



(12) BẢN MÔ TẢ SÁNG CHẾ THUỘC BẰNG ĐỘC QUYỀN SÁNG CHẾ

(19) Cộng hòa xã hội chủ nghĩa Việt Nam (VN)
CỤC SỞ HỮU TRÍ TUỆ

(11)



1-0026394

(51)⁷ A61K 8/33; C07C 47/228; C11B 9/00; (13) B
A61Q 13/00

(21) 1-2015-04683

(22) 08/05/2014

(86) PCT/EP2014/059427 08/05/2014

(87) WO 2014/180945 A1 13/11/2014

(30) 1308248.2 08/05/2013 GB

(45) 25/11/2020 392

(43) 25/04/2016 337A

(73) GIVAUDAN SA (CH)

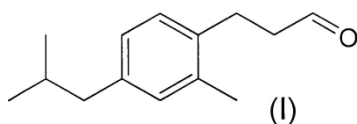
Chemin de la Parfumerie 5, CH-1214 Vernier, Switzerland

(72) GOEKE, Andreas (DE); KRAFT, Philip (DE); LAUE, Heike (DE); ZOU, Yue (CN);
VOIROL, Francis (CH).

(74) Công ty TNHH Sở hữu trí tuệ Vàng (GINTASSET CO., LTD.)

(54) HỢP CHẤT 3-(4-ISOBUTYL-2-METYLPHENYL)PROPANAL, CHẾ PHẨM
THOM CHỨA HỢP CHẤT NÀY VÀ SẢN PHẨM CHĂM SÓC CƠ THỂ HOẶC
CHĂM SÓC GIA ĐÌNH CHỨA HỢP CHẤT HOẶC CHẾ PHẨM NÀY

(57) Sáng chế đề cập đến hợp chất có công thức (I) có thể dùng làm thành phần thơm:



Sáng chế còn đề cập đến chế phẩm thơm chứa hợp chất này và phương pháp tạo mùi thơm đặc trưng của hoa linh lan cho chế phẩm này, sản phẩm chăm sóc cơ thể hoặc chăm sóc gia đình chứa hợp chất hoặc chế phẩm nêu trên.

Lĩnh vực kỹ thuật được đề cập

Sáng chế đề cập đến thành phần thơm và chế phẩm thơm chứa thành phần này. Cụ thể, sáng chế đề cập đến thành phần thơm hoặc chế phẩm thơm nêu trên có mùi thơm đặc trưng của hoa linh lan (hoa lan chuông). Cụ thể hơn nữa, sáng chế đề cập đến chế phẩm thơm không chứa hoặc gần như không chứa LilialTM. Sáng chế còn đề cập đến phương pháp điều chế thành phần thơm và chế phẩm thơm dùng cho sản phẩm thơm hoặc sản phẩm tiêu dùng như sản phẩm chăm sóc cơ thể và chăm sóc gia đình. Sáng chế còn đề cập đến sản phẩm thơm và sản phẩm tiêu dùng chứa thành phần thơm và chế phẩm thơm nêu trên.

Tình trạng kỹ thuật của sáng chế

Nhu cầu về các hợp chất có mùi thơm đặc trưng của hoa linh lan dùng làm thành phần thơm là rất lớn. Các hợp chất này là thành phần quan trọng trong tinh dầu hoa và có thể có tác dụng làm chất cân bằng trong số nhiều loại chất tạo mùi thơm. Các hợp chất thuộc loại này được sử dụng rộng rãi trong nhiều sản phẩm chăm sóc cơ thể hoặc sản phẩm tiêu dùng, cũng như trong lĩnh vực nước hoa, để tạo ra mùi thơm dễ chịu hoặc khử mùi khó chịu.

LilialTM hoặc hợp chất 3-(4-tert-butylphenyl)-2-methylpropanal (CAS 80-54-6) là thành phần rất thơm do có mùi thơm của hoa linh lan. Hợp chất này đã được phát hiện và sử dụng rộng rãi trong lĩnh vực nước hoa cũng như các sản phẩm chăm sóc cơ thể và sản phẩm tiêu dùng. Tuy nhiên, việc sử dụng chất này đang gây tranh cãi do các phát hiện gần đây rằng nó có độc tính đối với cơ quan sinh sản của chuột đực và chó đực. Trong các nghiên cứu đối với chuột nhắt, chuột lang và bộ Linh trưởng, không phát hiện thấy độc tính, tuy nhiên, theo tiêu chí phân loại của hệ thống hài hòa toàn cầu (Global Harmonized System: GHS), hợp chất này được phân loại là chất gây ung thư, gây đột biến và độc với sinh sản (CMR) nhóm 2. Đối với các chất CMR nhóm 2, cần xác định lượng không gây hại cho người tiêu dùng khi sử dụng. Do quy định này, LilialTM được thay thế bằng các thành phần thơm khác.

Công bố đơn quốc tế số WO2010105873 bộc lộ giải pháp cho vấn đề thay thế Lilial™, giải pháp này tập trung vào việc sử dụng hỗn hợp gồm các thành phần đã biết thường được tìm thấy trong bảng danh sách thành phần của các nhà sản xuất nước hoa để tái tạo ra mùi đặc trưng gần giống với mùi của Lilial™.

Công bố đơn quốc tế số WO2009027957 cũng bộc lộ giải pháp tập trung vào việc tạo ra dạng kết hợp của các thành phần thơm đã biết từ bảng danh sách thành phần của các nhà sản xuất nước hoa.

Công bố đơn quốc tế số WO2013045301 cũng bộc lộ giải pháp để thay thế Lilial™ tập trung vào việc lựa chọn hỗn hợp của các thành phần bao gồm hợp chất Lilyflore™ và một số hợp chất indanyl propanal, kết hợp với các thành phần phụ tạo mùi thơm khác.

Các chất tương tự về cấu trúc của Lilial™ được bộc lộ bởi Winter và Skouroumounis trong tài liệu: *Helv. Chim. Acta* 1996, 79, 1095-1109 và trong Bằng độc quyền sáng chế Mỹ số US 5.527.769, một số sản phẩm trong số chúng có mùi thơm loại Lilial™ và còn có độ ổn định tốt hơn đối với sự oxy hóa so với axit propanoic tương ứng.

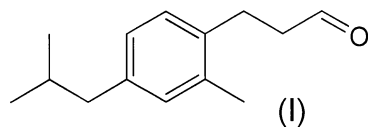
Ngoài ra, Bằng độc quyền sáng chế Anh số GB 988502 bộc lộ aldehyt p-isobutyldihydroxinamic làm chất thay thế cho aldehyt xyclamen, cũng là chất thơm có mùi hoa linh lan và Bằng độc quyền sáng chế Anh số GB 1057360 mô tả một số dẫn xuất của aldehyt dihydroxinamic có các nhóm thế alkyl ở vị trí ortho- hoặc para- có thể sử dụng trong ngành nước hoa.

Bản chất kỹ thuật của sáng chế

Tác giả sáng chế đã phát hiện ra hợp chất có thể được dùng làm thành phần thơm trong chế phẩm thơm và nước hoa và các sản phẩm tiêu dùng. Cụ thể hơn, sáng chế đề xuất hợp chất có mùi thơm đặc trưng của hoa linh lan mong muốn. Cụ thể hơn nữa, tác giả sáng chế đã phát hiện được rằng hợp chất này có mùi thơm đặc trưng mà các nhà sản xuất nước hoa có thể cảm nhận và thừa nhận là rất giống với mùi của hợp chất Lilial™ và vì thế có thể dùng làm chất thay thế dễ dàng cho Lilial™. Ngoài ra, hợp chất này có thể có đặc tính mùi thơm tương tự hoặc thậm chí được cải thiện hơn so với mùi của Lilial™. Cuối cùng, tác giả sáng chế đã phát hiện ra rằng hợp chất này không nằm trong nhóm chất liên quan đến quy định đối với

LilialTM.

Theo đó, theo khía cạnh thứ nhất, sáng chế đề xuất hợp chất có công thức (I):



Theo khía cạnh khác, sáng chế đề xuất phương pháp tạo mùi thơm đặc trưng của hoa linh lan cho chế phẩm thơm, phương pháp này bao gồm bước bổ sung hợp chất có công thức (I) vào chế phẩm thơm này.

Theo khía cạnh khác nữa, sáng chế đề xuất chế phẩm thơm chứa hợp chất có công thức (I).

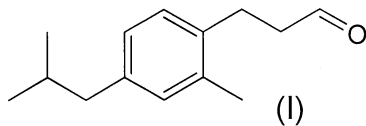
Theo khía cạnh khác nữa, sáng chế đề xuất chế phẩm thơm có mùi thơm đặc trưng của hoa linh lan chứa hợp chất có công thức (I).

Theo khía cạnh khác nữa, sáng chế đề xuất chế phẩm thơm chứa hợp chất có công thức (I) mà không chứa chất thơm alkanal được thế aryl, cụ thể hơn là các hợp chất thơm propanal được thế aryl này không được thế trên vòng aryl ở vị trí ortho so với nhóm thế mang nhóm chức aldehyt, cụ thể là LilialTM.

Theo khía cạnh khác nữa, sáng chế đề xuất sản phẩm chăm sóc cơ thể hoặc chăm sóc gia đình chứa hợp chất có công thức (I) hoặc chế phẩm thơm nêu trên.

Mô tả chi tiết sáng chế

Theo khía cạnh thứ nhất, sáng chế đề xuất hợp chất có công thức (I):



Hợp chất có công thức (I) có đặc tính mùi thơm và tính năng gần giống như LilialTM. Vì thế, trái ngược với các giải pháp đã biết liên quan đến việc thay thế LilialTM trên cơ sở hỗn hợp của các thành phần đã biết, sáng chế đề xuất giải pháp thay thế LilialTM trên cơ sở một hợp chất. Giải pháp này có ưu điểm rõ ràng là có chi phí hữu hiệu trong khi làm cho quá trình sản xuất của nhà sản xuất nước hoa đơn giản hơn.

Các vấn đề quy định liên quan đến LilialTM là do chất này dễ bị phân hủy bằng enzym ở chuột và chó thành axit tert-butyl benzoic (t-BBA), chất này đã được

biết là ức chế quá trình tổng hợp glucoza in vitro (McCune et al, Arch Biochem Biophys (1982) 214 (1): 124-133).

Axit tert-butyl benzoic đã được biết là gây tác dụng đối với tinh hoàn ở chuột đực (Hunter et al. Food Cosmet. Toxicol. 1965, 3: 289-298; Cagen et al. J. Am. Coll. Toxicol. 1989, 8 (5): 1027-1038).

Trái lại, hợp chất theo sáng chế không dễ bị phân hủy bằng enzym thành dẫn xuất axit benzoic của nó. Đây thực sự là kết quả rất bất ngờ khi tính đến sự giống nhất về cấu trúc với LilialTM. Phát hiện bất ngờ của tác giả sáng chế rằng alkanal được thế aryl chứa nhóm thế methyl trên vòng ở vị trí ortho so với nhóm mang nhóm chức aldehyt không dễ bị phân hủy bằng enzym thành dẫn xuất axit benzoic của nó, tạo ra ý tưởng sáng tạo chưa biết trong lĩnh vực này, và cho phép các nhà sản xuất nước hoa tạo ra hợp chất có cấu trúc tương tự với LilialTM (và do đó có đặc tính cảm nhận về khứu giác tương đối giống với các hợp chất này), trong khi không gặp phải các vấn đề về quy định tương tự.

Để nghiên cứu quá trình chuyển hóa in vitro ở tế bào gan của chuột, LilialTM và hợp chất theo sáng chế được ủ trong hỗn dịch với sự có mặt của tế bào gan chuột. Sự giảm lượng LilialTM và hợp chất theo sáng chế và sự tạo ra dẫn xuất axit benzoic tương ứng có thể được phân tích bằng phương pháp sắc ký-khối phổ (gas chromatography-mass spectrometry: GC-MS).

Theo đó, theo khía cạnh khác, sáng chế đề xuất hợp chất có công thức (I) mà không tạo ra hoặc gần như không tạo ra dẫn xuất axit benzoic tương ứng khi được ủ với các tế bào gan phân lập được từ chuột. Thuật ngữ “gần như không tạo ra dẫn xuất axit benzoic” có nghĩa là nồng độ của dẫn xuất này thấp hơn giới hạn phát hiện, nghĩa là nồng độ này nằm trong khoảng từ 0% đến <1%. Vì thế, hợp chất có công thức (I) mang lại cho các nhà sản xuất nước hoa chất thay thế thích hợp rõ ràng cho hợp chất LilialTM.

Sáng chế cũng mô tả ở đây việc sử dụng hợp chất có công thức (I) làm thành phần thơm.

Sáng chế cũng mô tả ở đây việc sử dụng hợp chất có công thức (I) trong chế phẩm thơm làm chất thay thế cho hợp chất alkanal được thế aryl, cụ thể hơn là các hợp chất thơm propanal được thế aryl này không được thế trên vòng aryl ở vị trí ortho so với nhóm thế mang nhóm chức aldehyt, cụ thể là LilialTM.

Theo khía cạnh khác, sáng chế đề xuất phương pháp tạo mùi thơm đặc trưng của hoa linh lan cho chế phẩm thơm, phương pháp này bao gồm bước bổ sung hợp chất có công thức (I) vào chế phẩm thơm này.

Theo khía cạnh khác nữa, sáng chế đề xuất chế phẩm thơm chứa hợp chất có công thức (I).

Theo khía cạnh khác nữa, sáng chế đề xuất chế phẩm thơm có mùi thơm đặc trưng của hoa linh lan chứa hợp chất có công thức (I).

Theo khía cạnh khác nữa, sáng chế đề xuất chế phẩm thơm chứa hợp chất có công thức (I) mà không chứa chất thơm alkanal được thế aryl, cụ thể hơn là các hợp chất thơm propanal được thế aryl này không được thế trên vòng aryl ở vị trí ortho so với nhóm thế mang nhóm chức aldehyt, cụ thể là LilialTM.

Chế phẩm thơm theo sáng chế có thể được tạo ra hoàn toàn bằng hợp chất có công thức (I). Tuy nhiên, ngoài hợp chất có công thức (I), chế phẩm thơm này cũng có thể chứa một hoặc nhiều thành phần thơm khác.

Hợp chất có công thức (I) có thể có mặt trong chế phẩm thơm với lượng bất kỳ, tùy theo tác dụng đối với cơ quan khứu giác cụ thể mà nhà sản xuất nước hoa mong muốn đạt được. Theo một phương án cụ thể của sáng chế, chế phẩm thơm này có thể chứa hợp chất có công thức (I) với lượng nằm trong khoảng từ 0,1 đến 100% trọng lượng.

Khi một hoặc nhiều thành phần thơm khác được sử dụng, các thành phần này có thể được chọn từ các thành phần thơm đã biết bất kỳ.

Cụ thể, các thành phần thơm nêu trên có thể được sử dụng trong chế phẩm thơm theo sáng chế bao gồm 6-metoxi-2,6-dimetylheptan-1-al (metoxymelonal), 5,9-dimetyl-4,8-decadienal (geraldehyt), beta-metyl-3-(1-metyletyl)benzenpropanal (florhydral), octahydro-8,8-dimetylnaphtalen-2-carbaldehyt (xyclomyral), alpha-metyl-1,3-benzodioxol-5-propionaldehyt (helional), 5-metyl-2-(1-metylbutyl)-5-propyl-1,3-dioxan (Troenan), 3-(o-etylphenyl)-2,2-dimetylpropionaldehyt (floralozon), farnesol, 3,7,11-trimetyldodeca-1,6,10-trien-3-ol, tùy ý là hỗn hợp chất đồng phân (nerolidol), 2-metyl-4-phenylbutan-2-ol (dimetylphenyletylcarbinol), cis-4-(isopropyl)xyclohexanmetanol (mayol), 1-(1-hydroxyetyl)-4-(1-metyletyl)xyclohexan (tùy ý là hỗn hợp chất đồng phân không đối quang) (mugetanol), (4-metyl-3-pentenyl)xyclohexencarbaldehyt (citrusal), xyclohexyl

salixylat, hexyl salixylat, benzyl salixylat, amyl salixylat, 3-(p-(2-methylpropyl)phenyl)-2-methylpropionaldehyt (silvial), 3-p-cumenyl-2-methylpropionaldehyt (xyclamenaldehyt), các hỗn hợp gồm: cis-tetrahydro-2-isobutyl-4-methylpyran-4-ol; trans-tetrahydro-2-isobutyl-4-methylpyran-4-ol; (florol), trietyl xitrat và dipropylen glycol.

Các thành phần thơm nêu trên còn có thể bao gồm amyl salixylat (2050-08-0); aurantiol® (89-43-0); benzyl salixylat (118-58-1); cis-3-hexenyl salixylat (65405-77-8); xitronelyl oxyaxetaldehyt (7492-67-3); xyclemax (7775-00-0); xyclohexyl salixylat (25485-88-5); xyclomyral® (68738-94-3); xitronelol (106-22-9); geraniol (106-24-1); xyclopentol Hc 937165 (84560-00-9); xymal (103-95-7); dupical (30168-23-1); etyl linalool (10339-55-6); Floral Super (71077-31-1); Florhydral® (125109-85-5); Florol® (63500-71-0); Gyrane (24237-00-1); Hexyl Salixylat (6259-76-3); Helional (TM) (1205-17-0); Hydroxycitronellal (107-75-5); Linalool (78-70-6); Lyrat® (31906-04-4); Majantol® (103694-68-4); Mayol® (13828-37-0); Melafleur (68991-97-9); Melonal (106-72-9); Mugetanol (63767-86-2); Muguesia (56836-93-2); Muguet alcohol (13351-61-6); Verdantiol (91-51-0); Peonile® (10461-98-0); Phenoxanol® (55066-48-3); Rossitol® (215231-33-7); Silvial® (6658-48-6); Suzural (6658-48-6); Muguol® (18479-57-7); Tetrahydro Linalol (78-69-3); Acalea (84697-09-6); Dihydro Iso Jasmonate (37172-53-5); Hexyl Cinnamic Aldehyt (101-86-0); Hedione® (24851-98-7); Acetoin (513-86-0); Adoxal (141-13-9); Aldolone® (207228-93-1); AMBROCENIDE® (211299-54-6); Ambroxan (3738-00-9); Azurone® (362467-67-2); Bacdanol® (28219-61-6); Calon 1951® (28940-11-6); CetaloX® (3738-00-9); rượu xinamic (104-54-1); xitral (5392-40-5); xyclabut (67634-20-2); xyclaxet (TM) (5413-60-5); Cyclaprop™ (17511-60-3); xyclohexadecanolit (109-29-5); xyclohexadexenon (3100-36-5); xyclopentadecanon (507-72-7); delta damascon (57378-68-4); Ebanol® (67801-20-1); Elintaal Forte (40910-49-4); Etyl vanillin (121-32-4); Etylen brasylat (105-95-3); exaltenon 942008 (14595-54-1); exaltolie total 935985 (106-02-5); floralozon (67634-14-4); fructalat (72903-27-6); gama decalacton (706-14-9); habanolit (111879-80-2); Helvetolide® (141773-73-1); Hexametylindanopyran (1222-05-5); Hydroxyambran® (118562-73-5); Iso E Super® (54464-57-2); Iso hexenyl xyclohexenyl carboxaldehyt (37677-14-8); Jasmal (18871-14-2); Javanol® (198404-

98-7); aldehyt lauric (112-54-9); mefranal (55066-49-4); musxenor (63314-79-4); Tonalid® (1506-02-1); Nectaryl® (95962-14-4); norlim banol (70788-30-6); para hydroxy phenyl butanon (5471-51-2); pino axetaldehyt (33885-51-7); Romandolide® (236391-76-7); sanjinol (28219-61-6); Silvanone® Supra (109-29-5/507-72-7); Terpeneol (8000-41-7); vanilin (121-33-5); và Velvione® (37609-25-9), trong đó, các chữ số trong dấu ngoặc đơn là mã số đăng ký hóa chất của Hiệp hội Hóa chất Hoa Kỳ (CAS).

Chế phẩm thơm không bị giới hạn ở các thành phần thơm đã liệt kê trên đây. Các thành phần thơm khác thường được sử dụng trong lĩnh vực nước hoa có thể được sử dụng, ví dụ, thành phần bất kỳ trong số các thành phần được mô tả trong tài liệu “Perfume and Flavour Chemicals”, S. Arctander, Allured Publishing Corporation, 1994, IL, USA, tài liệu này được đưa vào đây để tham khảo, bao gồm các tinh dầu, chất chiết từ thực vật, tinh chất, resinoit, các chất có mùi thơm thu được từ các sản phẩm tự nhiên và sản phẩm tương tự.

Các thành phần thơm có trong chế phẩm thơm nêu trên đã được mô tả trên đây, tất nhiên là chế phẩm thơm không bị giới hạn bởi các thành phần này. Cụ thể, các chế phẩm thơm có thể chứa chất phụ trợ thường được sử dụng trong chế phẩm thơm. Thuật ngữ “chất phụ gia” dùng để chỉ thành phần có thể được sử dụng trong chế phẩm thơm mà không liên quan cụ thể đến đặc tính gây hưng phấn của chế phẩm này. Ví dụ, chất phụ gia có thể là thành phần có tác dụng trợ giúp cho việc xử lý một hoặc nhiều thành phần thơm, hoặc chế phẩm chứa (các) thành phần này, hoặc nó có thể cải thiện việc xử lý hoặc bảo quản thành phần thơm hoặc chế phẩm thơm chứa thành phần này. Chất này cũng có thể là thành phần tạo ra các lợi ích bổ sung như tạo màu và tạo cấu trúc. Chất này cũng có thể là thành phần tạo độ bền ánh sáng hoặc độ ổn định hóa học cho một hoặc nhiều thành phần được chứa trong thành phần thơm hoặc chế phẩm thơm chứa thành phần này. Phần mô tả chi tiết về tính chất và loại của các chất phụ gia thường được sử dụng trong các chế phẩm thơm chứa thành phần này có thể không được thể hiện cụ thể, nhưng cần hiểu rằng các thành phần này đã được người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực này biết rõ. Ví dụ về các chất phụ gia bao gồm các dung môi và đồng dung môi; các chất hoạt động bề mặt và chất nhũ hóa; chất cải biến độ nhớt và lưu biến học; chất làm đặc và chất gel hóa; chất bảo quản; chất tạo màu, thuốc nhuộm và chất tạo màu; chất độn, chất gia trọng và

chất gia cường; chất làm ổn định đối với tác dụng có hại của nhiệt và ánh sáng, chất axit hóa, chất đệm và chất chống oxy hóa.

Ngoài ra, một hoặc nhiều thành phần bất kỳ của thành phần thơm hoặc chất phụ gia được sử dụng trong sáng chế có thể được tạo ra trong chất phụ gia giải phóng để tạo ra hiệu quả mong muốn, nếu cần. Các chất phụ gia giải phóng có thể là các sản phẩm bao nang. Theo cách khác, chất phụ gia giải phóng có thể ở dạng chất nền rắn, ví dụ, chất nền polyme mà trên đó một hoặc nhiều thành phần thơm hoặc chất phụ gia có thể được liên kết về mặt hóa học hoặc lý học. Hơn nữa, một hoặc nhiều thành phần thơm hoặc chất phụ gia có thể được hòa tan hoặc phân tán trong chất nền dùng để kiểm soát tốc độ của một hoặc nhiều thành phần này giải phóng ra khỏi chất nền. Theo một phương án khác nữa, một hoặc nhiều thành phần hoặc chất phụ gia có thể được mang trên nền xốp như cyclodextrin hoặc zeolit hoặc chất vô cơ khác. Theo một phương án khác nữa, một hoặc nhiều thành phần thơm có thể được tạo ra ở dạng tiền chất thơm, chất này sẽ phản ứng trong môi trường thích hợp để giải phóng thành phần thơm theo cách có kiểm soát.

Liên quan đến phần trên đây, cần hiểu rằng ít nhất một phần chế phẩm thơm có thể ở dạng rắn, dạng gel, dạng bột và/hoặc dạng lỏng. Nếu ở dạng rắn, chế phẩm này có thể dạng hạt, bột hoặc viên nén.

Hợp chất có công thức (I) hoặc chế phẩm thơm được mô tả ở đây có thể được sử dụng để bổ sung mùi thơm đặc trưng, cụ thể là mùi hoa linh lan, theo tất cả các cách cho sản phẩm chăm sóc cơ thể và chăm sóc gia đình.

Theo khía cạnh khác, sáng chế đề xuất phương pháp tạo mùi thơm đặc trưng của hoa linh lan cho sản phẩm, phương pháp này bao gồm bước bổ sung hợp chất có công thức (I) hoặc chế phẩm thơm chứa hợp chất này vào sản phẩm nêu trên.

Hợp chất có công thức (I) làm thành phần thơm, hoặc khi được sử dụng trong chế phẩm thơm có thể tạo ra mùi thơm đặc trưng của hoa linh lan kéo dài và có mùi rất thơm.

Hợp chất có công thức (I) là thành phần thơm có tác động rất mạnh. Sự tác động của thành phần thơm này liên quan đến giá trị mùi thơm của nó. Giá trị mùi thơm là tỷ lệ giữa áp suất hơi và nồng độ ngưỡng phát hiện được.

Hợp chất có công thức (I) có giá trị mùi thơm rất lớn, cụ thể là bằng 559'071. Các thành phần thơm liên quan không tạo ra hiệu quả tương đương. Ví dụ, Lilial™

có giá trị mùi thơm chỉ là 32'978 và xyclamen aldehyt có giá trị mùi thơm chỉ là 21'986.

Giá trị mùi thơm của hợp chất có công thức (I) cao hơn đáng kể có ý nghĩa ở chỗ nhu cầu tạo ra thành phần thơm có mức độ thơm mạnh và kéo dài cho phép các nhà sản xuất nước hoa tạo ra sản phẩm nước hoa mong muốn với nồng độ thành phần thơm thấp.

Các sản phẩm tiêu dùng như sản phẩm chăm sóc cơ thể và chăm sóc gia đình bao gồm, nhưng không chỉ giới hạn ở, sản phẩm xử lý sản phẩm dệt, chất trợ là, chất làm sạch vải, sản phẩm giặt, sản phẩm làm sạch, cụ thể là dùng cho bề mặt cứng và/hoặc mềm, sản phẩm làm sạch dùng cho gia đình, sản phẩm chăm sóc, sản phẩm chăm sóc khi rửa, sản phẩm chăm sóc khi giặt, sản phẩm làm thơm phòng, và sản phẩm làm thơm nhà, sản phẩm dưỡng tóc, sản phẩm tạo màu, nước xả vải, chất nền dưỡng tóc, dược phẩm, sản phẩm bảo vệ cây trồng, sản phẩm đánh bóng, thực phẩm, sản phẩm mỹ phẩm, phân bón, vật liệu xây dựng, keo, sản phẩm tẩy trắng, sản phẩm khử chất vôi, sản phẩm chăm sóc xe ô tô, sản phẩm chăm sóc sàn nhà, sản phẩm chăm sóc bếp, sản phẩm chăm sóc đồ da hoặc sản phẩm chăm sóc nội thất, máy rửa bát, sản phẩm khử trùng, sản phẩm thơm, sản phẩm trợ tháo khuôn và/hoặc tiền chất của các sản phẩm nêu trên.

Người có trình độ hiểu biết trung bình trong lĩnh vực này sẽ hiểu rõ khả năng ứng dụng các thành phần thơm và chế phẩm thơm vào sản phẩm chăm sóc cơ thể và chăm sóc gia đình và không cần mô tả chi tiết thêm các sản phẩm này ở đây. Tuy nhiên, các sản phẩm cụ thể có thể được đề cập bao gồm sản phẩm làm sạch; sản phẩm chăm sóc xe ô tô; sản phẩm mỹ phẩm; sản phẩm để xử lý sản phẩm dệt; và sản phẩm làm thơm nhà và sản phẩm làm thơm không khí.

Các sản phẩm làm sạch bao gồm:

Các sản phẩm làm sạch bồn cầu hoặc bồn rửa tay, nói theo cách khác là các sản phẩm dùng để làm sạch chậu rửa và chỗ đi vệ sinh, tốt hơn là các sản phẩm này được cung cấp ở dạng bột, khối, viên nén hoặc lỏng, tốt hơn nếu là dạng gel. Ngoài các thành phần thông thường khác như chất hoạt động bề mặt, chúng thường chứa các axit hữu cơ (ví dụ, axit xitric và/hoặc axit lactic) hoặc natri hydro sulfat, axit amidosulfuric hoặc axit phosphoric để loại bỏ cặn vôi hoặc cặn nước tiểu;

Các sản phẩm làm sạch đường ống hoặc ống dẫn: các sản phẩm này thường là

sản phẩm có tính kiềm mạnh để loại bỏ tác nhân gây tắc đường ống bao gồm các chất hữu cơ như tóc, chất béo, thức ăn thừa, cặn xà phòng, và chất tương tự. Việc cho thêm bột Al hoặc bột Zn có thể có tác dụng tạo ra khí H_2 có hiệu quả tách khí mạnh. Các thành phần có thể thường là kiềm, muối kiềm, chất oxy hóa và muối trung tính. Tốt hơn, nếu các sản phẩm cung cấp dạng bột còn chứa natri nitrat và natri clorua. Tốt hơn, nếu các sản phẩm làm sạch đường ống ở dạng lỏng còn chứa hypoclorit. Các sản phẩm này cũng có thể là sản phẩm làm sạch trên cơ sở enzym. Các sản phẩm này cũng có thể là sản phẩm có tính axit;

Các sản phẩm làm sạch nói chung hoặc có mục đích chung hoặc có tất cả các mục đích có thể được sử dụng cho tất cả các bề mặt cứng trong gia đình và bề mặt thương mại, các sản phẩm này có thể được dùng để làm sạch cả bề mặt khô hoặc ướt. Nói chung, các sản phẩm này là sản phẩm trung tính hoặc có tính kiềm nhẹ hoặc có tính axit nhẹ, đặc biệt là các sản phẩm dạng lỏng. Các sản phẩm làm sạch dùng cho mục đích chung hoặc tất cả các mục đích thường chứa chất hoạt động bề mặt, chất phụ gia, dung môi và có tính ưa nước, chất màu, chất bảo quản và chất tương tự;

Các sản phẩm làm sạch dùng cho tất cả các mục đích có đặc tính khử trùng đặc hiệu. Chúng thường chứa thêm các thành phần có hoạt tính kháng khuẩn (ví dụ, aldehyt, rượu, hợp chất amoni bậc bốn, chất hoạt động bề mặt lưỡng tính, triclosan);

Các sản phẩm làm sạch vệ sinh là sản phẩm dùng để làm sạch nhà tắm và nhà vệ sinh. Tốt hơn, nếu các sản phẩm làm sạch vệ sinh có tính kiềm được dùng để loại bỏ chất bẩn dạng chất béo trong khi các sản phẩm làm sạch vệ sinh có tính axit được sử dụng cụ thể để loại bỏ cặn vôi. Có lợi nếu các sản phẩm làm sạch vệ sinh cũng có tác dụng khử trùng đáng kể, cụ thể là các sản phẩm làm sạch vệ sinh có tính kiềm mạnh chứa clo;

Các sản phẩm làm sạch lò nướng hoặc vỉ nướng có thể được cung cấp ở dạng gel hoặc dạng phun bột. Chúng thường dùng để loại bỏ lượng thực phẩm còn sót lại bị cháy hoặc than hóa. Tốt hơn, nếu các sản phẩm làm sạch lò nướng được tạo ra ở dạng có tính kiềm mạnh, ví dụ, bằng cách sử dụng natri hydroxit, natri metasilicat, 2-aminoetanol. Ngoài ra, chúng thường chứa các chất hoạt động bề mặt anion và/hoặc không ion, dung môi tan trong nước, và trong một số trường hợp, chúng còn chứa các chất làm đặc như polycarboxylat và carboxymetylxenluloza;

Các sản phẩm đánh bóng kim loại là sản phẩm dùng cho các loại kim loại đặc

biệt như thép không gỉ hoặc bạc. Tốt hơn, nếu sản phẩm làm sạch dùng cho thép không gỉ chứa, ngoài các axit (tốt hơn là với lượng tối đa 3% trọng lượng, ví dụ, axit xitric, axit lactic), các chất hoạt động bề mặt (cụ thể là với lượng tối đa 5% trọng lượng, tốt hơn nếu là các chất hoạt động bề mặt không ion và/hoặc anion), và nước, và cả các dung môi (tốt hơn là với lượng tối đa 15% trọng lượng) để loại bỏ các chất bẩn dạng chất béo, và còn chứa các hợp chất khác như chất làm đặc và chất bảo quản. Ngoài ra, tốt hơn nếu các cấu trúc đánh bóng rất mịn được đưa vào sản phẩm dùng để đánh bóng bề mặt thép không gỉ có độ sáng. Trong khi đó các sản phẩm đánh bóng bạc có thể được tạo ra ở dạng có tính axit. Cụ thể, để loại bỏ các cặn bạc sulfua màu đen, tốt hơn nếu các sản phẩm này chứa chất tạo phức (ví dụ, thioure, natri thiosulfat). Các dạng sản phẩm thông thường bao gồm sản phẩm để đánh bóng vải, sản phẩm dùng cho bề mặt, dạng bột nhão và dạng lỏng. Các lớp bị biến màu có màu tối (các lớp oxit) được loại bỏ bằng cách sử dụng sản phẩm làm sạch chứa đồng và các sản phẩm làm sạch chứa kim loại không phải sắt (II) (ví dụ, đối với đồng thau và đồng đỏ). Chúng thường là sản phẩm có tính kiềm yếu (tốt hơn là chứa amoniac) và thường chứa các chất đánh bóng và tốt hơn là cũng chứa xà phòng amoni và/hoặc chất tạo phức;

Các sản phẩm làm sạch kính và cửa sổ: tốt hơn nếu các sản phẩm này dùng để loại bỏ bụi bẩn, đặc biệt là bụi bẩn dầu mỡ, ra khỏi bề mặt kính. Tốt hơn, nếu các sản phẩm chứa hợp chất như chất hoạt động bề mặt anion và/hoặc không ion (cụ thể là với lượng tối đa 5% trọng lượng), amoniac và/hoặc etanolamin (cụ thể là với lượng tối đa 1% trọng lượng), etanol và/hoặc 2-propanol, các ete glycol (cụ thể là với lượng nằm trong khoảng từ 10 đến 30% trọng lượng), nước, chất bảo quản, chất tạo màu, chất chống tạo sương mù và chất tương tự; và

Các sản phẩm làm sạch với mục đích đặc biệt, ví dụ, là các sản phẩm dùng cho bếp thủy tinh-gốm, và cả sản phẩm làm sạch thảm và sản phẩm loại bỏ vết bẩn.

Các sản phẩm chăm sóc xe ô tô bao gồm:

Sản phẩm giữ màu sơn, sản phẩm đánh bóng sơn, sản phẩm làm sạch sơn, sản phẩm bảo quản khi rửa xe, sản phẩm dùng để rửa xe ô tô, sản phẩm dùng để đánh bóng và rửa xe ô tô, sản phẩm dùng để đánh bóng kim loại trang trí, màng bảo vệ kim loại trang trí, sản phẩm làm sạch đồ nhựa, sản phẩm loại bỏ hắc ín, sản phẩm làm sạch màn hình, sản phẩm làm sạch động cơ và sản phẩm tương tự.

Các sản phẩm mỹ phẩm bao gồm:

(a) các sản phẩm mỹ phẩm chăm sóc da, đặc biệt là các sản phẩm tẩy, sản phẩm giặt và làm sạch da, sản phẩm chăm sóc da, sản phẩm trang điểm mắt, sản phẩm dưỡng môi, sản phẩm chăm sóc móng, sản phẩm chăm sóc cơ thể, sản phẩm chăm sóc chân;

(b) các sản phẩm mỹ phẩm có hiệu quả đặc biệt như kem chống nắng, sản phẩm thuộc da, sản phẩm trị nám, sản phẩm khử mùi, sản phẩm chống tiết mồ hôi, sản phẩm tẩy lông, sản phẩm cạo râu, nước hoa;

(c) sản phẩm mỹ phẩm chăm sóc răng, đặc biệt là sản phẩm chăm sóc răng và miệng, sản phẩm chăm sóc răng, sản phẩm làm sạch dùng để phục hình răng miệng, keo dùng để phục hình răng miệng; và

(d) sản phẩm mỹ phẩm để chăm sóc tóc, đặc biệt là dầu gội đầu, sản phẩm chăm sóc tóc, sản phẩm định dạng tóc, sản phẩm tạo kiểu tóc, và sản phẩm nhuộm tóc.

Các sản phẩm xử lý sản phẩm dệt bao gồm:

Sản phẩm giặt hoặc xả vải, ví dụ, hoặc ở dạng lỏng hoặc ở dạng rắn.

Chất làm thơm không khí và chất làm thơm phòng bao gồm:

Tốt hơn, nếu là các sản phẩm chứa hợp chất dễ bay hơi và thường là có lợi nếu các hợp chất này có mùi dễ chịu ngay cả khi với lượng rất nhỏ để khử mùi khó chịu. Cụ thể, các chất làm thơm nhà dùng cho phòng khách chứa các tinh dầu tự nhiên và tổng hợp như dầu lá thông, dầu cam quýt, dầu khuynh diệp, dầu hoa oải hương, và dầu tương tự, ví dụ, với lượng tối đa là 50% trọng lượng. Dạng sol khí có thể chứa lượng tinh dầu nhỏ hơn, ví dụ, nhỏ hơn 5% hoặc nhỏ hơn 2% trọng lượng, và còn chứa hợp chất khác như axetaldehyt (cụ thể là với lượng <0,5% trọng lượng), rượu isopropyllic (cụ thể là với lượng <5% trọng lượng), dầu khoáng (cụ thể là với lượng <5% trọng lượng), và chất đầy. Các dạng trình bày khác bao gồm dạng thanh và dạng khối. Các dạng này thường được sản xuất bằng cách sử dụng gel cô đặc dạng chứa tinh dầu. Cũng có thể cho thêm formaldehyt (để bảo quản) và chlorophyll (tốt hơn là với lượng <5% trọng lượng), và các thành phần khác nữa. Tuy nhiên, các chất làm thơm nhà không chỉ giới hạn ở phòng khách mà còn có thể được dùng cho xe ô tô, tủ đựng, máy rửa bát, tủ lạnh hoặc giày, và thậm chí có thể sử dụng chúng trong máy hút bụi. Trong các sản phẩm dùng trong gia đình, (ví dụ, trong tủ đựng),

ngoài chất cải thiện mùi, các chất khử trùng cũng được sử dụng, tốt hơn là sản phẩm này chứa các hợp chất như canxi phosphat, bột talc, stearin, và các tinh dầu, các sản phẩm này ở dạng, ví dụ, gói nhỏ.

Các thành phần của sản phẩm tiêu dùng đã nêu trên đây, cụ thể là các sản phẩm dùng để giặt và làm sạch có thể chứa một hoặc nhiều chất sau:

Các chất phụ gia, chất hoạt động bề mặt, enzym, chất tẩy trắng, tốt hơn nếu là hợp chất peroxy hữu cơ và/hoặc vô cơ, chất hoạt hóa peroxy, dung môi hữu cơ trộn lẫn được với nước, chất càn hóa, chất điện phân, chất điều chỉnh độ pH, chất làm đặc và các chất phụ gia khác như chất có hoạt tính giải phóng chất bản, chất tăng trắng nhờ hiệu ứng quang học, chất ức chế sự xám màu, chất ức chế sự chuyển màu, chất điều chỉnh sự tạo bọt, và chất nhuộm màu.

Các chất hoạt động bề mặt bao gồm chất hoạt động bề mặt anion, chất hoạt động bề mặt không ion và hỗn hợp của chúng, tuy nhiên, các chất hoạt động bề mặt cation cũng thích hợp. Các chất hoạt động bề mặt không ion thích hợp bao gồm, cụ thể là các sản phẩm etoxy hóa và/hoặc propoxyl hóa của alkyl glycosit và/hoặc của mỗi rượu mạch thẳng hoặc mạch nhánh có từ 12 đến 18 nguyên tử cacbon trong nhóm alkyl và từ 3 đến 20, tốt hơn là từ 4 đến 10, nhóm alkyl ete. Các sản phẩm khác cũng có thể sử dụng là sản phẩm etoxy hóa và/hoặc propoxy hóa tương ứng của N-alkylamin, diol kế cận, este của axit béo và amit của axit béo tương ứng với dẫn xuất của rượu mạch dài nêu trên về nhóm alkyl, và của alkylphenol có từ 5 đến 12 nguyên tử cacbon trong gốc alkyl.

Các chất hoạt động bề mặt anion thích hợp bao gồm xà phòng và tốt hơn nếu là các chất chứa nhóm sulfat hoặc sulfonat có ion kiềm dưới dạng cation. Các xà phòng bao gồm muối kiềm của axit béo no hoặc không no có từ 12 đến 18 nguyên tử cacbon. Các axit béo này cũng có thể được sử dụng ở dạng trung hòa không hoàn toàn. Các chất hoạt động bề mặt hữu ích thuộc loại sulfat là muối của nửa este của axit sulfuric và rượu béo có từ 12 đến 18 nguyên tử cacbon, và các sản phẩm sulfat hóa của chất hoạt động bề mặt không ion nêu trên có mức độ etoxy hóa thấp. Các chất hoạt động bề mặt hữu ích thuộc loại sulfonat là hợp chất alkylbensensulfonat mạch thẳng có từ 9 đến 14 nguyên tử cacbon ở nhóm alkyl, các hợp chất alkansulfonat có từ 12 đến 18 nguyên tử cacbon, và hợp chất olefinsulfonat có từ 12 đến 18 nguyên tử cacbon được tạo ra khi cho monoolefin tương ứng phản ứng với

lưu huỳnh trioxit, cũng như các este của axit béo alpha-sulfo được tạo ra khi sulfonat hóa este metyl của axit hoặc este etyl của axit béo.

Các chất hoạt động bề mặt cation bao gồm estequat và/hoặc hợp chất amoni bậc bốn (quaternary amoni compound: QAC). Các hợp chất QAC có thể được tạo ra bằng cách cho amin bậc ba phản ứng với các chất alkyl hóa như metyl clorua, benzyl clorua, dimetyl sulfat, dodecyl bromua, và etylen oxit. Sự alkyl hóa của amin bậc ba có gốc alkyl mạch dài và hai nhóm metyl diễn ra rất dễ dàng, và sự tạo thành bazơ bậc bốn của amin bậc ba có hai gốc alkyl mạch dài và một nhóm metyl cũng có thể được tiến hành bằng cách sử dụng metyl clorua trong điều kiện êm dịu. Các amin có ba gốc alkyl mạch dài hoặc gốc alkyl được thế hydroxy có khả năng phản ứng thấp, và được tạo thành bazơ bậc bốn, ví dụ, bằng cách sử dụng dimetyl sulfat. Các hợp chất QAC thích hợp bao gồm, ví dụ, benzalkoni clorua (N-alkyl-N,N-dimetylbenzylamoni clorua), benzalkon B (m,p-diclobenzyl dimetyl-C12-alkylamoni clorua), benzoxoni clorua (benzyl dodecyl-bis(2-hydroxyetyl)amoni clorua), xetrimoni bromua (N-hexadecyl-N,N-trimetyl amoni bromua), benzetoni clorua (N,N-dimetyl-N-[2-[2-[p-(1,1,3,3-tetrametylbutyl)phenoxy]etoxy]etyl] benzylamoni clorua), các hợp chất dialkyldimetyl amoni clorua như di-n-decyl dimetyl amoni clorua, didecyl dimetyl amoni bromua, dioctyl dimetyl amoni clorua, 1-xetylpyridini clorua, và thiazolin iodua, cũng như hỗn hợp của chúng. Các hợp chất QAC được ưu tiên là các hợp chất benzalkoni clorua có gốc alkyl có từ 8 đến 22 nguyên tử cacbon, cụ thể là các hợp chất alkylbenzyl dimetyl amoni clorua có từ 12 đến 14 nguyên tử cacbon.

Các hợp chất estequat bao gồm các hợp chất metylhydroxyalkyldialkoyloxy alkylamoni metosulfat được bán trên thị trường bởi công ty Stepan với tên thương mại là StepantexTM, hoặc các sản phẩm của công ty Cognis Deutschland GmbH đã biết với tên thương mại là DehyquatTM, hoặc sản phẩm RewoquatTM của công ty Goldschmidt-Witco.

Các chất hoạt động bề mặt có thể được sử dụng với lượng nằm trong khoảng từ 5 đến 50% trọng lượng trong sản phẩm tiêu dùng theo sáng chế.

Các chất phụ gia bao gồm các chất phụ gia hữu cơ tan và/hoặc vô cơ tan trong nước và/hoặc trộn lẫn được với nước. Cụ thể, các chất phụ gia hữu cơ tan trong nước bao gồm các axit polycarboxylic, cụ thể hơn là axit xitric và axit đường, monome và

polyme axit aminopolycarboxylic, cụ thể là axit metylglyxindiaxetic, axit nitrilotriaxetic và axit etylendiamintetraaxetic cũng như axit polyaspartic, axit polyphosphonic, cụ thể là aminotris(axit metylenphosphonic), etylendiamin tetrakis(axit metylenphosphonic), và axit 1-hydroxyetan-1,1-diphosphonic, các hợp chất polyme hydroxy như dextrin, cũng như polyme axit (poly)carboxylic, polyme axit acrylic, axit metacrylic, axit maleic, và các polyme hỗn hợp của chúng, các hỗn hợp này cũng có thể chứa một lượng nhỏ chất polyme hóa được không có nhóm chức axit carboxylic. Trọng lượng phân tử tương đối của polyme đồng nhất của các axit carboxylic không no thường nằm trong khoảng từ 5000 đến 200000, trọng lượng phân tử tương đối của các copolyme nằm trong khoảng từ 2000 đến 200000, mỗi trường hợp đều tính theo axit tự do. Các hợp chất thích hợp thuộc nhóm này là các copolyme của axit acrylic hoặc axit metacrylic với các ete vinyl như ete vinylmetyl, các este vinyl, etylen, propylen, và styren, trong đó tỷ lệ axit bằng ít nhất 50% trọng lượng. Cũng có thể sử dụng các chất phụ gia hữu cơ tan trong nước, hợp chất trime chứa hai axit không no và/hoặc muối của nó dưới dạng monome và monome thứ ba, rượu vinylic và/hoặc dẫn xuất rượu vinylic hoặc hợp chất hydrat cacbon. Có thể thu được monome axit thứ nhất hoặc muối của nó từ monoaxit carboxylic không no có từ 3 đến 8 nguyên tử cacbon ở gốc etylen. Monome axit thứ hai hoặc muối của nó có thể là dẫn xuất của axit dicarboxylic có từ 4 đến 8 nguyên tử cacbon, ví dụ, axit maleic. Đơn vị monome thứ ba được tạo bởi rượu vinylic và/hoặc rượu vinylic được este hóa. Các polyme có thể chứa axit (met)acrylic hoặc (met)acrylat với lượng nằm trong khoảng từ 60 đến 95% trọng lượng, cụ thể là nằm trong khoảng từ 70 đến 90% trọng lượng, cũng như rượu vinylic và/hoặc vinyl axetat với lượng nằm trong khoảng từ 5 đến 40% trọng lượng. Các polyme cụ thể là các polyme trong đó tỷ lệ trọng lượng của axit (met)acrylic hoặc muối (met)acrylat tương ứng với axit maleic hoặc muối maleat nằm trong khoảng từ 1:1 đến 4:1. Cả tỷ lệ định lượng và tỷ lệ trọng lượng đều tính theo axit. Monome axit thứ hai hoặc muối của nó cũng có thể là dẫn xuất của axit alylsulfonic được thế ở vị trí 2 bằng gốc alkyl, ví dụ, gốc alkyl có từ 1 đến 4 nguyên tử cacbon, hoặc bằng gốc thơm mà có thể thu được từ benzen hoặc dẫn xuất benzen. Các hợp chất trime có thể chứa axit (met)acrylic hoặc muối (met)acrylat với lượng nằm trong khoảng từ 40 đến 60% trọng lượng, cụ thể là nằm trong khoảng từ 45 đến 55% trọng lượng, đặc biệt tốt hơn nếu là axit acrylic hoặc

muối acrylat với lượng nằm trong khoảng từ 10 đến 30% trọng lượng, tốt hơn nếu là axit metallylsulfonic hoặc muối metallylsulfonat với lượng nằm trong khoảng từ 15 đến 25% trọng lượng, và chứa monome thứ ba là hydrat cacbon với lượng nằm trong khoảng từ 15 đến 40% trọng lượng, tốt hơn là nằm trong khoảng từ 20 đến 40% trọng lượng. Hydrat cacbon này có thể là, ví dụ, mono-, di-, oligo-, hoặc poly-sacarit, ví dụ, sucroza. Các hợp chất trime thường có trọng lượng phân tử tương đối nằm trong khoảng từ 1000 đến 200000. Ngoài ra, các copolyme chứa monome là acrolein và axit acrylic/muối của axit acrylic hoặc vinyl axetat. Đặc biệt, để sản xuất nước giặt, các chất phụ gia hữu cơ có thể được sử dụng ở dạng dung dịch nước, ví dụ, dung dịch nước với lượng nằm trong khoảng từ 30 đến 50% trọng lượng. Tất cả các axit nêu trên có thể được sử dụng ở dạng muối tan trong nước của chúng, cụ thể là các muối kiềm của chúng.

Các chất phụ gia hữu cơ có thể được sử dụng với lượng tối đa 40% trọng lượng.

Các chất phụ gia vô cơ tan trong nước bao gồm các hợp chất silicat kiềm và polyphosphat kiềm, ví dụ, natri triphosphat. Các hợp chất nhôm silicat kiềm dạng tinh thể hoặc dạng vô định hình, ví dụ, natri nhôm silicat dạng tinh thể, cũng có thể được sử dụng làm chất phụ gia tan trong nước, chất phụ gia hữu cơ phân tán được trong nước, với lượng tối đa 50% trọng lượng chẳng hạn. Các hợp chất nhôm silicat thường chứa các hạt có cỡ hạt nhỏ hơn 30 μm .

Các hợp chất silicat kiềm dạng tinh thể cũng có thể được sử dụng một mình hoặc kết hợp với hợp chất silicat dạng vô định hình. Các hợp chất silicat kiềm có thể sử dụng trong sản phẩm tiêu dùng theo sáng chế làm chất phụ gia làm sạch có thể có tỷ lệ mol của oxit kiềm với SiO_2 nhỏ hơn 0,95, cụ thể là nằm trong khoảng từ 1:1,1 đến 1:12, và có thể có mặt trong ở dạng vô định hình hoặc dạng tinh thể. Các hợp chất silicat kiềm có thể là natri silicat, cụ thể là hợp chất natri silicat dạng vô định hình, có tỷ lệ mol $\text{Na}_2\text{O}:\text{SiO}_2$ nằm trong khoảng từ 1:2 đến 1:2,8.

Các chất phụ gia có thể được chứa trong thành phần của sản phẩm tiêu dùng theo sáng chế với lượng tối đa là 60% trọng lượng.

Các hợp chất peroxy bao gồm các hợp chất peraxit hữu cơ hoặc muối peraxit của các axit hữu cơ như axit phtalimidopercapronic, axit perbenzoic, hoặc các muối của axit diperdodecandioic, hydro peroxit, và các muối vô cơ giải phóng hydro

peroxit trong điều kiện sử dụng như perborat, percarbonat, và/hoặc persilicat. Nếu hợp chất peroxy dạng rắn cần được sử dụng, chúng có thể được sử dụng ở dạng bột hoặc dạng hạt, mà nói chung chúng cũng có thể được sử dụng ở dạng đã biết.

Các hợp chất peroxy có thể được sử dụng với lượng tối đa 50% trọng lượng. Việc cho thêm lượng nhỏ chất ổn định của chất tẩy trắng đã biết, ví dụ, phosphonat, borat, tương ứng với metaborat và metasilicat cũng như các muối magie như magie sulfat, cũng có thể hữu ích.

Trong điều kiện thủy phân, tốt hơn nếu các hợp chất tạo ra axit peroxocarboxylic béo có từ 1 đến 10 nguyên tử cacbon, cụ thể là có từ 2 đến 4 nguyên tử cacbon, và/hoặc axit perbenzoic (tùy ý được thế), có thể được sử dụng làm chất hoạt hóa tẩy trắng. Các chất mang nhóm O- và/hoặc N-axyl có số nguyên tử cacbon nêu trên, và/hoặc các nhóm benzoyl tùy ý được thế là thích hợp. Nhiều hợp chất alkylendiamin được axyl hóa, cụ thể là tetraaxetyletylendiamin (TAED), dẫn xuất triazin được axyl hóa, cụ thể là 1,5-diaxetyl-2,4-dioxohexahydro-1,3,5-triazin (DADHT), hợp chất glycoluril được axyl hóa, cụ thể là tetraaxetyl glycoluril (TAGU), các hợp chất N-axylimit, cụ thể là N-nonanoyl succinimit (NOSI), các hợp chất phenolsulfonat được axyl hóa, cụ thể là n-nonanoyl hoặc isononanoyl oxybensensulfonat (n- hoặc iso-NOBS), các hợp chất anhydrit axit carboxylic, cụ thể là anhydrit axit phtalic, các rượu nhiều lần được axyl hóa, cụ thể là triaxetin, etylen glycol diaxetat, 2,5-diaxetoxi-2,5-dihydrofuran, và các hợp chất enol este, cũng như sorbitol và mannitol được axetyl hóa tương ứng với hỗn hợp của chúng (SORMAN), các dẫn xuất đường được axyl hóa, cụ thể là pentaaxetylglucoza (PAG), pentaaxetylfructoza, tetraaxetylxyloza và octaaxetylactoza, cũng như glutamin tùy ý được alkyl hóa ở vị trí N và gluconolacton, và/hoặc lactam axyl hóa ở vị trí N, ví dụ, N-benzoylcaprolactam, được axetyl hóa, có thể được sử dụng. Các hợp chất axyl axetat và axyl lactam được thế, có tính ưa nước cũng có thể được sử dụng. Hỗn hợp các chất hoạt hóa tẩy trắng thông thường cũng có thể được sử dụng. Các chất hoạt hóa tẩy trắng này có thể được chứa với lượng thường dùng, tốt hơn là với lượng nằm trong khoảng từ 1 đến 10% trọng lượng, cụ thể là nằm trong khoảng từ 2 đến 8% trọng lượng, tính theo tổng lượng các chất.

Ngoài ra hoặc thay vì các chất hoạt hóa tẩy trắng thông thường nêu trên, các hợp chất sulfonimin và/hoặc muối của kim loại chuyển tiếp hoặc phức chất kim loại

chuyển tiếp làm gia tăng mức độ tẩy trắng cũng có thể được chứa dưới dạng chất xúc tác tẩy trắng. Cụ thể, các hợp chất là kim loại chuyển tiếp thích hợp bao gồm phức chất salen của mangan, sắt, coban, ruthen, hoặc molybden và hợp chất tương tự chứa nitơ của chúng, các phức chất cacbonyl của mangan, sắt, coban, ruthen, hoặc molybden, các phức chất của mangan, sắt, coban, ruthen, molybden, titanium, vanadi, và đồng có các phối tử ba cạnh chứa nitơ, các phức chất amin của coban, sắt, đồng và ruthen. Hỗn hợp các chất hoạt hóa tẩy trắng và chất xúc tác tẩy trắng là kim loại chuyển tiếp cũng có được sử dụng. Các phức chất của kim loại chuyển tiếp làm gia tăng mức độ tẩy trắng, cụ thể là có các nguyên tử trung tâm Mn, Fe, Co, Cu, Mo, V, Ti, và/hoặc Ru, có thể được sử dụng với lượng thông thường, như tối đa là 1% trọng lượng so với trọng lượng thành phần của sản phẩm tiêu dùng.

Các enzym thích hợp có thể được sử dụng trong thành phần của sản phẩm tiêu dùng là các enzym thuộc nhóm proteaza, cutinaza, amylaza, pululanaza, hemixenlulaza, xenlulaza, lipaza, oxidaza, và peroxidaza, cũng như hỗn hợp của chúng. Các chất có hoạt tính enzym thu được từ nấm hoặc vi khuẩn như *Bacillus subtilis*, *Bacillus licheniformis*, *Streptomyces griseus*, *Humicola lanuginosa*, *Humicola insolens*, *Pseudomonas pseudoalcaligenes*, hoặc *Pseudomonas cepacia*, cũng thích hợp. Các enzym được sử dụng khi thích hợp này có thể được hấp phụ trên chất mang và/hoặc được gắn vào chất bao để bảo vệ chúng không có hoạt tính sớm. Chúng có thể được chứa trong các sản phẩm giặt theo sáng chế với lượng thường là thấp hơn 5% trọng lượng.

Các chất tăng trắng nhờ hiệu ứng quang học bao gồm dẫn xuất của axit diaminostilbendisulfonic hoặc muối kim loại kiềm của nó. Ví dụ về các chất tăng trắng thích hợp là muối của axit 4,4'-bis(2-anilino-4-morpholino-1,3,5-triazinyl-6-amino)stilben-2,2'-disulfonic hoặc các hợp chất có cấu trúc tương tự mang nhóm dietanolamino, nhóm metylamino, nhóm anilino, hoặc nhóm 2-metoxyletylamino, thay vì nhóm morpholino. Các chất tăng trắng thuộc loại diphenylstyryl được thể cũng có thể có mặt, ví dụ, các muối kiềm của hợp chất 4,4'-bis(2-sulfoxytyryl)diphenyl, hợp chất 4,4'-bis(4-clo-3-sulfoxytyryl)diphenyl, hoặc hợp chất 4-(4-cloxytyryl)-4'-(2-sulfoxytyryl)diphenyl. Hỗn hợp các chất tăng trắng nhờ hiệu ứng quang học nêu trên cũng có thể được sử dụng.

Chất ức chế sự tạo bọt bao gồm hợp chất polysiloxan hữu cơ và các hỗn hợp

của nó có dạng siêu mịn, tùy ý là axit silixic được silan hóa, cũng như sáp parafin và hỗn hợp của chúng với axit silixic được silan hóa hoặc alkylenediamit của axit béo ở vị trí bis. Hỗn hợp của các chất ức chế sự tạo bọt khác nhau, ví dụ, hỗn hợp của các hợp chất silicon, parafin hoặc sáp cũng có thể được sử dụng. Các chất ức chế sự tạo bọt, cụ thể là chất ức chế sự tạo bọt chứa silicon và/hoặc parafin được ưu tiên là chất gắn kết với chất mang dạng hạt là chất tan trong nước hoặc phân tán được trong nước. Cụ thể, hỗn hợp của các parafin và bistearyletyldiamit có thể được sử dụng.

Các chất có hoạt tính giải phóng chất bẩn là các hợp chất có ảnh hưởng tích cực đến khả năng giặt sạch dầu và chất béo của sản phẩm dệt. Hiệu quả này trở nên đặc biệt rõ ràng khi sản phẩm dệt bị bẩn là sản phẩm đã được giặt vài lần trước đó bằng tác nhân giặt theo sáng chế chứa thành phần giải phóng dầu và chất béo này. Các thành phần giải phóng dầu và chất béo này bao gồm, ví dụ, các ete xenluloza không ion như metyl xenluloza và metylhydroxypropyl xenluloza chứa nhóm metoxy với tỷ lệ nằm trong khoảng từ 15 đến 30% trọng lượng và chứa nhóm hydroxypropoxyl với tỷ lệ nằm trong khoảng từ 1 đến 15% trọng lượng, mỗi trường hợp đều tính theo lượng ete xenluloza không ion, cũng như các polyme đã biết trong lĩnh vực này của axit phtalic và/hoặc axit terephtalic tương ứng của dẫn xuất của chúng với monome và/hoặc polyme diol, cụ thể là polyme của etylen terephtalat và/hoặc polyetylen glycol terephtalat hoặc các dẫn xuất anion và/hoặc không ion được cải biến của chúng.

Các chất ức chế sự chuyển màu bao gồm các polyme của vinylpyrrolidon, vinylimidazol, vinylpyridin-oxit N, hoặc các copolyme của chúng. Các chất khác cũng có thể được sử dụng là cả polyvinylpyrrolidon có trọng lượng phân tử nằm trong khoảng từ 15000 đến 50000 và polyvinylpyrrolidon có trọng lượng phân tử lớn hơn 1000000, cụ thể là nằm trong khoảng từ 1500000 đến 4000000, copolyme N-vinylimidazol/N-vinylpyrrolidon, polyvinylloxazolidon, copolyme trên cơ sở monome vinyl và amit của axit carboxylic, các polyeste và polyamit chứa nhóm pyrrolidon, các hợp chất polyamidoamin và polyetylenimin được ghép, các polyme có nhóm amit được tạo thành bởi các amin bậc hai, polyme polyamin- oxit N, rượu polyvinyllic, và các copolyme trên cơ sở axit acrylamidoalkenyl sulfonic. Tuy nhiên, cũng có thể sử dụng hệ enzym chứa peroxidaza và hydro peroxit chất tạo ra hydro peroxit trong nước.

Các chất ức chế sự xám màu là các chất giữ lại bụi bẩn đã được tách ra khỏi các sợi của sản phẩm dệt và lơ lửng trong môi trường giặt. Các chất keo tan trong nước, thường là chất hữu cơ trong tự nhiên, là thích hợp cho mục đích này, ví dụ, tinh bột, hồ, gelatin, muối của các axit etecarboxylic hoặc etesulfonic của tinh bột hoặc của xenluloza, hoặc muối của axit sulfuric, este của xenluloza hoặc tinh bột. Các hợp chất polyamit tan trong nước chứa nhóm axit cũng thích hợp cho mục đích này. Các dẫn xuất tinh bột không phải dẫn xuất nêu trên cũng có thể được sử dụng, ví dụ, tinh bột aldehyt. Các ete xenluloza như carboxymetyl xenluloza (muối natri), methyl xenluloza, hydroxyalkyl xenluloza, và các ete hỗn hợp như methylhydroxyetyl xenluloza, methylhydroxypropyl xenluloza, methylcarboxymetyl xenluloza, và các hỗn hợp của chúng có thể được sử dụng, ví dụ, với lượng nằm trong khoảng từ 0,1 đến 5% trọng lượng so với trọng lượng của sản phẩm tiêu dùng.

Các dung môi hữu cơ bao gồm rượu có từ 1 đến 4 nguyên tử cacbon, cụ thể là metanol, etanol, isopropanol, và tert-butanol, các diol có từ 2 đến 4 nguyên tử cacbon, cụ thể là etylen glycol và propylen glycol, cũng như hỗn hợp của chúng, và các ete có thể thu được từ nhóm hợp chất nêu trên. Các dung môi trộn lẫn được với nước của loại này có mặt trong sản phẩm giặt theo sáng chế với lượng thường là không quá 30% trọng lượng.

Các chất điều chỉnh độ pH bao gồm axit xitric, axit axetic, axit tartric, axit malic, axit lactic, axit glycolic, axit succinic, axit glutaric, và/hoặc axit adipic, và còn bao gồm cả các axit vô cơ, cụ thể là axit sulfuric, hoặc các bazơ, cụ thể là amoni hydroxit hoặc các hydroxit kiềm. Tốt hơn, là các chất điều chỉnh độ pH thuộc loại này được chứa trong các sản phẩm theo sáng chế với lượng không quá 20% trọng lượng, cụ thể là nằm trong khoảng từ 1,2 đến 17% trọng lượng.

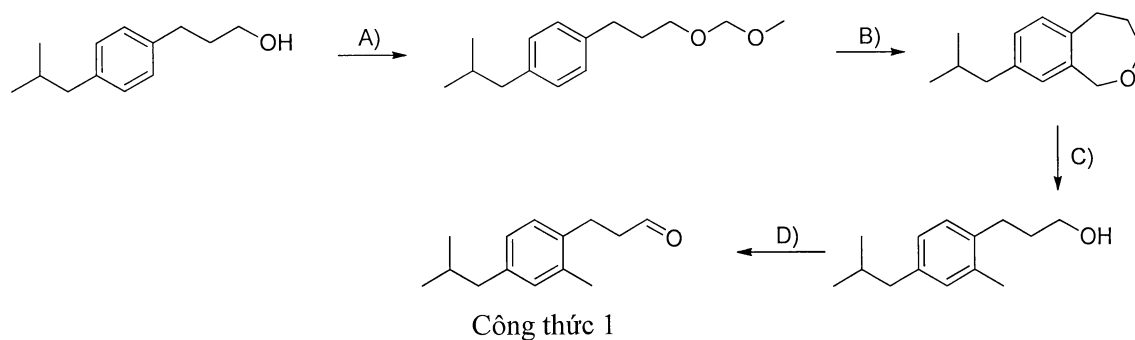
Cụ thể, các hợp chất theo sáng chế có thể được sử dụng cho các sản phẩm thơm trong gia đình chứa enzym như các sản phẩm đã xác định trên đây, và cụ thể là các sản phẩm xử lý sản phẩm dệt như sản phẩm giặt, chứa enzym.

Sáng chế sẽ được minh họa thêm qua các ví dụ sau.

Ví dụ thực hiện sáng chế

Ví dụ 1

Điều chế hợp chất 3-(4-isobutyl-2-metylphenyl) propanal



A) Hợp chất 1-isobutyl-4-(3-(methoxymethoxy)propyl)benzen:

Cho lithi bromua (14,5g) và axit p-toluen sulfonic (10,0g) vào dung dịch chứa hợp chất 3-(4-isobutylphenyl)propan-1-ol (641,0g, 3,33mol) trong 1,5 lít dimetoxymetan. Khuấy hỗn hợp này trong 20 giờ ở nhiệt độ trong phòng và sau đó rót hỗn hợp này kèm theo khuấy vào dung dịch natri hydroxit trong nước (200ml, 2M). Pha hữu cơ được rửa trung tính bằng dung dịch NaCl loãng, làm khô (bằng MgSO_4) và làm bay hơi trong chân không để thu được hợp chất 1-isobutyl-4-(3-(methoxymethoxy)propyl)benzen (721,0g, 91,5%) dưới dạng dầu không màu. $^1\text{H-NMR}$ (400 MHz, CDCl_3): δ = 7,17-7,08 (m, 4H), 4,68 (s, 2H), 3,59 (t, J = 6,4 Hz, 2H), 3,42 (s, 3H), 2,74 (t, J = 7,8 Hz, 2H), 2,49 (d, J = 7,1 Hz, 2H), 2,0-1,84 (m, 3H), 0,95 (d, J = 6,6 Hz, 6H) ppm. $^{13}\text{C-NMR}$ (400 MHz, CDCl_3): δ = 139,5 (s), 139,4 (s), 129,5 (d, 2C), 128,5 (d, 2C), 96,9 (t), 67,6 (t), 55,6 (q), 45,5 (t), 32,5 (t), 31,9 (t), 30,7 (d), 22,8 (q, 2C) ppm. GC/MS (EI): 236 (M^+), 204 (29), 161 (65), 147 (59), 131 (100), 117 (49), 105 (37), 104 (26), 91 (46), 57 (29), 45 (64).

B) Hợp chất 8-isobutyl-1,3,4,5-tetrahydrobenzo[c]oxepin

Cho thêm nhỏ giọt dung dịch chứa hợp chất 1-isobutyl-4-(3-(methoxymethoxy)propyl)benzen (13,9g, 55,36mmol) trong diclometan (40 ml) vào dung dịch lạnh (ở nhiệt độ 0°C) chứa AlCl_3 (10,33g) trong diclometan (80 ml). Sau khi cho thêm xong, khuấy hỗn hợp này trong 1,5 giờ ở nhiệt độ 5°C và rót vào dung dịch natri hydroxit trong nước (80ml, 2M). Chiết hỗn hợp này bằng MTBE và rửa lớp hữu cơ bằng nước và nước muối, làm khô (bằng MgSO_4) và làm bay hơi trong chân không để tạo ra dầu hơi vàng trong suốt (11,91g), tiếp đó trước tiên chưng cất dầu này trong thiết bị Kugelrohr (125°C , 0,12 mba) và sau đó chưng cất bằng phương pháp sắc ký để thu được hợp chất 8-isobutyl-1,3,4,5-

tetrahydrobenzo[c]oxepin (6,95, 61%) dưới dạng dầu không màu, có mùi thơm: ^1H -NMR (400 MHz, CDCl_3): δ = 7,11 (d, J = 7,33 Hz, 1H), 7,01-6,97 (m, 2H), 4,66 (s, 2H), 4,09-4,06 (m, 2H), 3,02-2,98 (m, 2H), 2,46 (d, J = 7,33 Hz, 2H), 1,93-1,82 (m, 1H), 0,94 (d, J = 6,8 Hz, 6H) ppm. ^{13}C -NMR (400 MHz, CDCl_3): δ = 140,3 (s), 140,05 (s), 139,9 (s), 129,8 (d), 129,3 (d), 128,8 (d), 76,1 (t), 75,6 (t), 45,3 (t), 35,5 (t), 30,9 (t), 30,6 (d), 22,8 (q, 2C) ppm. GC/MS (EI): 204 (M^+ , 33), 161 (100), 147 (44), 143 (58), 131 (31), 129 (28), 119 (61), 115 (34), 105 (43), 91 (34).

C) Hợp chất 3-(4-isobutyl-2-metylphenyl)propan-1-ol

Cho lượng chất xúc tác là phức chất ete botriflorua (0,3g) vào huyền phù chứa Pd/C (10%, 0,5g) và 8-isobutyl-1,3,4,5-tetrahydrobenzo[c]oxepin (50,0g, 244,5mmol). Hydro hóa hỗn hợp này trong nồi hấp trong 2 giờ ở áp suất 9 ba và nhiệt độ 50°C trong 2 giờ. Lọc huyền phù này và chưng cất qua màng mỏng (160°C, 0,11 mba) để thu được hợp chất 3-(4-isobutyl-2-metylphenyl)propan-1-ol (45,39g, 89,9%) dưới dạng dầu sệt không màu, có mùi thơm: ^1H -NMR (400 MHz, CDCl_3): δ = 7,10 (d, J = 7,6 Hz, 1H), 6,99-6,94 (m, 2H), 3,75 (t, J = 6,6 Hz, 2H), 2,74-2,68 (m, 2H), 2,47 (d, J = 7,3 Hz, 2H), 2,34 (s, 3H), 2,19 (s, 1H, -OH), 1,95-1,84 (m, 1H), 0,96 (d, J = 6,6 Hz, 6H) ppm. ^{13}C -NMR (400 MHz, CDCl_3): δ = 139,7 (s), 137,6 (s), 135,9 (s), 131,5 (d), 128,9 (d), 127,1 (d), 63,0 (t), 45,4 (t), 33,5 (t), 30,6 (d), 29,5 (t), 22,9 (q), 19,7 (q) ppm. GC/MS (EI): 206 (M^+ , 25), 163 (100), 161 (27), 145 (84), 119 (53), 117 (33), 115 (32), 105 (41), 91 (40), 41 (23).

D) Hợp chất 3-(4-Isobutyl-2-metylphenyl)propanal

Cho thêm nhỏ giọt hợp chất pyridini clocromat (PCC, 37,6g, 174,49mmol) vào dung dịch chứa 3-(4-isobutyl-2-metylphenyl)propan-1-ol (30,0g, 145,41mmol) trong diclo metan (300ml); tăng nhiệt độ đến 35°C. Khuấy hỗn hợp này trong 1 giờ và cho thêm tiếp một lượng PCC (10g, 46,4mmol) và tiếp tục khuấy trong 15 phút nữa. Lọc hỗn hợp phản ứng trên Florisil và silicagel. Làm bay hơi phần nước lọc trong chân không (23,2g) và chưng cất trong thiết bị Kugelrohr (143°C, 0,08 mba) để thu được hợp chất 3-(4-isobutyl-2-metylphenyl)propanal (19,01g, 64%) dưới dạng dầu không màu, có mùi thơm của hoa, mang nhóm aldehyt, màu xanh lục, giống cao su, Lilial, chứa nước. ^1H -NMR (400 MHz, CDCl_3): δ = 9,88 (t, J = 1,5

Hz, 1H), 7,07 (d, J = 7,6 Hz, 1H), 7,0-6,95 (m, 2H), 2,98-2,93 (m, 2H), 2,79-2,74 (m, 2H), 2,46 (d, J = 7,1 Hz, 2H), 2,33 (s, 3H), 1,95-1,82 (m, 1H), 0,95 (d, J = 6,6 Hz, 6H) ppm. ^{13}C -NMR (400 MHz, CDCl_3): δ = 202,2 (d), 140,2 (s), 136 (s), 135,9 (s), 131,6 (d), 128,6 (d), 127,3 (d), 45,4 (t), 44,6 (t), 30,6 (d), 25,5 (t), 22,9 (q), 19,7 (q) ppm. GC/MS (EI): 204 (M^+ , 23), 161 (100), 147 (26), 143 (49), 119 (84), 118 (34), 117 (33), 115 (33), 105 (59), 91 (36).

Ví dụ 2

Trong chế phẩm thơm có mùi hoa này, hợp chất 3-(4-isobutyl-2-methylphenyl)propanal làm gia tăng đặc tính mùi thơm và làm cho chế phẩm này thơm hơn với mùi thơm dễ chịu của hoa, đậm mùi thơm nhẹ của gỗ trong khi vẫn duy trì mùi trái cây.

Rượu etyl phenyl	60-12-8	20,00
Aldehyt undexylenique có 11 nguyên tử cacbon với lượng 10% trong BB		9,00
Ambermax 10%/Tec		3,00
Benzyl benzoat	120-51-4	93,00
Bergamote ess italie orpur	8007-75-8	75,00
Cashmeran	33704-61-9	9,00
Chene extrait CO_2 /Etanol		8,00
Citron ess italie sfumatrice orpur	8008-56-8	45,00
Dihydro isojasmonat metyl	37172-53-5	100,00
Galbanum ess concentree 10% trong DPG		25,00
Geraniol 980	106-24-1	15,00
Givescon	57934-97-1	100,00
Grapefruit ess cosmos	8016-20-4	30,00
Jasmin abs communelle	8022-96-6	10,00
Javanol	198404-98-7	2,00
Kohinool	862107-86-6	20,00
Nonadienol-2,6 10%/Tec với lượng 1% trong BB		15,00
Oenantat alyl với lượng 10% trong BB		8,00
Patchouli ess fraction indonesie orpur	8014-09-3	20,00
Pêche tinh khiết	104-67-6	3,00

Pepperwood	67643-70-3	55,00
Sylkolit	676532-44-8	70,00
Vertofix coeur	32388-55-9	120,00
3-(4-isobutyl-2-methylphenyl) propanal		45,00
		900,00

Ví dụ 3

Nghiên cứu quá trình chuyển hóa In vitro. So sánh hợp chất có công thức (I) và Lilial™.

Các tế bào gan đã được bảo quản lạnh của chuột đực (Sprague Dawley; Lifetechnologies) được rã đông, rửa trong môi trường phục hồi tế bào gan đã được bảo quản lạnh (Cyropreserved Hepatocytes Recovery Medium: CHRM; Lifetechnologies) và được tạo hỗn dịch trong môi trường Williams E (WEM; Lifetechnologies). Cho thêm Lilial™ hoặc hợp chất có công thức (I) (nồng độ cuối: 100µM) vào các tế bào này (1×10^6 tế bào sống/ml) và ủ các hỗn dịch này trong tối đa 4 giờ ở nhiệt độ 37°C trên thiết bị rung hai lần. Theo dõi quá trình chuyển hóa của testosterone làm đối chứng dương. Sự giảm nồng độ hợp chất thử nghiệm và tạo ra dẫn xuất axit benzoic tương ứng được xác định bằng phương pháp phân tích sắc ký-khối phổ (GC-MS) đối với lượng methyl-este được tạo ra sau khi dẫn xuất hóa bằng trimethylsilyl-diazometan (Sigma-Aldrich) trong metanol. Hợp chất thử nghiệm phản ứng với diazometan để tạo ra methyl-keton, hợp chất này được sử dụng để định lượng Lilial™ và hợp chất có công thức (I). Quá trình chuyển hóa được làm ngừng lại bằng HCl 1M được làm lạnh bằng nước đá, các mẫu được chiết bằng tert-butyl methyl ete (MTBE) và được phân tích bằng phương pháp GC-MS. Quá trình ủ testosterone làm đối chứng cũng được làm ngừng bằng HCl 1M được làm lạnh bằng nước đá, ly tâm để tách các tế bào, lọc và sự giảm nồng độ testosterone được phân tích bằng phương pháp LC-MS. Để định lượng sự giảm nồng độ của chất thử nghiệm và sự tạo ra chất chuyển hóa là axit benzoic, các đường cong hiệu chỉnh của chất đối chứng (Lilial™ và hợp chất có công thức (I), axit tert-butyl benzoic (Fluka) được tạo ra trong môi trường ủ tế bào gan và được phân tích giống như các mẫu tế bào gan.

Quan sát thấy sự giảm nhanh nồng độ testosterone làm đối chứng dương cho thấy rằng các tế bào gan có tác dụng chuyển hóa. Hợp chất có công thức (I) và

LilialTM được chuyển hóa nhanh chóng ở các tế bào gan chuột và không xác định được lượng hợp chất còn dư sau 4 giờ. Trong khi phát hiện được axit tert-butyl benzoic dưới dạng chất chuyển hóa của LilialTM (3,4-3,9 μ M) mà không có sự tạo ra dẫn xuất axit benzoic từ hợp chất có công thức I (bảng 1). Giới hạn phát hiện là <1 μ M.

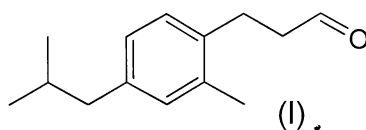
Bảng 1- nồng độ LilialTM và hợp chất có công thức (I) và chất chuyển hóa là axit benzoic tương ứng trong các tế bào gan chuột trong khi ủ trong 4 giờ. Nồng độ chất thử nghiệm ban đầu khi ủ ở thời điểm 0 giờ là 100 μ M.

Hợp chất được thử nghiệm	Hợp chất thử nghiệm còn dư	Dẫn xuất axit benzoic
Hợp chất có công thức (I)	0 μ M	không phát hiện được
Lilial TM	0 μ M	3,4-3,9 μ M

Do đó, sự thế methyl ở vòng benzen của hợp chất có công thức (I) ngăn ngừa sự tạo ra dẫn xuất axit benzoic tương ứng in vitro. Do các dẫn xuất axit benzoic như axit tert-butyl benzoic từ sản phẩm LilialTM gây độc tính đối với cơ quan sinh sản của chuột đực, các tác dụng gây độc ở chuột đực này được ngăn ngừa bằng nhóm thế ở vị trí ortho của hợp chất có công thức (I).

YÊU CẦU BẢO HỘ

1. Hợp chất có công thức (I):



2. Chế phẩm thơm chứa hợp chất có công thức (I).

3. Chế phẩm thơm theo điểm 2, khác biệt ở chỗ, chế phẩm này không chứa chất thơm là alkanal được thế aryl, cụ thể hơn là hợp chất propanal được thế aryl, các hợp chất này không được thế trên vòng aryl ở vị trí ortho so với nhóm thế mang nhóm chức aldehyt, cụ thể là LilialTM.

4. Chế phẩm thơm theo điểm 2 hoặc điểm 3, trong đó chế phẩm này chứa một hoặc nhiều thành phần thơm khác.

5. Chế phẩm thơm theo điểm bất kỳ trong số các điểm từ 2 đến 4, trong đó chế phẩm này có mùi thơm đặc trưng của hoa linh lan.

6. Sản phẩm chăm sóc cơ thể hoặc chăm sóc gia đình chứa hợp chất có công thức (I) theo điểm 1, hoặc chế phẩm thơm như được xác định theo điểm bất kỳ trong số các điểm từ 2 đến 5.

7. Phương pháp tạo mùi thơm đặc trưng của hoa linh lan cho chế phẩm thơm bao gồm bước bổ sung hợp chất theo điểm 1 vào chế phẩm này.