

明 細 書

発明の名称：香料組成物

技術分野

[0001] 香料組成物に関する。

背景技術

[0002] フェニル基を有するニトリル化合物としては、グレープフルーツ、ゲラニウム、ローズフローラル様香気を有するペオニル（2-シクロヘキシリデン-2-フェニルアセトニトリル）や、シナモン、カシア様の香気を有するシンナミルニトリルなどが香料成分として知られている（非特許文献1）。

香料として用いられているアルデヒド類に対応するいくつかのニトリル類は、類似する香調を有することが知られている。

非特許文献2には、香料として用いられているアルデヒド類から、対応するニトリル類へと誘導する方法および、誘導されたニトリル類は香料成分として有用であることが記載されている。

先行技術文献

非特許文献

[0003] 非特許文献1：合成香料編集委員会 編集、「増補新版 合成香料 化学と商品知識」、2016年、725～726ページ、化学工業日報社
非特許文献2：Flavor Fragrance Journal, 2020年, vol. 35, pp. 425～435

発明の概要

発明が解決しようとする課題

[0004] 前記のようにニトリル化合物のなかには、香料として用いられるものがあるが、フレグランス製品、化粧品、洗剤、衛生用製品、雑貨、医薬品、食品等の製品の価値を高めるため、新たな香りが必要とされている。通常、香料は複数の香料を混合した調合香料として用いられ、特に他の香料と混合したときに優れた効果を発揮する香料成分が求められている。

そこで、本発明の課題は、新規な香りと性質を有する香料組成物、及び香料組成物に新規な香りと性質を付与することができる化合物の使用、及び賦香方法を提供することである。

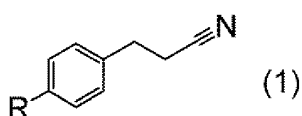
課題を解決するための手段

[0005] 本発明者らは、香料組成物が特定のニトリル化合物を有効成分として含有することで、新規な香りと性質を有すること、当該ニトリル化合物が香料として使用できること、及び当該ニトリル化合物によって香料として有用な香りを賦香できることを見出し、本発明を完成するに至った。

[0006] すなわち、本発明は、以下のとおりである。

[1] 下記一般式(1)で表される3-(4-アルキルフェニル)プロパンニトリルを有効成分として含有する香料組成物。

[化1]



(式(1)中、Rは炭素数2～4のアルキル基を示す。)

[2] 更に、式(1)で表される3-(4-アルキルフェニル)プロパンニトリル以外の香料物質を含有する、前記[1]に記載の香料組成物。

[3] 式(1)で表される3-(4-アルキルフェニル)プロパンニトリル以外の香料物質が、炭化水素類、アルコール類、エステル類、フェノール類、アルデヒド類、ケトン類、アセタール類、ケタール類、エーテル類、天然精油、天然抽出物、及び式(1)で表される3-(4-アルキルフェニル)プロパンニトリル以外のニトリル類からなる群より選ばれる少なくとも1つである、前記[2]に記載の香料組成物。

[4] Rがエチル基、イソプロピル基、ノルマルブチル基、イソブチル基及びターシャリーブチル基からなる群より選ばれる少なくとも1つである、前記[1]～[3]のいずれか1つに記載の香料組成物。

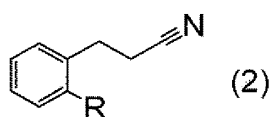
[5] Rがイソプロピル基、ノルマルブチル基及びイソブチル基からなる群より選ばれる少なくとも1つである、前記[1]～[4]のいずれか1つに

記載の香料組成物。

〔6〕 Rがノルマルブチル基である、前記〔1〕～〔5〕のいずれか1つに記載の香料組成物。

〔7〕 下記一般式（2）で表される3-（2-アルキルフェニル）プロパニトリルを、式（1）で表される3-（4-アルキルフェニル）プロパニトリルに対して0.03～0.8質量%含有する、前記〔1〕～〔6〕のいずれか1つに記載の香料組成物。

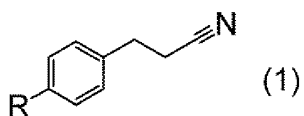
〔化2〕



（式（2）中、Rは炭素数2～4のアルキル基を示す。）

〔8〕 下記一般式（1）で表される3-（4-アルキルフェニル）プロパニトリルの香料としての使用。

〔化3〕



（式（1）中、Rは炭素数2～4のアルキル基を示す。）

〔9〕 Rがエチル基、イソプロピル基、ノルマルブチル基、イソブチル基及びターシャリーブチル基からなる群より選ばれる少なくとも1つである、前記〔8〕に記載の使用。

〔10〕 前記式（1）で表される3-（4-アルキルフェニル）プロパニトリルがフローラル香と、グリーン香又はフルーティ香を付与する、前記〔8〕又は〔9〕に記載の使用。

〔11〕 Rがイソプロピル基及びイソブチル基からなる群より選ばれる少なくとも1つである、前記〔8〕～〔10〕のいずれか1つに記載の使用。

〔12〕 前記式（1）で表される3-（4-アルキルフェニル）プロパニトリルがフローラル香、グリーン香及びフルーティ香を付与する、前記〔1

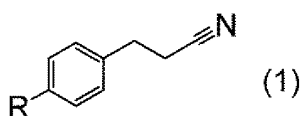
1] に記載の使用。

[13] Rがノルマルブチル基である、前記[8]～[10]のいずれか1つに記載の使用。

[14] 前記式(1)で表される3-(4-アルキルフェニル)プロパニトリルがフローラル香、フルーティ香及びスパイシー香を付与する、前記[13]に記載の使用。

[15] 下記一般式(1)で表される3-(4-アルキルフェニル)プロパニトリルによってフローラル香と、グリーン香又はフルーティ香を付与する、賦香方法。

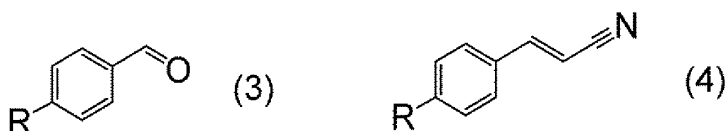
[化4]



(式(1)中、Rは炭素数2～4のアルキル基を示す。)

[16] 下記式(3)で表される4-アルキルベンズアルデヒドを原料として、アセトニトリルとの縮合反応による下記式(4)で表されるシンナモニトリルへと誘導する工程、及び水素添加工程をこの順で有する、3-(4-アルキルフェニル)プロパニトリルの製造方法。

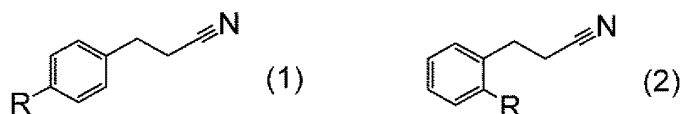
[化5]



(式(3)及び式(4)中、Rは炭素数2～4のアルキル基を示す。)

[17] 下記一般式(1)で表される3-(4-アルキルフェニル)プロパニトリルと下記一般式(2)で表される3-(2-アルキルフェニル)プロパニトリルを含有し、下記一般式(2)で表される3-(2-アルキルフェニル)プロパニトリルを、式(1)で表される3-(4-アルキルフェニル)プロパニトリルに対して0.03～0.8質量%含有するニトリル組成物。

[化6]



(式(1)中、Rは炭素数2～4のアルキル基を示す。式(2)中、Rは炭素数2～4のアルキル基を示す。)

発明の効果

[0007] 本発明によれば、フローラル香と、グリーン香又はフルーティ香を付与することができる3-(4-アルキルフェニル)プロパンニトリルを有効成分として含有することで、強いフローラルな香りを有する香料組成物を提供することができる。更にフローラル香と、グリーン香又はフルーティ香を有する3-(4-アルキルフェニル)プロパンニトリルの香料としての使用、賦香方法、及び3-(4-アルキルフェニル)プロパンニトリルの製造方法を提供することができる。

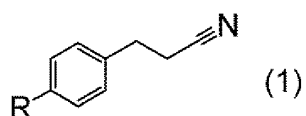
発明を実施するための形態

[0008] 以下、本明細書において、「XX～YY」の記載は、「XX以上YY以下」を意味する。

[0009] [香料組成物]

本発明の香料組成物は、下記一般式(1)で表される3-(4-アルキルフェニル)プロパンニトリルを有効成分として含有する香料組成物である。

[化7]



(式(1)中、Rは炭素数2～4のアルキル基を示す。)

[0010] 本発明の香料組成物は、フローラル香と、グリーン香又はフルーティ香を有する3-(4-アルキルフェニル)プロパンニトリルを有効成分として含有するため、強いフローラルな香りを有し、香りの強さに優れる。そのため、各種製品の香気成分として有用である。

[0011] <3-(4-アルキルフェニル)プロパンニトリル>

式(1)中、Rは炭素数2～4のアルキル基を示す。具体的には、Rは、好ましくはエチル基、イソプロピル基、ノルマルブチル基、イソブチル基及びターシャリーブチル基からなる群より選ばれる少なくとも1つであり、より好ましくはイソプロピル基、ノルマルブチル基及びイソブチル基からなる群より選ばれる少なくとも1つであり、更に好ましくはノルマルブチル基である。

Rがエチル基、イソプロピル基、ノルマルブチル基、イソブチル基及びターシャリーブチル基からなる群より選ばれる少なくとも1つであると、フローラル香に加え、グリーン香又はフルーティ香を有し、強いフローラル香を付与することができるため、香料組成物の有効成分として非常に有用である。

Rがイソプロピル基及びイソブチル基からなる群より選ばれる少なくとも1つであると、フローラル香に加え、グリーン香及びフルーティ香を有し、強いフローラル香を付与することができるため、香料組成物の有効成分として非常に有用である。

Rがノルマルブチル基であると、フローラル香に加え、フルーティ香及びスパイシー香を有し、強いフローラル香を付与することができるため、香料組成物の有効成分として非常に有用である。また、Rがノルマルブチル基であると、更に香料組成物の香りの強さと拡散性を著しく向上させることができる。

[0012] 上記式(1)で表される3-(4-アルキルフェニル)プロパンニトリルは、香料組成物の有効成分として有用であり、フローラル香と、グリーン香又はフルーティ香を有し、強いフローラル香を付与することができ、更に香りの強さと拡散性を付与することができる。

Rがエチル基であるとき、特にフローラル香に加え、グリーン香を有し、強いフローラル香を付与する。

Rがイソプロピル基であるとき、特にフローラル香に加え、グリーン香及

びフルーティ香を有し、強いフローラル香を付与する。

Rがノルマルブチル基であるとき、特にフローラル香に加え、フルーティ香及びスパイシー香を有し、強いフローラル香を付与する。更に香料組成物の香りの強さと拡散性を著しく向上させることができる。

Rがイソブチル基であるとき、特にフローラル香に加え、グリーン香及びフルーティ香を有し、強いフローラル香を付与する。

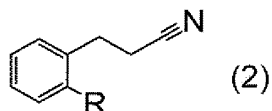
Rがターシャリーブチル基であるとき、特にフローラル香に加え、グリーン香を有し、強いフローラル香を付与する。

[0013] 本発明の香料組成物は、下記一般式(2)で表される3-(2-アルキルフェニル)プロパンニトリルを含むことが好ましい。

本発明の香料組成物は、式(2)で表される3-(2-アルキルフェニル)プロパンニトリルを、式(1)で表される3-(4-アルキルフェニル)プロパンニトリルに対して0.03~0.8質量%含有することがより好ましい。

式(2)で表される3-(2-アルキルフェニル)プロパンニトリルが、少量含まれることで、より複雑で良好な香調になると考えられる。

[化8]



(式(2)中、Rは炭素数2~4のアルキル基を示す。)

[0014] 式(2)におけるRは、炭素数2~4のアルキル基であり、香料組成物に含有される式(1)で表される3-(4-アルキルフェニル)プロパンニトリルと同じであることが好ましい。すなわち、香料組成物中に3-(4-ノルマルブチルフェニル)プロパンニトリルが有効成分として含有される場合、3-(2-ノルマルブチルフェニル)プロパンニトリルが含まれることが好ましい。

[0015] 本発明の香料組成物における前記3-(4-アルキルフェニル)プロパンニトリルの含有量は、香料組成物の種類、目的とする香気の種類及び香気の

強さ等により適宜調整すればよく、好ましくは0.01～90質量%であり、より好ましくは0.1～50質量%であり、更に好ましくは0.5～30質量%であり、より更に好ましくは1.0～20質量%であり、より更に好ましくは1.5～10質量%である。

[0016] <他の成分及び使用できる製品>

前記3-(4-アルキルフェニル)プロパンニトリルを含有する香料組成物に含有される、前記3-(4-アルキルフェニル)プロパンニトリル以外のその他の成分としては、式(1)で表される3-(4-アルキルフェニル)プロパンニトリル以外の香料物質、界面活性剤、溶媒、酸化防止剤及び着色剤等が挙げられ、式(1)で表される3-(4-アルキルフェニル)プロパンニトリル以外の香料物質、界面活性剤、溶媒、酸化防止剤及び着色剤からなる群から選ばれる少なくとも1つが好ましく、式(1)で表される3-(4-アルキルフェニル)プロパンニトリル以外の香料物質、及び溶媒からなる群から選ばれる少なくとも1つがより好ましく、式(1)で表される3-(4-アルキルフェニル)プロパンニトリル以外の香料物質が更に好ましい。すなわち、本発明の好ましい香料組成物は、式(1)で表される3-(4-アルキルフェニル)プロパンニトリルを有効成分として含有し、式(1)で表される3-(4-アルキルフェニル)プロパンニトリル以外の香料物質を含有する。

式(1)で表される3-(4-アルキルフェニル)プロパンニトリル以外の香料物質を含有することで、目的の製品に合わせて香りを調整することができる。また、溶媒を含有することで、目的の製品に溶解、含浸させることが容易となり、香りの強さや香りの持続性を調整することができる。

[0017] 式(1)で表される3-(4-アルキルフェニル)プロパンニトリル以外の香料物質は、従来公知な香料成分であれば特に制限はなく、広い範囲の香料が使用でき、例えば下記のようなものから単独で又は2種以上を任意の混合比率で選択し、使用することができる。

[0018] 式(1)で表される3-(4-アルキルフェニル)プロパンニトリル以外

の香料物質としては、炭化水素類、アルコール類、エステル類、フェノール類、アルデヒド類、ケトン類、アセタール類、ケタール類、エーテル類、天然精油、天然抽出物、及び式（１）で表される３－（４－アルキルフェニル）プロパンニトリル以外のニトリル類からなる群より選ばれる少なくとも１つであることが好ましい。

これらのなかでも、前記香料物質としては、より好ましくは、炭化水素類、アルコール類、エステル類、フェノール類、アルデヒド類、ケトン類、アセタール類、ケタール類、エーテル類からなる群より選ばれる少なくとも１つであり、更に好ましくはアルコール類、エステル類、フェノール類、アルデヒド類からなる群より選ばれる少なくとも１つであり、より更に好ましくはエステル類、アルデヒド類からなる群より選ばれる少なくとも１つであり、より更に好ましくはエステル類である。前記３－（４－アルキルフェニル）プロパンニトリルと、これらの香料物質を組み合わせることにより、より強いフローラル香を発現できるため、好ましい。

[0019] 炭化水素類としては、リモネン、 α -ピネン、 β -ピネン、テルピネン、セドレン、ロンギフォレン、バレンセン等が挙げられる。

[0020] アルコール類としては、リナロール、シトロネロール、ゲラニオール、ネロール、テルピネオール、ジヒドロミルセノール、エチルリナロール、ファルネソール、ネロリドール、シス-3-ヘキセノール、セドロール、メントール、ボルネオール、 β -フェニルエチルアルコール、ベンジルアルコール、フェニルヘキサノール、2, 2, 6-トリメチルシクロヘキシル-3-ヘキサノール、1-(2-*t*-ブチルシクロヘキシルオキシ)-2-ブタノール、4-イソプロピルシクロヘキサンメタノール、4-*t*-ブチルシクロヘキサノール、4-メチル-2-(2-メチルプロピル)テトラヒドロ-2H-ピラン-4-オール、2-メチル-4-(2, 2, 3-トリメチル-3-シクロペンテン-1-イル)-2-ブテン-1-オール、2-エチル-4-(2, 2, 3-トリメチル-3-シクロペンテン-1-イル)-2-ブテン-1-オール、イソカンフィルシクロヘキサノール、3, 7-ジメチル-7

ーメトキシオクタン-2-オール等が挙げられる。

[0021] フェノール類としては、オイゲノール、チモール、バニリン等が挙げられる。

[0022] エステル類としては、リナリルホルメート、シトロネリルホルメート、ゲラニルホルメート、*n*-ヘキシルアセテート、シス-3-ヘキセニルアセテート、リナリルアセテート、シトロネリルアセテート、ゲラニルアセテート、ネリルアセテート、テルピニルアセテート、ノピルアセテート、ボルニルアセテート、イソボルニルアセテート、*o*-*t*-ブチルシクロヘキシルアセテート、*p*-*t*-ブチルシクロヘキシルアセテート、トリシクロデセニルアセテート、ベンジルアセテート、スチラリルアセテート、シンナミルアセテート、ジメチルベンジルカルビニルアセテート、3-ペンチルトトラヒドロピラン-4-イルアセテート、シトロネリルプロピオネート、トリシクロデセニルプロピオネート、アリルシクロヘキシルプロピオネート、エチル2-シクロヘキシルプロピオネート、ベンジルプロピオネート、シトロネリルブチレート、ジメチルベンジルカルビニル*n*-ブチレート、トリシクロデセニルイソブチレート、メチル2-ノネノエート、メチルベンゾエート、ベンジルベンゾエート、メチルシンナメート、メチルサリシレート、*n*-ヘキシルサリシレート、シス-3-ヘキセニルサリシレート、ゲラニルチグレート、シス-3-ヘキセニルチグレート、メチルジャスモネート、メチルジヒドロジャスモネート、メチル-2, 4-ジヒドロキシ-3, 6-ジメチルベンゾエート、エチルメチルフェニルグリシデート、メチルアントラニレート、フルテート等が挙げられる。これらのなかでも、好ましくは、リナリルアセテート、ベンジルアセテート、シンナミルアセテートからなる群より選ばれる少なくとも1つであり、より好ましくはベンジルアセテートである。

[0023] アルデヒド類としては、*n*-オクタナール、*n*-デカナール、*n*-ドデカナール、2-メチルウンデカナール、10-ウンデセナール、シトロネラール、シトラール、ヒドロキシシトロネラール、ジメチルトトラヒドロベンズアルデヒド、4-(4-ヒドロキシ-4-メチルペンチル)-3-シクロヘ

キセン-1-カルボアルデヒド、2-シクロヘキシルプロパナール、p-ト-ブチル- α -メチルヒドロシンナミックアルデヒド、p-ト-ブチルヒドロシンナミックアルデヒド、p-イソプロピル- α -メチルヒドロシンナミックアルデヒド、p-エチル- α 、 α -ジメチルヒドロシンナミックアルデヒド、 α -アミルシンナミックアルデヒド、 α -ヘキシルシンナミックアルデヒド、ピペロナール、 α -メチル-3,4-メチレンジオキシヒドロシンナミックアルデヒド等が挙げられる。

[0024] ケトン類としては、メチルヘプテノン、4-メチレン-3,5,6,6-テトラメチル-2-ヘプタノン、アミルシクロペンタノン、3-メチル-2-(シス-2-ペンテン-1-イル)-2-シクロペンテン-1-オン、メチルシクロペンテノロン、ローズケトン、 γ -メチルヨノン、 α -ヨノン、カルボン、メントン、ショウ脳、ヌートカトン、ベンジルアセトン、アニシルアセトン、メチル β -ナフチルケトン、2,5-ジメチル-4-ヒドロキシ-3(2H)-フラノン、マルトール、7-アセチル-1,2,3,4,5,6,7,8-オクタヒドロ-1,1,6,7-テトラメチルナフタレン、ムスコン、シベトン、シクロペンタデカノン、シクロヘキサデセノン等が挙げられる。

[0025] アセタール類及びケタール類としては、アセトアルデヒドエチルフェニルプロピルアセタール、シトラールジエチルアセタール、フェニルアセトアルデヒドグリセリンアセタール、エチルアセトアセテートエチレングリコールケタール等が挙げられる。

[0026] エーテル類としては、アネトール、 β -ナフチルメチルエーテル、 β -ナフチルエチルエーテル、リモネンオキシド、ローズオキシド、1,8-シネオール、ラセミ体又は光学活性のドデカヒドロ-3a,6,6,9a-テトラメチルナフト[2,1-b]フラン等が挙げられる。

[0027] ラクトン類としては、 γ -ノナラクトン、 γ -ウンデカラクトン、 σ -デカラクトン、 γ -ジャスモラクトン、クマリン、シクロペンタデカノリド、シクロヘキサデカノリド、アンブレットリド、エチレンブラシレート、11

ーオキサヘキサデカノリド等が挙げられる。

[0028] 天然精油や天然抽出物としては、オレンジ、レモン、ベルガモット、マンダリン、ペパーミント、スペアミント、ラベンダー、カモミル、ローズマリー、ユーカリ、セージ、バジル、ローズ、ゼラニウム、ジャスミン、イランイラン、アニス、クローブ、ジンジャー、ナツメグ、カルダモン、セダー、ヒノキ、サンダルウッド、ベチバー、パチョリ、ラブダナム等が挙げられる。

[0029] 式(1)で表される3-(4-アルキルフェニル)プロパンニトリル以外のニトリル類としては、シトロネリルニトリル等が挙げられる。

[0030] また、溶媒としては、ジプロピレングリコール、ジエチルフタレート、エチレングリコール、プロピレングリコール、メチルミリステート、トリエチルシトレート等が挙げられる。

界面活性剤としては、ポリオキシエチレンラウリル硫酸エーテル等が挙げられる。

[0031] 前記一般式(1)で表される3-(4-アルキルフェニル)プロパンニトリルを含有する香料組成物は、各種製品の香気成分として使用することができる。

香料組成物を使用することができる製品としては、例えば、香水、コロソール等のフレグランス製品；シャンプー、リンス類、ヘアートニック、ヘアークリーム類、ムース、ジェル、ポマード、スプレーその他毛髪用化粧品；化粧水、美容液、クリーム、乳液、パック、ファンデーション、おしろい、口紅、各種メイクアップ類等の肌用化粧品；皿洗い洗剤、洗濯用洗剤、ソフトナー類、消毒用洗剤類、消臭洗剤類、室内芳香剤、ファニチャーケア、ガラスクリーナー、家具クリーナー、床クリーナー、消毒剤、殺虫剤、漂白剤、殺菌剤、忌避剤、その他の各種健康衛生用洗剤類；歯磨、マウスウォッシュ、入浴剤、制汗製品、パーマ液等の医薬部外品；トイレットペーパー、ティッシュペーパー等の雑貨；医薬品等；食品等が挙げられる。

[0032] 上記製品中の香料組成物の配合量は特に限定されず、賦香すべき製品の種

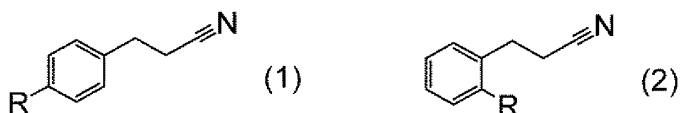
類、性質及び官能的効果などに応じて、香料組成物の配合量を選択することができる。例えば、製品中の香料組成物の配合量は、好ましくは0.00001質量%以上であり、より好ましくは0.0001質量%以上であり、更に好ましくは0.001質量%以上である。また、好ましくは80質量%以下であり、更に好ましくは60質量%以下であり、より更に好ましくは40質量%以下である。

なお、香料組成物をアロマオイル、香水等として用いる場合には、製品中の香料組成物の配合量は、80質量%以上であってもよく、100質量%であってもよい。

[0033] [ニトリル組成物]

本発明のニトリル組成物は、下記一般式(1)で表される3-(4-アルキルフェニル)プロパンニトリルと下記一般式(2)で表される3-(2-アルキルフェニル)プロパンニトリルを含有し、下記一般式(2)で表される3-(2-アルキルフェニル)プロパンニトリルを、式(1)で表される3-(4-アルキルフェニル)プロパンニトリルに対して0.03~0.8質量%含有するニトリル組成物である。

[化9]



(式(1)中、Rは炭素数2~4のアルキル基を示す。式(2)中、Rは炭素数2~4のアルキル基を示す。)

[0034] 本発明のニトリル組成物は、フローラル香と、グリーン香又はフルーティ香を有する3-(4-アルキルフェニル)プロパンニトリルを有効成分として含有し、式(2)で表される3-(2-アルキルフェニル)プロパンニトリルが、少量含まれることで、より複雑で良好な香調になると考えられ、強いフローラルな香りを有し、香りの強さに優れる。そのため、各種製品の香気成分として有用である。また、香料組成物の原料として有用である。

[0035] <3-(4-アルキルフェニル)プロパンニトリル>

式（１）中、Rは炭素数２～４のアルキル基を示す。具体的には、Rは、好ましくはエチル基、イソプロピル基、ノルマルブチル基、イソブチル基及びターシャリーブチル基からなる群より選ばれる少なくとも１つであり、より好ましくはイソプロピル基、ノルマルブチル基及びイソブチル基からなる群より選ばれる少なくとも１つであり、更に好ましくはノルマルブチル基である。

Rがエチル基、イソプロピル基、ノルマルブチル基、イソブチル基及びターシャリーブチル基からなる群より選ばれる少なくとも１つであると、フローラル香に加え、グリーン香又はフルーティ香を有し、強いフローラル香を付与することができるため、香料組成物の有効成分として非常に有用である。

Rがイソプロピル基及びイソブチル基からなる群より選ばれる少なくとも１つであると、フローラル香に加え、グリーン香及びフルーティ香を有し、強いフローラル香を付与することができるため、香料組成物の有効成分として非常に有用である。

Rがノルマルブチル基であると、フローラル香に加え、フルーティ香及びスパイシー香を有し、強いフローラル香を付与することができるため、香料組成物の有効成分として非常に有用である。また、Rがノルマルブチル基であると、更に香料組成物の香りの強さと拡散性を著しく向上させることができる。

[0036] 上記式（１）で表される３－（４－アルキルフェニル）プロパンニトリルは、香料組成物の有効成分として有用であり、フローラル香と、グリーン香又はフルーティ香を有し、強いフローラル香を付与することができ、更に香りの強さと拡散性を付与することができる。

Rがエチル基であるとき、特にフローラル香に加え、グリーン香を有し、強いフローラル香を付与する。

Rがイソプロピル基であるとき、特にフローラル香に加え、グリーン香及びフルーティ香を有し、強いフローラル香を付与する。

Rがノルマルブチル基であるとき、特にフローラル香に加え、フルーティ香及びスパイシー香を有し、強いフローラル香を付与する。更に香料組成物の香りの強さと拡散性を著しく向上させることができる。

Rがイソブチル基であるとき、特にフローラル香に加え、グリーン香及びフルーティ香を有し、強いフローラル香を付与する。

Rがターシャリーブチル基であるとき、特にフローラル香に加え、グリーン香を有し、強いフローラル香を付与する。

[0037] <3-(2-アルキルフェニル)プロパンニトリル>

式(2)中、Rは炭素数2~4のアルキル基を示し、3-(2-アルキルフェニル)プロパンニトリルが本発明のニトリル組成物に含まれる場合、式(2)中のRは、好ましくは、ニトリル組成物に含まれる3-(4-アルキルフェニル)プロパンニトリルと同じであり、式(1)中のRと同じである。

具体的には、Rは、好ましくはエチル基、イソプロピル基、ノルマルブチル基、イソブチル基及びターシャリーブチル基からなる群より選ばれる少なくとも1つであり、より好ましくはイソプロピル基、ノルマルブチル基及びイソブチル基からなる群より選ばれる少なくとも1つであり、更に好ましくはノルマルブチル基である。

Rがエチル基、イソプロピル基、ノルマルブチル基、イソブチル基及びターシャリーブチル基からなる群より選ばれる少なくとも1つであると、フローラル香に加え、グリーン香又はフルーティ香を有し、強いフローラル香を付与することができるため、香料組成物の有効成分として非常に有用である。

Rがイソプロピル基及びイソブチル基からなる群より選ばれる少なくとも1つであると、フローラル香に加え、グリーン香及びフルーティ香を有し、強いフローラル香を付与することができるため、香料組成物の有効成分として非常に有用である。

Rがノルマルブチル基であると、フローラル香に加え、フルーティ香及び

スパイシー香を有し、強いフローラル香を付与することができるため、香料組成物の有効成分として非常に有用である。また、Rがノルマルブチル基であると、更に香料組成物の香りの強さと拡散性を著しく向上させることができる。

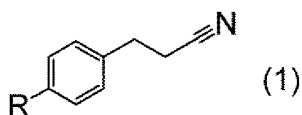
[0038] 本発明のニトリル化合物は、式(2)で表される3-(2-アルキルフェニル)プロパンニトリルを、式(1)で表される3-(4-アルキルフェニル)プロパンニトリルに対して、好ましくは0.03~0.8質量%含有し、より好ましくは0.04~0.7質量%含有し、更に好ましくは0.2~0.7質量%含有する。

[0039] 本発明のニトリル組成物が香料組成物に含まれる場合、香料組成物における前記ニトリル組成物の含有量は、香料組成物の種類、目的とする香気の種類及び香気の強さ等により適宜調整すればよく、好ましくは0.01~90質量%であり、より好ましくは0.1~50質量%であり、更に好ましくは0.5~30質量%であり、より更に好ましくは1.0~20質量%であり、より更に好ましくは1.5~10質量%である。

[0040] [香料としての使用]

下記一般式(1)で表される3-(4-アルキルフェニル)プロパンニトリルは、フローラル香と、グリーン香又はフルーティ香を有することから、香料として使用することができる。下記一般式(1)で表される3-(4-アルキルフェニル)プロパンニトリルの香料としての使用も本発明に含まれる。

[化10]



(式(1)中、Rは炭素数2~4のアルキル基を示す。)

[0041] 式(1)中、Rは炭素数2~4のアルキル基を示す。具体的には、Rは、好ましくはエチル基、イソプロピル基、ノルマルブチル基、イソブチル基及びターシャリーブチル基からなる群より選ばれる少なくとも1つであり、よ

り好ましくはイソプロピル基、ノルマルブチル基及びイソブチル基からなる群より選ばれる少なくとも1つであり、更に好ましくはノルマルブチル基である。

Rがエチル基、イソプロピル基、ノルマルブチル基、イソブチル基及びターシャリーブチル基からなる群より選ばれる少なくとも1つであると、フローラル香に加え、グリーン香又はフルーティ香を有するため、香料としてより好適に使用することができる。

Rがイソプロピル基及びイソブチル基からなる群より選ばれる少なくとも1つであると、フローラル香に加え、グリーン香及びフルーティ香を有するため、香料として更に好適に使用することができる。

Rがノルマルブチル基であると、フローラル香に加え、フルーティ香及びスパイシー香を有するため、香料としてより更に好適に使用することができる。

[0042] Rがエチル基であるとき、特にフローラル香に加え、グリーン香を有する。

Rがイソプロピル基であるとき、特にフローラル香に加え、グリーン香及びフルーティ香を有する。

Rがノルマルブチル基であるとき、特にフローラル香に加え、フルーティ香及びスパイシー香を有する。

Rがイソブチル基であるとき、特にフローラル香に加え、グリーン香及びフルーティ香を有する。

Rがターシャリーブチル基であるとき、特にフローラル香に加え、グリーン香を有する。

[0043] 上記式(1)で表される3-(4-アルキルフェニル)プロパンニトリルは、フローラル香と、グリーン香又はフルーティ香を有する。したがって、式(1)で表される3-(4-アルキルフェニル)プロパンニトリルの使用は、製品にフローラル香と、グリーン香又はフルーティ香を付与する。また、製品に含まれる香りの強さと拡散性を向上させることができる。

Rがエチル基であるとき、特にフローラル香に加え、グリーン香を付与する。

Rがイソプロピル基であるとき、特にフローラル香に加え、グリーン香及びフルーティ香を付与する。

Rがノルマルブチル基であるとき、特にフローラル香に加え、フルーティ香及びスパイシー香を付与する。更に製品に含まれる香りの強さと拡散性を著しく向上させることができる。

Rがイソブチル基であるとき、特にフローラル香に加え、グリーン香及びフルーティ香を付与する。

Rがターシャリーブチル基であるとき、特にフローラル香に加え、グリーン香を付与する。

[0044] 式(1)で表される3-(4-アルキルフェニル)プロパンニトリルは、各種製品の香気成分として使用することができる。なお、式(1)で表される3-(4-アルキルフェニル)プロパンニトリルを各種製品の香気成分として使用する場合、前記香料組成物の一成分として、使用してもよい。

式(1)で表される3-(4-アルキルフェニル)プロパンニトリルを使用することができる製品としては、例えば、香水、コロソール等のフレグランス製品；シャンプー、リンス類、ヘアートニック、ヘアークリーム類、ムース、ジェル、ポマード、スプレーその他毛髪用化粧品；化粧水、美容液、クリーム、乳液、パック、ファンデーション、おしろい、口紅、各種メイクアップ類等の肌用化粧品；皿洗い洗剤、洗濯用洗剤、ソフトナー類、消毒用洗剤類、消臭洗剤類、室内芳香剤、ファニチャーケア、ガラスクリーナー、家具クリーナー、床クリーナー、消毒剤、殺虫剤、漂白剤、殺菌剤、忌避剤、その他の各種健康衛生用洗剤類；歯磨、マウスウォッシュ、入浴剤、制汗製品、パーマ液等の医薬部外品；トイレットペーパー、ティッシュペーパー等の雑貨；医薬品等；食品等が挙げられる。

[0045] 上記製品中の式(1)で表される3-(4-アルキルフェニル)プロパンニトリルの配合量は特に限定されず、賦香すべき製品の種類、性質及び官能

的効果などに応じて、式（１）で表される３－（４－アルキルフェニル）プロパンニトリルの配合量を選択することができる。例えば、製品中の式（１）で表される３－（４－アルキルフェニル）プロパンニトリルの配合量は、好ましくは０．００００１質量％以上であり、より好ましくは０．０００１質量％以上であり、更に好ましくは０．００１質量％以上である。また、好ましくは８０質量％以下であり、更に好ましくは６０質量％以下であり、より更に好ましくは４０質量％以下である。

なお、式（１）で表される３－（４－アルキルフェニル）プロパンニトリルをアロマオイル、香水等として用いる場合には、製品中の式（１）で表される３－（４－アルキルフェニル）プロパンニトリルの配合量は、８０質量％以上であってもよく、１００質量％であってもよい。

[0046] 〔賦香方法〕

上記一般式（１）で表される３－（４－アルキルフェニル）プロパンニトリルは、フローラル香と、グリーン香又はフルーティ香を有することから、様々な製品にフローラル香と、それに加えてグリーン香又はフルーティ香を付与することができる。下記一般式（１）で表される３－（４－アルキルフェニル）プロパンニトリルによってフローラル香と、グリーン香又はフルーティ香を付与する、賦香方法も本発明に含まれる。

製品にフローラル香と、それに加えてグリーン香又はフルーティ香を付与する方法としては、製品が固体である場合、塗布、噴霧、浸漬等を行えばよく、製品が液体の場合、混合すればよい。なお、式（１）で表される３－（４－アルキルフェニル）プロパンニトリルによってフローラル香と、グリーン香又はフルーティ香を付与する場合、式（１）で表される３－（４－アルキルフェニル）プロパンニトリルを前記香料組成物の一成分として、様々な製品にフローラル香と、グリーン香又はフルーティ香を付与してもよい。

[0047] 式（１）中、Ｒは炭素数２～４のアルキル基を示す。具体的には、Ｒは、好ましくはエチル基、イソプロピル基、ノルマルブチル基、イソブチル基及びターシャリーブチル基からなる群より選ばれる少なくとも１つであり、よ

り好ましくはイソプロピル基、ノルマルブチル基及びイソブチル基からなる群より選ばれる少なくとも1つであり、更に好ましくはノルマルブチル基である。

Rがエチル基、イソプロピル基、ノルマルブチル基、イソブチル基及びターシャリーブチル基からなる群より選ばれる少なくとも1つであると、フローラル香に加え、グリーン香又はフルーティ香を付与することができる。

Rがイソプロピル基及びイソブチル基からなる群より選ばれる少なくとも1つであると、フローラル香に加え、グリーン香及びフルーティ香を付与することができる。

Rがノルマルブチル基であると、フローラル香に加え、フルーティ香及びスパイシー香を付与することができる。

[0048] 上記式(1)で表される3-(4-アルキルフェニル)プロパンニトリルは、フローラル香と、グリーン香又はフルーティ香を有することから、様々な製品にフローラル香と、グリーン香又はフルーティ香を付与することができる。

Rがエチル基であるとき、特に、製品にフローラル香に加え、グリーン香を付与する。

Rがイソプロピル基であるとき、特に、製品にフローラル香に加え、グリーン香及びフルーティ香を付与する。

Rがノルマルブチル基であるとき、特に、製品にフローラル香に加え、フルーティ香及びスパイシー香を付与する。更に製品に含まれる香りの強さと拡散性を著しく向上させることができる。

Rがイソブチル基であるとき、特に、製品にフローラル香に加え、グリーン香及びフルーティ香を付与する。

Rがターシャリーブチル基であるとき、特に、製品にフローラル香に加え、グリーン香を付与する。

[0049] 式(1)で表される3-(4-アルキルフェニル)プロパンニトリルによってフローラル香と、グリーン香又はフルーティ香を付与することができる

製品としては、例えば、香水、コロソネ等のフレグランス製品；シャンプー、リンス類、ヘアートニック、ヘアークリーム類、ムース、ジェル、ポマード、スプレーその他毛髪用化粧料；化粧水、美容液、クリーム、乳液、パック、ファンデーション、おしろい、口紅、各種メイクアップ類等の肌用化粧料；皿洗い洗剤、洗濯用洗剤、ソフトナー類、消毒用洗剤類、消臭洗剤類、室内芳香剤、ファニチャーケア、ガラスクリーナー、家具クリーナー、床クリーナー、消毒剤、殺虫剤、漂白剤、殺菌剤、忌避剤、その他の各種健康衛生用洗剤類；歯磨、マウスウォッシュ、入浴剤、制汗製品、パーマ液等の医薬部外品；トイレットペーパー、ティッシュペーパー等の雑貨；医薬品等；食品等が挙げられる。

[0050] 上記製品中の式（１）で表される３－（４－アルキルフェニル）プロパンニトリルの配合量は特に限定されず、賦香すべき製品の種類、性質及び官能的効果などに応じて、式（１）で表される３－（４－アルキルフェニル）プロパンニトリルの配合量を選択することができる。例えば、製品中の式（１）で表される３－（４－アルキルフェニル）プロパンニトリルの配合量は、好ましくは０．０００１質量％以上であり、より好ましくは０．００１質量％以上であり、更に好ましくは０．０１質量％以上である。また、好ましくは８０質量％以下であり、更に好ましくは６０質量％以下であり、より更に好ましくは４０質量％以下である。

なお、式（１）で表される３－（４－アルキルフェニル）プロパンニトリルをアロマオイル、香水等として用いる場合には、製品中の式（１）で表される３－（４－アルキルフェニル）プロパンニトリルの配合量は、８０質量％以上であってもよく、１００質量％であってもよい。

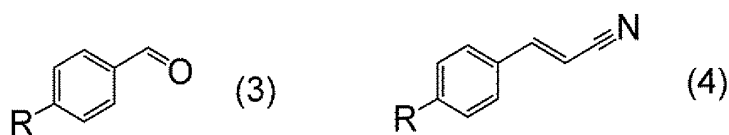
[0051] [３－（４－アルキルフェニル）プロパンニトリルの製造方法]

本発明の香料組成物に有効成分として含有される３－（４－アルキルフェニル）プロパンニトリルの製造方法には制限がないが、次に示す製造方法によって得ることが好ましい。なお、次に示す製造方法によって得られた３－（４－アルキルフェニル）プロパンニトリルは、前記のとおり、香料として

使用することも好ましく、前記賦香方法に用いることも好ましい。また、次に示す製造方法も本発明に含まれる。

[0052] 本発明の 3-(4-アルキルフェニル)プロパニトリルの製造方法は、下記式(3)で表される 4-アルキルベンズアルデヒドを原料として、アセトニトリルとの縮合反応による下記式(4)で表されるシンナモニトリルへと誘導する工程、及び水素添加工程をこの順で有する、3-(4-アルキルフェニル)プロパニトリルの製造方法である。

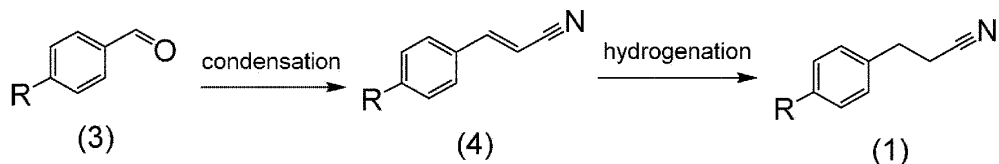
[化11]



(式(3)及び式(4)中、Rは炭素数2～4のアルキル基を示す。)

[0053] 前記の製造方法によって 3-(4-アルキルフェニル)プロパニトリルを製造する場合の反応は、次式で示される。

[化12]

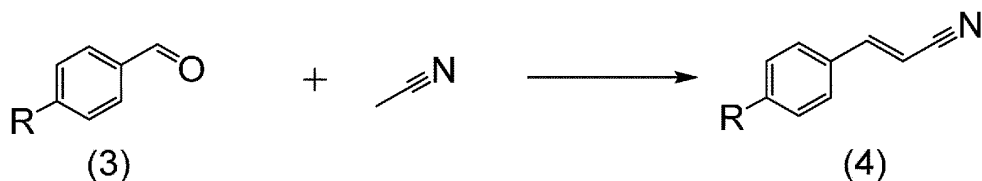


(Rは炭素数1～4のアルキル基を示す。)

[0054] <縮合工程>

前記の製造方法は、4-アルキルベンズアルデヒドとアセトニトリルとを脱水縮合させる縮合工程を有する。

[化13]



(Rは炭素数1～4のアルキル基を示す。)

[0055] 本工程の縮合反応は、塩基性化合物を触媒として用いることが好ましい。

触媒として使用する塩基性化合物としては、水酸化ナトリウム、水酸化カリウム、重炭酸ナトリウム、又はこれらの混合物などが例示される。塩基性化合物の量は、原料であるジメチルベンズアルデヒド 1 当量に対して、好ましくは 0.05 当量以上、より好ましくは 0.1 当量以上、更に好ましくは 0.2 当量以上であり、そして、好ましくは 3 当量以下、より好ましくは 1 当量以下、更に好ましくは 0.7 当量以下である。

[0056] アセトニトリルの添加量は、原料である 4-アルキルベンズアルデヒド 1 当量に対して、好ましくは 1 当量以上、より好ましくは 2 当量以上であり、そして、好ましくは 10 当量以下、より好ましくは 7 当量以下である。4-アルキルベンズアルデヒドの添加は、逐次的又は連続的に時間をかけて行うことが好ましく、例えば、滴下により加えることが好ましい。

[0057] 本工程の縮合反応は、アセトニトリルを溶媒として使用できるが、他の溶媒の存在下で行ってもよい。使用する溶媒としては、縮合反応を阻害しない限り特に限定されないが、メタノール、エタノール、イソプロパノール等のアルコール類；ペンタン、ヘキサン、イソペンタン、ヘプタン、オクタン、イソオクタン等の脂肪族炭化水素類；ベンゼン、トルエン、エチルベンゼン、キシレン等の芳香族炭化水素等の炭化水素溶媒が例示される。これらは 1 種単独で使用してもよく、2 種以上を併用してもよい。

[0058] 本工程の縮合反応における反応温度は特に限定されないが、反応速度の観点から、好ましくは 0℃以上、より好ましくは 10℃以上であり、そして、副反応を抑制する観点から、好ましくは 100℃以下、より好ましくは 70℃以下、更に好ましくは 50℃以下である。

また、反応時間は特に限定されず、縮合が十分に行われる時間であればよいが、好ましくは 10 分以上、より好ましくは 30 分以上、更に好ましくは 1 時間以上であり、そして、好ましくは 24 時間以下、より好ましくは 12 時間以下、更に好ましくは 6 時間以下、より更に好ましくは 3 時間以下である。

[0059] 反応の停止は、中和により行えばよく、例えば、酢酸等の酸を添加するこ

とで、反応を停止させることができる。

- [0060] また、反応終了後の溶液から前記式（３）で表される中間体を単離する方法は特に限定されず、分液及び抽出操作、蒸留精製を適宜組み合わせて行えばよい。また、単離せずに後工程の水素添加工程に用いてもよい。

単離する場合の方法としては、例えば、反応終了後の溶液に低極性又は無極性の有機溶媒を添加し、油相に前記中間体を移相して、得られた油相を、例えば硫酸マグネシウムで乾燥した後、ろ過によって得られたろ液を濃縮し、更に、蒸留精製することで単離することができる。

- [0061] <水素添加工程>

前記の製造方法は、縮合工程の後に、水素添加工程を有し、前記式（１）で表される３－（４－アルキルフェニル）プロパンニトリルを得る。

- [0062] 本工程は、縮合工程で得られた、前記式（４）で表される中間体に水素添加して、目的物である式（１）で表される３－（４－アルキルフェニル）プロパンニトリルを得る工程である。水素添加の方法は特に限定されないが、水素添加触媒を用いた公知の方法により行うことができる。

- [0063] 水素添加触媒としては、特に限定されず、公知の触媒を使用することができる。例えば、Ni、Pt、Pd、Ru等の金属を、カーボン、シリカ、アルミナ、ケイソウ土等に担持させた担持型不均一系水素添加触媒；Ni、Co、Fe、Cr等の有機酸塩又はアセチルアセトン塩等の遷移金属塩と有機アルミニウム等の還元剤とを用いる、いわゆるチーグラ型水素添加触媒；Ti、Ru、Rh、Zr等の有機金属化合物等のいわゆる有機金属錯体等の均一系水素添加触媒等を用いることができる。

- [0064] 本工程における水素添加反応の温度は、反応性及び副反応を抑制する観点から、好ましくは０℃以上、より好ましくは１０℃以上、更に好ましくは２０℃以上であり、そして、好ましくは１５０℃以下、更に好ましくは１００℃以下である。

水素添加反応に使用される水素の圧力は、好ましくは０．０１MPaG以上、より好ましくは０．０３MPaG以上、更に好ましくは０．０５MPaG

G以上であり、そして、好ましくは10MPaG以下、より好ましくは3MPaG以下、更に好ましくは1MPaG以下、より更に好ましくは0.5MPaG以下である。

反応時間は、特に限定されないが、好ましくは3分以上、より好ましくは10分以上、更に好ましくは30分以上であり、そして、好ましくは24時間以下、より好ましくは12時間以下、更に好ましくは8時間以下である。

[0065] 水素添加反応は、溶媒の存在下で行ってもよい。使用する溶媒としては、水素添加反応を阻害しない限り特に限定されないが、メタノール、エタノール、イソプロパノール等のアルコール類；ペンタン、ヘキサン、イソペンタン、ヘプタン、オクタン、イソオクタン等の脂肪族炭化水素類；ベンゼン、トルエン、エチルベンゼン、キシレン等の芳香族炭化水素等の炭化水素溶媒が例示される。これらは1種単独で使用してもよく、2種以上を併用してもよい。

[0066] 反応終了後の溶液から、目的物である式(1)で表される3-(4-アルキルフェニル)プロパンニトリルを精製する方法は特に限定されず、公知の方法を適宜選択して行えばよい。具体的には、ろ過、クロマトグラフィー、蒸留精製等が例示され、これらを適宜組み合わせて精製することで純度の高い目的の3-(4-アルキルフェニル)プロパンニトリルを得ることができる。

実施例

[0067] 以下に示す実施例に基づいて本発明を具体的に説明するが、本発明はこれらの実施例により制限されるものではない。

[0068] <組成の分析>

後述する各工程での組成、生成物の組成、及び組成物の組成は、ガスクロマトグラフィー(GC-2010Plus、株式会社島津製作所製)を用いて求めた。

なお、キャピラリーカラムとして、信和化工株式会社製のHR-1701(内径0.32mmφ、長さ30m)を用いた。昇温プログラムは、100

℃から5℃／分の割合で280℃まで昇温し、30分間保持した。

[0069] <NMRスペクトル分析>

装置：Bruker AVANCE NEO 400MHz

溶媒：重クロロホルム (CDCl₃)

測定モード：¹H、¹³C

内部標準物質：テトラメチルシラン (TMS)

[0070] <香り・香調の評価>

実施例で得られたニトリル化合物、及び香料組成物の香り及び香調は、幅8mm、長さ15cmのろ紙に含浸し、専門のパネラーが嗅ぐ方法で評価した。

[0071] [3-(4-アルキルフェニル)プロパンニトリルの製造]

実施例1 (3-(4-エチルフェニル)プロパンニトリルの製造)

(縮合工程)

攪拌装置、温度計、滴下漏斗を備えた内容積500mLの丸底フラスコに、アセトニトリル (富士フイルム和光純薬株式会社製、150.5g)、水酸化カリウム (富士フイルム和光純薬株式会社製、24.4g) を仕込み、攪拌しながら50℃に昇温した後、4-エチルベンズアルデヒド (三菱瓦斯化学株式会社製、100.0g) を2時間かけて滴下した。滴下終了後、50℃で2時間保持し、反応を完了させた。酢酸を添加して中和した後、水、ヘプタンを加えて分液にて水相を分離した。次いで、ヘプタンを留去して、粗中間体溶液を得た。この粗中間体溶液を単蒸留し、3-(4-エチルフェニル)プロパンニトリルを異性体混合物 (42.0g、合計純度99.3%) として得た。

[0072] (水素添加工程)

縮合工程にて得られた3-(4-エチルフェニル)プロパンニトリル (41.0g)、2-プロパノール (41.0g)、5%パラジウム-カーボン触媒 (エヌ・イー・ケムキャット株式会社製、含水品、PEタイプ、0.8g) を、磁力誘導式攪拌機を備え、ジャケットにより内部温度を制御できる

200 mL のステンレス製オートクレーブに仕込み、40℃、水素圧0.4 MPaで5時間攪拌して水素添加反応を行った。反応液を濾過して触媒を除き、ヘプタンを加えて分液にて水相を分離した。次いで、ヘプタンを留去して、粗生成物を得た。粗生成物をカラムクロマトグラフィー（シリカゲル、ヘキサン：酢酸エチル＝95：5）にて精製し、3-（4-エチルフェニル）プロパンニトリル（20.0 g、純度99.0%）を無色透明液体として得た。なお、3-（2-エチルフェニル）プロパンニトリルを3-（4-エチルフェニル）プロパンニトリルに対して0.04質量%含んでいた。

[0073] （香り・香調）

Floral, Green, Mashroomy, Earthy

（NMRスペクトル）

$^1\text{H-NMR}$ (400MHz, CDCl_3) δ 1.23 (3H, t, $J=7.6\text{ Hz}$), 2.57–2.66 (4H, m), 2.92 (2H, t, $J=7.4\text{ Hz}$), 7.13–7.18 (4H, m)

$^{13}\text{C-NMR}$ (100MHz, CDCl_3) δ 15.5, 19.4, 28.5, 31.2, 119.2, 128.2, 128.4, 135.3, 143.3

[0074] 実施例2（3-（4-イソプロピルフェニル）プロパンニトリルの製造）

（縮合工程）

攪拌装置、温度計、滴下漏斗を備えた内容積500 mLの丸底フラスコに、アセトニトリル（富士フイルム和光純薬株式会社製、135.1 g）、水酸化カリウム（富士フイルム和光純薬株式会社製、22.2 g）を仕込み、攪拌しながら50℃に昇温した後、4-イソプロピルベンズアルデヒド（三菱瓦斯化学株式会社製、100.0 g）を2時間かけて滴下した。滴下終了後、50℃で2時間保持し、反応を完了させた。酢酸を添加して中和した後、水、ヘプタンを加えて分液にて水相を分離した。次いで、ヘプタンを留去して、粗中間体溶液を得た。この粗中間体溶液を単蒸留し、3-（4-イソプロピルフェニル）プロパンニトリルを異性体混合物（53.0 g、合計純

度 98.3%) として得た。

[0075] (水素添加工程)

縮合工程にて得られた 3-(4-イソプロピルフェニル)プロパンニトリル (51.0 g)、2-プロパノール (51.0 g)、5%パラジウム-カーボン触媒 (エヌ・イー・ケムキャット株式会社製、含水晶、PE タイプ、0.5 g) を、磁力誘導式攪拌機を備え、ジャケットにより内部温度を制御できる 200 mL のステンレス製オートクレーブに仕込み、40℃、水素圧 0.4 MPa で 5 時間攪拌して水素添加反応を行った。反応液を濾過して触媒を除き、ヘプタンを加えて分液にて水相を分離した。次いで、ヘプタンを留去して、粗生成物を得た。粗生成物をカラムクロマトグラフィー (シリカゲル、ヘキサン:酢酸エチル=95:5) にて精製し、3-(4-イソプロピルフェニル)プロパンニトリル (25.0 g、純度 99.0%) を無色透明液体として得た。なお、3-(2-イソプロピルフェニル)プロパンニトリルを 3-(4-イソプロピルフェニル)プロパンニトリルに対して 0.2 質量%含んでいた。

[0076] (香り・香調)

Floral, Green, Fruity, Rose, Muguet
(NMR スペクトル)

$^1\text{H-NMR}$ (400 MHz, CDCl_3) δ 1.24 (6H, d, $J=6.9$ Hz), 2.6 (2H, t, $J=7.4$), 2.86–2.94 (3H, m), 7.14–7.21 (4H, m)

$^{13}\text{C-NMR}$ (100 MHz, CDCl_3) δ 19.4, 24.0, 31.2, 33.8, 119.3, 126.9, 128.2, 135.4, 147.9

[0077] 実施例 3 (3-(4-ノルマルブチルフェニル)プロパンニトリルの製造)
(縮合工程)

攪拌装置、温度計、滴下漏斗を備えた内容積 500 mL の丸底フラスコに、アセトニトリル (富士フイルム和光純薬株式会社製、123.4 g)、水

酸化カリウム（富士フイルム和光純薬株式会社製、28.5 g）を仕込み、攪拌しながら50℃に昇温した後、4-ノルマルブチルベンズアルデヒド（三菱瓦斯化学株式会社製、100.0 g）を2時間かけて滴下した。滴下終了後、50℃で2時間保持し、反応を完了させた。酢酸を添加して中和した後、水、ヘプタンを加えて分液にて水相を分離した。次いで、ヘプタンを留去して、粗中間体溶液を得た。この粗中間体溶液を単蒸留し（160～162℃／5 torr）、3-（4-ノルマルブチルフェニル）プロペンニトリルを異性体混合物（64.0 g、合計純度98.5%）として得た。

[0078]（水素添加工程）

縮合工程にて得られた3-（4-ノルマルブチルフェニル）プロペンニトリル（64.0 g）、2-プロパノール（64.0 g）、5%パラジウム-カーボン触媒（エヌ・イー・ケムキャット株式会社製、含水品、PEタイプ、1.2 g）を、磁力誘導式攪拌機を備え、ジャケットにより内部温度を制御できる200 mLのステンレス製オートクレーブに仕込み、40℃、水素圧0.4 MPaで5時間攪拌して水素添加反応を行った。反応液を濾過して触媒を除き、ヘプタンを加えて分液にて水相を分離した。次いで、ヘプタンを留去して、粗生成物を得た。粗生成物を理論段数20段の精留塔を使用して10 torrにて精留し、160～166℃の留分として、3-（4-ノルマルブチルフェニル）プロパンニトリル（46.0 g、純度99.0%）を無色透明液体として得た。なお、3-（2-ノルマルブチルフェニル）プロパンニトリルを3-（4-ノルマルブチルフェニル）プロパンニトリルに対して0.7質量%含んでいた。

[0079]（香り・香調）

Spicy, Floral, Fruity, Lactonic
(NMRスペクトル)

$^1\text{H-NMR}$ (400 MHz, CDCl_3) δ 0.92 (3H, t, $J=7.3$ Hz), 1.30–1.40 (2H, m), 1.55–1.62 (2H, m), 2.57–2.61 (4H, m), 2.92 (2H, t, $J=7$

、4 H z) , 7. 1 1 – 7. 1 6 (4 H, m)

^{13}C -NMR (100 MHz, CDCl_3) δ 13. 9, 19. 4, 22. 3, 31. 2, 33. 6, 35. 2, 119. 2, 128. 1, 128. 9, 135. 2, 141. 9

[0080] 実施例4 (3-(4-イソブチルフェニル)プロパンニトリルの製造)
(縮合工程)

攪拌装置、温度計、滴下漏斗を備えた内容積500 mLの丸底フラスコに、アセトニトリル(富士フィルム和光純薬株式会社製、123. 5 g)、水酸化カリウム(富士フィルム和光純薬株式会社製、20. 5 g)を仕込み、攪拌しながら50℃に昇温した後、4-イソブチルベンズアルデヒド(三菱瓦斯化学株式会社製、100. 0 g)を2時間かけて滴下した。滴下終了後、50℃で2時間保持し、反応を完了させた。酢酸を添加して中和した後、水、ヘプタンを加えて分液にて水相を分離した。次いで、ヘプタンを留去して、粗中間体溶液を得た。この粗中間体溶液を単蒸留し、3-(4-イソブチルフェニル)プロパンニトリルを異性体混合物(55. 0 g、合計純度97. 6%)として得た。

[0081] (水素添加工程)

縮合工程にて得られた3-(4-イソブチルフェニル)プロパンニトリル(53. 0 g)、2-プロパノール(53. 0 g)、5%パラジウム-カーボン触媒(エヌ・イー・ケムキャット株式会社製、含水品、PEタイプ、1. 0 g)を、磁力誘導式攪拌機を備え、ジャケットにより内部温度を制御できる200 mLのステンレス製オートクレーブに仕込み、40℃、水素圧0. 4 MPaで5時間攪拌して水素添加反応を行った。反応液を濾過して触媒を除き、ヘプタンを加えて分液にて水相を分離した。次いで、ヘプタンを留去して、粗生成物を得た。粗生成物をカラムクロマトグラフィー(シリカゲル、ヘキサン：酢酸エチル=95：5)にて精製し、3-(4-イソブチルフェニル)プロパンニトリル(22. 0 g、純度99. 2%)を無色透明液体として得た。なお、3-(2-イソブチルフェニル)プロパンニトリルを

3-(4-イソブチルフェニル)プロパンニトリルに対して0.2質量%含まれていた。

[0082] (香り・香調)

Floral, Green, Fruity, Green, Muguet
(NMRスペクトル)

$^1\text{H-NMR}$ (400MHz, CDCl_3) δ 0.90 (6H, d, $J=6.6\text{ Hz}$), 1.79–1.90 (1H, m), 2.45 (2H, d, $J=7.2\text{ Hz}$), 2.60 (2H, t, $J=7.5\text{ Hz}$), 2.93 (2H, t, $J=7.5\text{ Hz}$), 7.09–7.14 (4H, m)

$^{13}\text{C-NMR}$ (100MHz, CDCl_3) δ 19.4, 22.3, 30.2, 31.3, 45.0, 119.2, 128.0, 129.6, 135.3, 140.7

[0083] 実施例5 (3-(4-ターシャリーブチルフェニル)プロパンニトリルの製造)

(縮合工程)

攪拌装置、温度計、滴下漏斗を備えた内容積500mLの丸底フラスコに、アセトニトリル(富士フイルム和光純薬株式会社製、123.3g)、水酸化カリウム(富士フイルム和光純薬株式会社製、24.4g)を仕込み、攪拌しながら50℃に昇温した後、4-ターシャリーブチルベンズアルデヒド(東京化成工業株式会社製、50.0g)を1時間かけて滴下した。滴下終了後、50℃で2時間保持し、反応を完了させた。酢酸を添加して中和した後、水、ヘプタンを加えて分液にて水相を分離した。次いで、ヘプタンを留去して、粗中間体溶液を得た。この粗中間体溶液を単蒸留し、3-(4-ターシャリーブチルフェニル)プロパンニトリルを異性体混合物(19.7g、合計純度94.1%)として得た。

[0084] (水素添加工程)

縮合工程にて得られた3-(4-ターシャリーブチルフェニル)プロパンニトリル(19.7g)、メタノール(40.0g)、5%パラジウム-カ

ーボン触媒（エヌ・イー・ケムキャット株式会社製、含水晶、PEタイプ、0.4 g）を、磁力誘導式攪拌機を備え、ジャケットにより内部温度を制御できる200 mLのステンレス製オートクレーブに仕込み、40℃、水素圧0.4 MPaで5時間攪拌して水素添加反応を行った。反応液を濾過して触媒を除き、ヘプタンを加えて分液にて水相を分離した。次いで、ヘプタンを留去して、粗生成物を得た。粗生成物をカラムクロマトグラフィー（シリカゲル、ヘキサン：酢酸エチル＝95：5）にて精製し、3-（4-ターシャリーブチルフェニル）プロパンニトリル（6.4 g、純度98.0%）を無色透明液体として得た。なお、3-（2-ターシャリーブチルフェニル）プロパンニトリルを3-（4-ターシャリーブチルフェニル）プロパンニトリルに対して0.6質量%含んでいた。

[0085]（香り・香調）

Floral, Green, Woody, Peony, Musky
(NMRスペクトル)

$^1\text{H-NMR}$ (400 MHz, CDCl_3) δ 1.31 (9H, s), 2.60 (2H, t, $J=7.5$ Hz), 2.93 (2H, t, $J=7.5$ Hz), 7.16 (2H, d, $J=8.4$ Hz), 7.35 (2H, d, $J=8.4$)

$^{13}\text{C-NMR}$ (100 MHz, CDCl_3) δ 19.3, 31.1, 31.3, 34.5, 119.3, 125.8, 127.9, 135.0, 150.2

[0086] 比較例1（3-（4-メチルフェニル）プロパンニトリルの製造）

（縮合工程）

攪拌装置、温度計、滴下漏斗を備えた内容積500 mLの丸底フラスコに、アセトニトリル（富士フイルム和光純薬株式会社製、167.8 g）、水酸化カリウム（富士フイルム和光純薬株式会社製、38.47 g）を仕込み、攪拌しながら50℃に昇温した後、4-メチルベンズアルデヒド（三菱瓦斯化学株式会社製、100.0 g）を2時間かけて滴下した。滴下終了後、

50℃で2時間保持し、反応を完了させた。酢酸を添加して中和した後、水、ヘプタンを加えて分液にて水相を分離した。次いで、ヘプタンを留去して、粗中間体溶液を(120.0g、純度81.6%)を固体として得た。粗中間体はそのまま水素添加工程に使用した。

[0087] (水素添加工程)

縮合工程にて得られた3-(4-メチルフェニル)プロペンニトリルを含む粗中間体(50.0g)、メタノール(50.0g)、5%パラジウム-カーボン触媒(エヌ・イー・ケムキャット株式会社製、含水晶、PEタイプ、1.0g)を、磁力誘導式攪拌機を備え、ジャケットにより内部温度を制御できる200mLのステンレス製オートクレーブに仕込み、40℃、水素圧0.4MPaで5時間攪拌して水素添加反応を行った。反応液を濾過して触媒を除き、ヘプタンを加えて分液にて水相を分離した。次いで、ヘプタンを留去して、粗生成物を得た。粗生成物をカラムクロマトグラフィー(シリカゲル、ヘキサン：酢酸エチル=95：5)にて精製し、3-(4-メチルフェニル)プロパンニトリル(18.0g、純度98.8%)を無色透明液体として得た。なお、3-(2-メチルフェニル)プロパンニトリルを3-(4-メチルフェニル)プロパンニトリルに対して1.0質量%含んでいた。

[0088] (香り・香調)

Green, Herbal, Floral, Spicy, Hyacinth

(NMRスペクトル)

$^1\text{H-NMR}$ (400MHz, CDCl_3) δ 2.33 (3H, s), 2.59 (2H, t, $J=7.4$), 2.91 (2H, t, $J=7.4\text{ Hz}$), 7.10–7.15 (4H, m)

$^{13}\text{C-NMR}$ (100MHz, CDCl_3) δ 19.5, 21.0, 31.2, 119.2, 128.1, 129.5, 135.0, 136.9

[0089] 実施例で得られた3-(4-アルキルフェニル)プロパンニトリルは、フ

ローラル香に加え、グリーン香又はフルーティ香を有するため、香料として好適に使用できることがわかる。更に実施例で得られた3-(4-アルキルフェニル)プロパンニトリルは、フローラル香に加え、グリーン香又はフルーティ香を付与する賦香方法に好適に用いることができることがわかる。

なかでも、実施例2及び4で得られた3-(4-イソプロピルフェニル)プロパンニトリル及び3-(4-イソブチルフェニル)プロパンニトリルは、フローラル香に加え、グリーン香及びフルーティ香を有するため、香料としてより好適に使用でき、賦香方法により好適に用いることができることがわかる。

また、実施例3で得られた3-(4-ノルマルブチルフェニル)プロパンニトリルは、フローラル香に加え、フルーティ香及びスパイシー香を有するため、香料として更に好適に使用でき、賦香方法に更に好適に用いることができることがわかる。

一方、比較例1で得られた3-(4-メチルフェニル)プロパンニトリルは、グリーン香、ハーバル香を有するものであり、フローラル香は弱いものであった。

[0090] [香料組成物]

実施例6 (アップル・シナモン様の香料組成物)

表1に示す香料組成物ベースに対し、実施例3で得られた3-(4-ノルマルブチルフェニル)プロパンニトリルを1.50質量%となるように添加し、香り・香調評価を行った。

[0091] 比較例2 (アップル・シナモン様の香料組成物)

表1に示す香料組成物ベースに対し、CINNAMALVA ((E)-シナミルニトリル)を1.50質量%となるように添加し、香り・香調評価を行った。

[0092]

[表1]

表1

(質量%)

	実施例6	比較例2
3-(4-ノルマルブチルフェニル)プロパンニトリル(実施例3)	1.50	-
CINNAMALVA	-	1.50
2,3,5-TRIMETHYL PYRAZINE	0.10	0.10
ALDEHYDE C-14	3.50	3.50
ALLYL CAPROATE	1.00	1.00
ALLYL CYCLOHEXYL PROPIONATE	3.00	3.00
ALLYL IONONE	0.10	0.10
ALLYL OENANTHATE	6.00	6.00
CINNAMIC ACETATE	27.00	27.00
CINNAMYL PROPIONATE	6.50	6.50
CIS-3-HEXENOL	0.10	0.10
CIS-3-HEXENYL ACETATE	0.10	0.10
CYCLAMEN ALDEHYDE	2.00	2.00
CYCLAPROP	1.00	1.00
D.M.B.C. BUTYRATE	1.00	1.00
DIHYDRO MYRCENOL	2.50	2.50
DPG	20.00	20.00
ETHYL CAPRATE	0.60	0.60
ETHYL CAPROATE	1.00	1.00
ETHYL-2-METHYL BUTYRATE	1.00	1.00
ETHYLENE BRASSYLATE	5.00	5.00
FRUCTONE	10.00	10.00
FURANEOL	0.04	0.04
HEXYL ACETATE	1.00	1.00
IONONE ALPHA	0.50	0.50
LIGUSTRAL	0.50	0.50
MALTOL	0.16	0.16
ORANGE TERPENES	1.50	1.50
PRENYL ACETATE	0.30	0.30
VANILLIN	1.00	1.00
VERDOX	2.00	2.00
合計	100.00	100.00

[0093] 実施例6の香料組成物は、比較例2の香料組成物に比べ、フローラルでフルーティな香りが強く、香りの強さや拡散性が優れるものであった。

[0094] 実施例7（ハーブ様の香料組成物）

表2に示す香料組成物ベースに対し、実施例2で得られた3-（4-イソプロピルフェニル）プロパンニトリルを10.0質量%となるように添加し

、香り・香調評価を行った。

[0095] 実施例 8（ハーブ様の香料組成物）

表 2 に示す香料組成物ベースに対し、実施例 4 で得られた 3-（4-イソブチルフェニル）プロパンニトリルを 10.0 質量%となるように添加し、香り・香調評価を行った。

[0096] 比較例 3（ハーブ様の香料組成物）

表 2 に示す香料組成物ベースに対し、溶媒であるジプロピレングリコール（DPG）を 10.0 質量%添加して 18.0 質量%となるようにし、香り・香調評価を行った。

[0097] [表2]

表2		(質量%)	
	実施例7	実施例8	比較例3
3-(4-イソプロピルフェニル)プロパンニトリル(実施例2)	10.0	-	-
3-(4-イソブチルフェニル)プロパンニトリル(実施例4)	-	10.0	-
DPG	8.0	8.0	18.0
ALDEHYDE C-14	3.0	3.0	3.0
AMBERONE	8.0	8.0	8.0
ANETHOL	3.0	3.0	3.0
BORNEOL LAEVO CRIST	2.6	2.6	2.6
CAMPHOR	5.4	5.4	5.4
CITRONELLYL ACETATE	1.0	1.0	1.0
DIHYDRO MYRCENOL	6.0	6.0	6.0
DIMETHYL OCTANOL	1.2	1.2	1.2
EUCALYPTOL	15.0	15.0	15.0
HEXYL SALICYLATE	10.0	10.0	10.0
ISO BORNYL ACETATE	1.8	1.8	1.8
ISOANANAT	4.0	4.0	4.0
LEMONILE	2.0	2.0	2.0
LIGUSTRAL	0.6	0.6	0.6
PARA CYMENE	3.0	3.0	3.0
PINENE PETA	6.0	6.0	6.0
TAZINAL 10%TEC 10%DPG	0.4	0.4	0.4
TERPINEOL	1.6	1.6	1.6
TETRA HYDRO LINALOOL	4.0	4.0	4.0
THYMOL CRYSTALS	0.2	0.2	0.2
UNDECAVERTOL	1.0	1.0	1.0
VERDOX	2.0	2.0	2.0
VIRDINE	0.2	0.2	0.2
合計	100.0	100.0	100.0

[0098] 実施例 7 の香料組成物は、比較例 3 の香料組成物に比べ、ミドルノートの

フローラルな香りが強く、l i l a c様のフローラル感が強いものであった。実施例8の香料組成物は、比較例3の香料組成物に比べ、ミドルノートのフローラルな香りが強く、g e r a n i u m様のフローラル感が強いものであった。

[0099] 実施例9（柔軟剤向けの香料組成物）

表3に示す香料組成物ベースに対し、実施例2で得られた3-（4-イソプロピルフェニル）プロパンニトリルを6.5質量%となるように添加し、香り・香調評価を行った。

[0100] 比較例4（柔軟剤向けの香料組成物）

表3に示す香料組成物ベースに対し、溶媒であるジプロピレングリコール（D P G）を6.5質量%添加して14.3質量%となるようにし、香り・香調評価を行った。

[0101]

[表3]

表3

(質量%)

	実施例9	比較例4
3-(4-イソプロピルフェニル)プロパンニトリル(実施例2)	6.5	-
DPG	7.8	14.3
ALDEHYDE C-11 UNDECYLENIC	0.6	0.6
ALDEHYDE C-12 LAURIC	2.4	2.4
ALDEHYDE C-12 MNA	0.8	0.8
ALDEHYDE C-14	1.7	1.7
ANETHOL	0.2	0.2
BENZYL ACETATE	18.0	18.0
COUMARIN	5.4	5.4
DAMASCONE DELTA	0.2	0.2
ETHYL VANILLIN	0.6	0.6
EUGENOL	2.7	2.7
GERANIOL	8.5	8.5
GERANYL ACETATE	0.3	0.3
HEXYL SALICYLATE	0.3	0.3
LIGUSTRAL	1.2	1.2
LINALOOL	18.0	18.0
METHYL ANTHRANILATE	0.2	0.2
METHYL BENZOATE	0.5	0.5
METHYL IONONE GAMMA	6.5	6.5
ORANGE OIL FLORIDA	6.5	6.5
PARA CRESOL METHYL ETHER	0.3	0.3
PATCHOULI RECTIFIED	3.2	3.2
PHENYL ETHYL ACETATE	0.2	0.2
ROSE OXIDE	0.5	0.5
TERPINEOL	1.6	1.6
TERPINYL ACETATE	5.0	5.0
TONALID	0.3	0.3
合計	100.0	100.0

[0102] 実施例9の香料組成物は、比較例4の香料組成物に比べ、ボディのフローラルな香りが強く、lila様のフローラル感が強いものであった。

[0103] 実施例10（ハンドクリーム向けの香料組成物）

表4に示す香料組成物ベースに対し、実施例4で得られた3-(4-イソプロピルフェニル)プロパンニトリルを10.00質量%となるように添加し、香り・香調評価を行った。

[0104] 比較例5（ハンドクリーム向けの香料組成物）

表4に示す香料組成物ベースに対し、溶媒であるジプロピレングリコール

(DPG) を 10.00 質量% 添加して 18.91 質量% となるようにし、
香り・香調評価を行った。

[0105] [表4]

表4		(質量%)
	実施例10	比較例5
3-(4-イソブチルフェニル)プロパンニトリル(実施例4)	10.00	-
DPG	8.91	18.91
BENZYL ACETATE	10.00	10.00
BORNEOL LAEVO CRIST	0.18	0.18
CINNAMIC ALCOHOL	2.40	2.40
CITRAL SYNTHETIC	0.50	0.50
CITRONELLOL	5.00	5.00
CITRONELLYL ACETATE	0.18	0.18
CITRONELLYL FORMATE	0.08	0.08
CUMINYL ALCOHOL	0.40	0.40
D.M.B.C. ACETATE	0.07	0.07
D.M.P.E. FORMATE	0.08	0.08
EUCALYPTOL	0.18	0.18
EUGENOL	0.07	0.07
GERANIOL	18.00	18.00
GERANYL ACETATE	0.50	0.50
HELIOTROPINE	7.00	7.00
INDOLE PURE	0.07	0.07
IONONE ALPHA	6.00	6.00
LINALOOL	6.00	6.00
LINALYL ACETATE	11.00	11.00
ORANGE TERPENES	6.00	6.00
PARA CRESOL METHYL ETHER	0.10	0.10
PHENYL ACETALDEHYDE	0.06	0.06
PHENYL ETHYL ALCOHOL	6.50	6.50
PHENYL PROPYL ALCOHOL	0.30	0.30
VANILLIN	0.30	0.30
VIRIDINE	0.12	0.12
合計	100.00	100.00

[0106] 実施例10の香料組成物は、比較例5の香料組成物に比べ、フローラルな
香りが強く、herbal-rosyなgeranium様であった。

[0107] 実施例11（ローズ様の香料組成物）

表5に示す香料組成物ベースに対し、実施例1で得られた3-(4-エチ
ルフェニル)プロパンニトリルを7.5質量%となるように添加し、香り・

香調評価を行った。

[0108] 比較例 6（ローズ様の香料組成物）

表 5 に示す香料組成物ベースに対し、溶媒であるジプロピレングリコール（DPG）を 7.5 質量%となるように添加し、香り・香調評価を行った。

[0109] [表5]

表5	(質量%)	
	実施例11	比較例6
3-(4-エチルフェニル)プロパンニトリル(実施例1)	7.5	-
DPG	-	7.5
AMBERONE	16.0	16.0
AMYL SALICYLATE	2.5	2.5
ANISALDEHYDE	3.6	3.6
BACDANOL	1.0	1.0
BENZYL ACETATE	2.0	2.0
CITRONELLOL	3.0	3.0
DIHYDRO MYRCENOL	1.2	1.2
DIMETHYL OCTANOL	0.4	0.4
GERANIOL	2.6	2.6
GERANYL ACETATE	0.2	0.2
HEXYL CINNAMIC ALDEHYDE	10.0	10.0
IONONE ALPHA	1.8	1.8
IONONE BETA	0.8	0.8
KOAVONE	1.5	1.5
LINALOOL	2.5	2.5
LINALYL ACETATE	0.6	0.6
LYSMERAL	10.0	10.0
METHYL ANTHRANILATE	2.0	2.0
METHYL CEDRYL KETONE	1.0	1.0
METHYL IONONE GAMMA	16.0	16.0
ORANGER CRYSTALS	3.0	3.0
PHENOXANOL	1.5	1.5
PHENYL ETHYL ALCOHOL	2.5	2.5
PHENYL ETHYL PHENYL ACETATE	4.6	4.6
ROSE OXIDE	0.1	0.1
VANILLIN	0.5	0.5
YARA YARA	1.6	1.6
合計	100.0	100.0

[0110] 実施例 11 の香料組成物は、比較例 6 の香料組成物に比べ、フローラルな香りが強く、残香にもフローラルな香りがあった。

[0111] 以上の結果からわかるように、本発明の香料組成物は、強いフローラル香を有することがわかる。このことから、3-(4-アルキルフェニル)プロパンニトリルは、香料組成物にフローラル香と、グリーン香又はフルーティ香を付与することができ、更に香りの強さと拡散性を付与することができることがわかり、香料組成物の有効成分として有用であることがわかる。

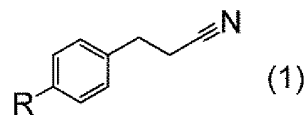
なかでも、3-(4-イソブチルフェニル)プロパンニトリル又は3-(4-イソプロピルフェニル)プロパンニトリルを含有する香料組成物は、l i l a c様、g e r a n i u m様のフローラル感を有するため、より好ましい。

また、3-(4-ノルマルブチルフェニル)プロパンニトリルを含有する香料組成物は、フローラルでフルーティな香りを有し、更に香りの強さや拡散性も優れるため、更に好ましい。

請求の範囲

[請求項1] 下記一般式（１）で表される３－（４－アルキルフェニル）プロパンニトリルを有効成分として含有する香料組成物。

[化1]



（式（１）中、Rは炭素数２～４のアルキル基を示す。）

[請求項2] 更に、式（１）で表される３－（４－アルキルフェニル）プロパンニトリル以外の香料物質を含有する、請求項１に記載の香料組成物。

[請求項3] 式（１）で表される３－（４－アルキルフェニル）プロパンニトリル以外の香料物質が、炭化水素類、アルコール類、エステル類、フェノール類、アルデヒド類、ケトン類、アセタール類、ケタール類、エーテル類、天然精油、天然抽出物、及び式（１）で表される３－（４－アルキルフェニル）プロパンニトリル以外のニトリル類からなる群より選ばれる少なくとも１つである、請求項２に記載の香料組成物。

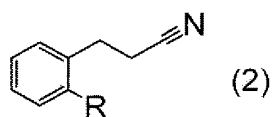
[請求項4] Rがエチル基、イソプロピル基、ノルマルブチル基、イソブチル基及びターシャリーブチル基からなる群より選ばれる少なくとも１つである、請求項１～３のいずれか１つに記載の香料組成物。

[請求項5] Rがイソプロピル基、ノルマルブチル基及びイソブチル基からなる群より選ばれる少なくとも１つである、請求項１～４のいずれか１つに記載の香料組成物。

[請求項6] Rがノルマルブチル基である、請求項１～５のいずれか１つに記載の香料組成物。

[請求項7] 下記一般式（２）で表される３－（２－アルキルフェニル）プロパンニトリルを、式（１）で表される３－（４－アルキルフェニル）プロパンニトリルに対して０．０３～０．８質量％含有する、請求項１～６のいずれか１つに記載の香料組成物。

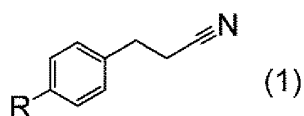
[化2]



(式(2)中、Rは炭素数2～4のアルキル基を示す。)

[請求項8] 下記一般式(1)で表される3-(4-アルキルフェニル)プロパニトリルの香料としての使用。

[化3]



(式(1)中、Rは炭素数2～4のアルキル基を示す。)

[請求項9] Rがエチル基、イソプロピル基、ノルマルブチル基、イソブチル基及びターシャリーブチル基からなる群より選ばれる少なくとも1つである、請求項8に記載の使用。

[請求項10] 前記式(1)で表される3-(4-アルキルフェニル)プロパニトリルがフローラル香と、グリーン香又はフルーティ香を付与する、請求項8又は9に記載の使用。

[請求項11] Rがイソプロピル基及びイソブチル基からなる群より選ばれる少なくとも1つである、請求項8～10のいずれか1つに記載の使用。

[請求項12] 前記式(1)で表される3-(4-アルキルフェニル)プロパニトリルがフローラル香、グリーン香及びフルーティ香を付与する、請求項11に記載の使用。

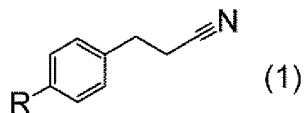
[請求項13] Rがノルマルブチル基である、請求項8～10のいずれか1つに記載の使用。

[請求項14] 前記式(1)で表される3-(4-アルキルフェニル)プロパニトリルがフローラル香、フルーティ香及びスパイシー香を付与する、請求項13に記載の使用。

[請求項15] 下記一般式(1)で表される3-(4-アルキルフェニル)プロパ

ンニトリルによってフローラル香と、グリーン香又はフルーティ香を付与する、賦香方法。

[化4]



(式(1)中、Rは炭素数2～4のアルキル基を示す。)

[請求項16]

下記式(3)で表される4-アルキルベンズアルデヒドを原料として、アセトニトリルとの縮合反応による下記式(4)で表されるシンナモニトリルへと誘導する工程、及び水素添加工程をこの順で有する、3-(4-アルキルフェニル)プロパンニトリルの製造方法。

[化5]

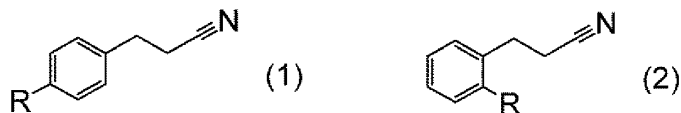


(式(3)及び式(4)中、Rは炭素数2～4のアルキル基を示す。)

[請求項17]

下記一般式(1)で表される3-(4-アルキルフェニル)プロパンニトリルと下記一般式(2)で表される3-(2-アルキルフェニル)プロパンニトリルを含有し、下記一般式(2)で表される3-(2-アルキルフェニル)プロパンニトリルを、式(1)で表される3-(4-アルキルフェニル)プロパンニトリルに対して0.03～0.8質量%含有するニトリル組成物。

[化6]



(式(1)中、Rは炭素数2～4のアルキル基を示す。式(2)中、Rは炭素数2～4のアルキル基を示す。)