

40

45

50

55

IN DER BESCHREIBUNG AUFGEFÜHRTE DOKUMENTE

Diese Liste der vom Anmelder aufgeführten Dokumente wurde ausschließlich zur Information des Lesers aufgenommen und ist nicht Bestandteil des europäischen Patentdokumentes. Sie wurde mit größter Sorgfalt zusammengestellt; das EPA übernimmt jedoch keinerlei Haftung für etwaige Fehler oder Auslassungen.

In der Beschreibung aufgeführte Patentdokumente

- US 6114301 A [0037]

In der Beschreibung aufgeführte Nicht-Patentliteratur

- *J. Chem. Soc., Chem. Commun.*, 1982, vol. 348 [0015]
- *Eur. J. Org. Chem.*, 2002, vol. 16, 2472-2757 [0016]
- *J. Org. Chem.*, 2000, vol. 65, 4281-4288 [0016]
- *Chem. Commun.*, 1998, vol. 19, 2127-2128 [0016]
- *Tetrahedron Lett.*, 1998, vol. 39, 8829-8832 [0016]
- *Journal f. prakt. Chemie.* 1977, vol. 319, 601 [0018]
- **S. ARCTANDER.** Perfume and Flavor Materials. Eigenverlag, 1969, vol. I und II [0019] [0031]
- Common Fragrance and Flavor Materials. Wiley-VCH, 2001 [0021]
- **K. BAUER et al.** Common Fragrance and Flavor Materials. Wiley-VCH, 2001 [0031]
- *Journal f. prakt. Chemie.* 1977, vol. 319, 601-610 [0036] [0065]