

明 細 書

発明の名称：新規アルデヒド化合物

技術分野

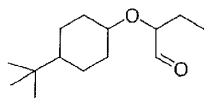
[0001] 本発明は、一般式（I）で表される化合物及び該化合物を含む香料組成物に関する。

背景技術

[0002] アルデヒド化合物は、医薬品、香料、農業において有用な活性を示すことが知られている。

[0003] 特開昭61-268643号（特許文献1）は、シス（又はトランス）-1-〔1'（又は2'あるいは3'）-ホルミルプロポキシ〕-4-tert-ブチルシクロヘキサン及びこれを含有する香料組成物を開示している。この香料組成物は、グリーンでアルデヒド様な柑橘様の香りを有することが特許文献1には記載されている。

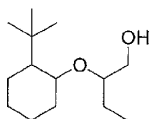
[0004] [化1]



シス（又はトランス）-1-〔1'-ホルミルプロポキシ〕-4-tert-ブチルシクロヘキサン

[0005] 特開平5-339188号（特許文献2）は、2-（2-tert-ブチルシクロヘキシルオキシ）-1-ブタノール及びこれを含有する香料組成物を開示している。この香料組成物は、残香性に優れた木様、アンバー様の香気を有することが特許文献2には記載されている。

[0006] [化2]

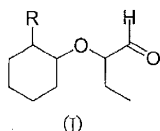


2-（2-tert-ブチルシクロヘキシルオキシ）-1-ブタノール

発明の概要

[0007] 本発明は、式（Ⅰ）で表される化合物である。

[化3]



[0008] [前記式（Ⅰ）中、
Rは炭素数1以上5以下のアルキル基である]

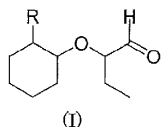
発明の詳細な説明

[0009] 本発明は、木様の香気を持つ新規な化合物とその香料組成物を提供することを目的とする。この木様の香気は、わずかに土様とフローラル-ミューゲ様の側面のある、ミント及びカンファー様の香気である。この木様の香気は、更に蜜様な甘さがある香気である。

[0010] 本発明者らは、木様の香気を持つ新規なアルデヒド化合物を見出し、本発明を完成した。この木様の香気は、わずかに土様とフローラル-ミューゲ様の側面のある、ミント及びカンファー様の香気である。この木様の香気は、更に蜜様な甘さがある香気である。

[0011] 本発明は、式（Ⅰ）で表される化合物である。

[0012] [化4]



[0013] [前記式（Ⅰ）中、
Rは炭素数1以上5以下のアルキル基である]

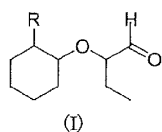
[0014] また、本発明は、式（Ⅰ）で表される化合物を含む香料組成物である。

更に、本発明は、式（Ⅰ）で表される化合物を賦香成分として使用する方法である。

[0015] 本発明の式（Ⅰ）で表される化合物は、木様の香気を持つ。この木様の香気は、わずかに土様とフローラル-ミューゲ様の側面のある、ミント及びカンファー様の香気である。この木様の香気は、更に蜜様な甘さがある香気である。

[0016] 本発明は、前記のように、式（Ⅰ）で表される化合物である。

[0017] [化5]



[0018] [前記式（Ⅰ）中、

Rは炭素数1以上5以下のアルキル基である。]

[0019] 本願明細書において、炭素数1以上5以下のアルキル基とは、例えば、メチル基、エチル基、*n*-プロピル基、*i*-プロピル基、*n*-ブチル基、*i*-ブチル基、*sec*-ブチル基、*t*-ブチル基、*n*-ペンチル基、*i*-ペンチル基、*sec*-ペンチル基、*t*-ペンチル基、2-メチルブチル基などの直鎖状または分岐状のアルキル基を挙げることができる。炭素数1以上5以下のアルキル基は、好ましくは炭素数1以上4以下のアルキル基、より好ましくは炭素数3以上4以下のアルキル基、より好ましくは*t*-ブチル基である。

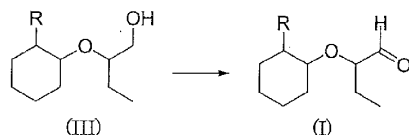
[0020] 前記式（Ⅰ）中、わずかに土様とフローラル-ミューゲ様の側面のある、ミント及びカンファー様と、蜜様な甘さがある、木様の香気を付与する観点から、

Rは炭素数1以上4以下のアルキル基が好ましく、炭素数3以上4以下のアルキル基がより好ましく、*t*-ブチル基がさらに好ましい。

[0021] 前記式（Ⅰ）で表される化合物は、例えば、以下の方法により製造することができる。

[0022]

[化6]



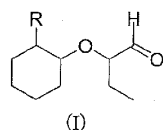
[0023] 式（Ⅰ）、及び式（Ⅲ）中、

Rは炭素数1以上5以下のアルキル基である。

[0024] 本発明の製造方法は、式（Ⅲ）の化合物を酸化することにより、式（Ⅰ）の化合物を得る工程を含む。前記工程は、例えば、式（Ⅲ）の化合物に、酸化剤（例えば、Dess-Martinペルヨージナンなど）を用いた酸化、スワン（Swern）酸化、PCC酸化、TPAP（レイ・グリフィス）酸化、TEMPO酸化、またはMnO₂を用いた酸化を行い、式（Ⅰ）の化合物を得る工程である。得られた式（Ⅰ）の化合物は、蒸留やカラムクロマトグラフィーにより分離し、精製することができる。

[0025] また、本発明は、式（Ⅰ）で表される化合物を含む香料組成物である。

[0026] [化7]



[0027] [前記式（Ⅰ）中、

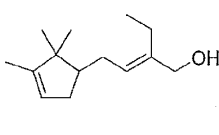
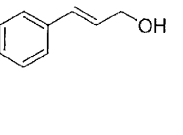
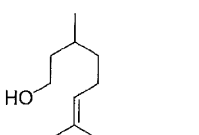
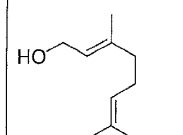
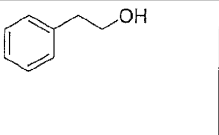
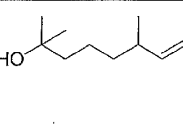
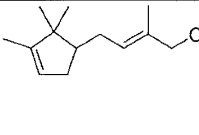
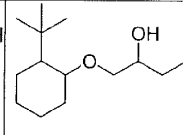
Rは炭素数1以上5以下のアルキル基である。]

[0028] 式（Ⅰ）で表される化合物を含む香料組成物は、わずかに土様とフローラル-ミューゲ様の側面のある、ミント及びカンファー様と、蜜様な甘さがある、木様の香気を付与することができるため、他の様々な香料との調和性に優れ、調合することで特徴的な香りの効果を創出することが可能である。具体的には、前記香料組成物は、アルコール系香料化合物に、ナチュラル感を付与することができる。即ち、式（Ⅰ）で表される化合物は、抽出物などの天然由来の香料組成物ではない、アルコール系香料化合物（Fragrance compound）に対して、天然の香料組成物のような複雑さを与えることができる。

- [0029] 式(1)で表される化合物を含む香料組成物において、わずかに土様とフローラル-ミューゲ様の側面のある、ミント及びカンファー様と、蜜様な甘さがある、木様の香気を付与する観点(以下、単に、ミント及びカンファー様と、蜜様な甘さがある、木様の香気を付与する観点ともいう)から、前記式(1)中、Rは炭素数1以上4以下のアルキル基が好ましく、炭素数3以上4以下のアルキル基がより好ましく、t-ブチル基がさらに好ましい。
- [0030] 前記香料組成物中、前記式(1)の化合物の含有量は、ミント及びカンファー様と、蜜様な甘さがある、木様の香気を付与する観点から、好ましくは0.05質量%以上、より好ましくは0.5質量%以上、更に好ましくは1質量%以上、好ましくは30質量%以下、より好ましくは20質量%以下、更に好ましくは10質量%以下であり、前記の観点から、好ましくは0.05質量%以上30質量%以下、より好ましくは0.5質量%以上20質量%以下、更に好ましくは1質量%以上10質量%以下である。
- [0031] 前記香料組成物は、炭素数8以上14以下のアルコールを更に含むのが好ましい。炭素数8以上14以下のアルコールを更に含むことによりこれを含む香料組成物のナチュラル感が増強され、かつ天然の香料組成物のような複雑さを生じさせ、その結果、炭素数8以上14以下のアルコールを更に含む香料組成物と調合香料との混合物の香りをより天然に近い香りとする観点から、炭素数8以上14以下のアルコールは、モノアルコール(モノオール)が好ましく、アルコール系香料化合物が好ましい。アルコール系香料化合物とは、香りを賦香する用途で用いられる化合物であって、ヒドロキシ基を有するものを意味する。
- [0032] 前記炭素数8以上14以下のアルコールとしては、バクダノール(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)、シンナミックアルコール、シトロネロール、ゲラニオール、フェネチルアルコール、ジヒドロミルセノール、サンダルマイソールコア(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)、アンバーコア(1-(2-

ｔ－ブチルシクロヘキシルオキシ）－２－ブタノール）、リナロール、ミルセノール、ネロール、テトラヒドロリナロール、テトラヒドロゲラニオール、ヒドロキシシトロネロール、ターピネオール、イソプレゴール、ノポール、チモール、オイゲノール、３－メチル－５－フェニルペンタノール等が挙げられ、炭素数８以上１４以下のアルコールを更に含むことによりこれを含む香料組成物のナチュラル感が増強され、かつ天然の香料組成物のような複雑さを生じさせ、その結果、炭素数８以上１４以下のアルコールを更に含む香料組成物と調合香料との混合物の香りをより天然に近い香りとする観点から、バクダノール、サンダルマイソールコア、及びアンバーコアからなる群から選ばれる一つ以上が好ましい。

[0033] [化8]

			
バクダノール	シンナミックアルコール	シトロネロール	ゲラニオール
			
フェネチルアルコール	ジヒドロセミルセロール	サンダルマイソールコア	アンバーコア

[0034] 炭素数８以上１４以下のアルコールに対する式（１）で表される化合物の質量比〔式（１）で表される化合物／炭素数８以上１４以下のアルコール〕は、炭素数８以上１４以下のアルコールを更に含むことによりこれを含む香料組成物のナチュラル感が増強され、かつ天然の香料組成物のような複雑さを生じさせる観点、及び、その結果、炭素数８以上１４以下のアルコールを更に含む香料組成物と調合香料との混合物の香りをより天然に近い香りとする観点から、好ましくは０．００１以上、より好ましくは０．０１以上、更

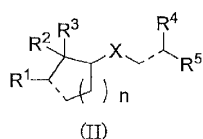
に好ましくは0.05以上、より更に好ましくは0.07以上であり、炭素数8以上14以下の本来のアルコールの香調を付与する観点から、好ましくは20以下、より好ましくは10以下、更に好ましくは5以下、より更に好ましくは1以下であり、これらの観点から、好ましくは0.001以上20以下、より好ましくは0.01以上10以下、更に好ましくは0.05以上5以下、より更に好ましくは0.07以上1以下である。

[0035] また、前記式(Ⅰ)で表される化合物を含む香料組成物中、炭素数8以上14以下のアルコールの含有量は、ナチュラル感を増強し、かつ天然の香料組成物のような複雑さを生じさせる観点から、好ましくは1質量%以上、より好ましくは5質量%以上、更に好ましくは10質量%以上であり、同様の観点から、好ましくは90質量%以下、より好ましくは70質量%以下、更に好ましくは50質量%以下であり、好ましくは1質量%以上90質量%以下、より好ましくは5質量%以上70質量%以下、更に好ましくは10質量%以上50質量%以下である。

[0036] なお炭素数8以上14以下のアルコールを複数種類含有する場合、その質量の合計が「炭素数8以上14以下のアルコールの質量」である。

[0037] 前記炭素数8以上14以下のアルコールが、式(Ⅱ)で表される化合物を含むのが好ましい。

[0038] [化9]



[0039] 前記式(Ⅱ)中、

R¹およびR²は、それぞれ独立して、水素原子またはメチル基であり、

R³は、メチル基、エチル基、n-プロピル基、イソプロピル基、またはt-ブチル基であり、

R⁴は、メチル基またはエチル基であり、

R⁵は、ヒドロキシ基またはヒドロキシメチル基であり、

Xは、 $-CH_2-$ または $-O-$ であり、

nは、1または2であり、

破線は、それぞれ独立して、単結合または二重結合である。

[0040] 前記炭素数8以上14以下のアルコールまたは前記式(11)で表される化合物は、炭素数8以上14以下のアルコールを更に含むことによりこれを含む香料組成物のナチュラル感が増強され、かつ天然の香料組成物のような複雑さを生じさせ、その結果、炭素数8以上14以下のアルコールを更に含む香料組成物と調合香料との混合物の香りをより天然に近い香りとする観点から、バクダノール(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)、サンダルマイソールコア(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)、及びアンバーコア(1-(2-tert-ブチルシクロヘキシルオキシ)-2-ブタノール)から選ばれる一つ以上が好ましい。

[0041] 前記式(1)で表される化合物および前記炭素数8以上14以下のアルコールを含む本発明の香料組成物は、前記式(1)で表される化合物および前記炭素数8以上14以下のアルコール以外であって、アルコール、フェノール、エステル、カーボネート、アルデヒド、ケトン、アセタール、エーテル、ラクトン、ニトリルおよびアミンのうち1種以上をさらに含むのが好ましい。

[0042] 本明細書中、各香料の「類」には単一の化合物、あるいは2つ以上の化合物の混合物を意味する。

[0043] アルコール類としては、脂肪族アルコール、テルペン系アルコール、芳香族アルコール、その他のアルコール等が挙げられる。これらの中でも脂肪族アルコールが好ましい。

[0044] テルペン系アルコールとしては、リナロール、エチルリナロール、ヒドロキシシトロネロール、ネロール、ターピネオール、 α -ターピネオール、ジヒドロミルセノール、ファルネソール、ネロリドール、セドロール、メント

ール、ボルネオール等が挙げられる。

[0045] 芳香族アルコールとしては、フェニルエチルアルコール、ベンジルアルコール、ジメチルベンジルカルビノール、フェニルエチルジメチルカルビノール、フェニルヘキサノール等が挙げられる。

[0046] 脂肪族アルコールとしては、シス-3-ヘキセノール、1-(2, 2, 6-トリメチルシクロヘキシル)-3-ヘキサノール、マグノール（花王株式会社製商品名、エチルノルボルニルシクロヘキサノールを主成分とする混合物）、ウンデカベルトール（ジボダン社製商品名、4-メチル-3-デセン-5-オール）、イソボルニルシクロヘキサノール、テルピローザ（花王株式会社製商品名、3, 6-ジメチル-2-ヘプタノール）等が挙げられる。

[0047] その他のアルコールとしては、ジプロピレングリコール等のグリコール類、フロローサ（ジボダン社製商品名、化学名：4-メチル-2-(2-メチルプロピル)テトラヒドロ-2H-4-ピラノール）、マルトール、エチルマルトール等が挙げられる。

[0048] 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。

[0049] フェノール類としては、グアヤコール、オイゲノール、ジヒドロオイゲノール、イソオイゲノール、チモール、パラクレゾール、バニリン、エチルバニリン等が挙げられる。

[0050] エステル類としては、脂肪族カルボン酸エステル、芳香族カルボン酸エステル、その他のカルボン酸エステルが挙げられる。

[0051] 脂肪族カルボン酸エステルを形成する脂肪族カルボン酸としては、炭素数1~18の直鎖及び分岐鎖カルボン酸が挙げられるが、中でもギ酸、酢酸、プロピオン酸等の炭素数1~6のカルボン酸好ましく、酢酸がより好ましい。芳香族カルボン酸エステルを形成する芳香族カルボン酸としては、安息香酸、アニス酸、フェニル酢酸、桂皮酸、サリチル酸、アントラニル酸等が挙げられる。脂肪族及び芳香族エステルを形成するアルコールとしては、炭素数1~5の直鎖及び分岐鎖脂肪族アルコール及び上記の香料成分アルコール

類が挙げられる。

- [0052] ギ酸エステルとしては、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等が挙げられる。
- [0053] 酢酸エステルとしては、エチルアセテート、イソアミルアセテート（酢酸イソペンチル）、ベンジルアセテート、ヘキシルアセテート、フェニルアセテート、p-クレジルアセテート、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、アセチルオイゲノール、アセチルイソオイゲノール、o-tert-ブチルシクロヘキシルアセテート、p-tert-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、フェニルエチルアセテート、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-ペンチルテトラヒドロピラン-4-イルアセテート、プレニルアセテート、酢酸ゲラニル、メチルフェニルカルビニルアセテート等；フェニル酢酸エステルとしては、フェニルエチルフェニルアセテート、p-クレジルフェニルアセテート等が挙げられる。
- [0054] プロピオン酸エステルとしては、エチルプロピオネート、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、ベンジルプロピオネート、スチラリルプロピオネート、ヘルベトリド（フィルメニッヒ社製商品名、2-[1-(3,3-ジメチルシクロヘキシル)エトキシ]-2-メチルプロピル)プロピオネート等が挙げられる。
- [0055] 酪酸エステルとしては、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、イソアミルn-ブチレート、n-アミルn-ブチレート等；イソ酪酸エステルとしては、トリシクロデセニルイソブチレート、フェノキシエチルイソブチレート等が挙げられる。
- [0056] 吉草酸エステルとしては、メチルバレレート、エチルバレレート、ブチルバレレート、アミルバレレート、ベンジルバレレート、フェニルエチルバレレート等；ヘキサン酸エステルとしては、メチルヘキサノエート、エチルヘ

キサノエート、アリルヘキサノエート、リナリルヘキサノエート、シトロネリルヘキサノエート等が挙げられる。

[0057] ヘプタン酸エステルとしては、メチルヘプタノエート、アリルヘプタノエート等が挙げられる。

[0058] ノネン酸エステルとしては、メチル2-ノネノエート、エチル2-ノネノエート、エチル3-ノネノエート等が挙げられる。

[0059] 安息香酸エステルとしては、メチルベンゾエート、ベンジルベンゾエート、3, 6-ジメチルベンゾエート等が挙げられる。

[0060] 桂皮酸エステルとしては、メチルシンナメート、ベンジルシンナメート等が挙げられる。

[0061] サリチル酸エステルとしては、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、シクロヘキシルサリシレート、ベンジルサリシレート（サリチル酸ベンジル）等が挙げられる。

[0062] さらに、ブラシル酸エステルとしては、エチレンブラシレート等が挙げられる。

[0063] チグリン酸エステルとしては、ゲラニルチグレート、1-ヘキシルチグレート、シス-3-ヘキセニルチグレート等が挙げられる。

[0064] ジャスモン酸エステルとしては、メチルジャスモネート等；ジヒドロジャスモン酸エステルとしては、MDJ（花王株式会社製商品名、ジヒドロジャスモン酸メチル、メチル（2-ペンチル-3-オキソシクロペンチル）アセテート）等が挙げられる。

[0065] グリシド酸エステルとしては、メチル2, 4-ジヒドロキシーエチルメチルフェニルグリシデート、4-メチルフェニルエチルグリシデート等が挙げられる。

[0066] アンスラニル酸エステルとしては、メチルアンスラニレート、エチルアンスラニレート、ジメチルアンスラニレート等が挙げられる。

[0067] グリコール酸エステルとしては、アリルシクロヘキシルグリコレート等が挙げられる。

- [0068] さらにその他のエステルとしては、エチルサフラネート（ジボダン社製商品名、ジヒドロシクロゲラン酸エチル）、ポアレネート（花王株式会社製商品名、エチル-2-シクロヘキシルプロピオネート）、フルテート（花王株式会社製商品名、エチルトリシクロ[5.2.1.0^{2,6}]デカン-2-カルボキシレート）、エチルアセトアセテート、フルクトン（IFF社製商品名、エチル2-(2-メチル-1,3-ジオキサラン-2-イル)アセテート）、マンザネート（ジボダン社製商品名、エチル2-メチルペンタノエート）、エチル2-メチルブチレート、アリルシクロヘキシルプロピオネート、アリル-2-ペンチロキシグリコレート等が挙げられる。
- [0069] カーボネート類としては、リファローム（IFF社製商品名、シス-3-ヘキセニルメチルカーボネート）、ジャスマシクラット（花王株式会社製商品名、メチル-シクロオクチルカーボネート）、フロラマット（花王株式会社製商品名、エチル-2-tert-ブチルシクロヘキシルカーボネート）等が挙げられる。
- [0070] アルデヒド類としては、n-オクタナール、n-ノナナール、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、シトロネナール、シトラール、ヒドロキシシトロネナール、トリプラー（IFF社製商品名、2,4-ジメチル-3-シクロヘキセン-1-カルボキシアルデヒド）、シクロベルタール（花王株式会社製商品名、ジメチル-3-シクロヘキセニル-1-カルボキシアルデヒド）、ベンズアルデヒド、フェニルアセトアルデヒド、フェニルプロピルアルデヒド、シンナミックアルデヒド、ジメチルテトラヒドロベンズアルデヒド、ブルゲオナール（ジボダン社製商品名、3-(4-tert-ブチルフェニル)プロパナール）、リラール（IFF社製商品名、ヒドロキシマイラックアルデヒド）、ボレナールII（花王株式会社製商品名、2-シクロヘキシルプロパナール）、リリアール（ジボダン社製商品名、p-tert-ブチル- α -メ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、フロラロゾン（IFF社製商品名、3-(o-（および

p-エチルフェニル)-2, 2-ジメチルプロピオンアルデヒド)、 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、ヘリオトロピン(高砂香料工業社製商品名、3, 4-メチレンジオキシベンズアルデヒド)、ヘリオナール(IFF社製商品名、アルファ-メチル-1, 3-ベンゾジオキソール-5-プロパナール)、カントキサール(IFF社製商品名、2-メチル-3-(パラメトキシフェニル)プロパナール)、アルデヒドC-6(花王株式会社製商品名、n-ヘキサナール)等が挙げられる。

[0071] ケトン類としては、メチルヘプテノン、ジメチルオクテノン、3-オクタノン、ヘキシルシクロペンタノン、ジヒドロジャスモン、ベルートン(フィルメニッヒ社製商品名、2, 2, 5-トリメチル-5-ペンチルシクロペンタノン)、ネクタリル(ジボダン社製商品名、2-(2-(4-メチル-3-シクロヘキセン-1-イル)プロピル)シクロペンタノン)、イオノン、 β -イオノン、メチルイオノン、メチルイオノン-G、 γ -メチルイオノン、ダマスコン、 α -ダマスコン、 β -ダマスコン、 δ -ダマスコン、イソダマスコン(シムライズ社製商品名、1-(2, 4, 4-トリメチル-2-シクロヘキシル)-trans-2-ブタノン)、ダマセノン、ダイナスコン(フィルメニッヒ社製商品名、1-(5, 5-ジメチル-1-シクロヘキセン-1-イル)-4-ペンテン-1-オン)、イロン、カシュメラン(IFF社製商品名、1, 2, 3, 5, 6, 7-ヘキサヒドロ-1, 1, 2, 3, 3-ペンタメチル-4H-インデン-4-オン)、イソ・イー・スーパー(IFF社製商品名、1-(1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8-オクタヒドロ-2, 3, 8, 8-テトラメチル-2-ナフタレニル)-エタン-1-オン)、カロン(フィルメニッヒ社製商品名、7-メチル-3, 4-ジヒドロ-2H-ベンゾジオキセピン-3-オン)、カルボン、メントン、アセチルセドレン、イソロンギフォラノン、ヌートカトン、ベンジルアセトン、ラズベリーケトン、ベンゾフェノン、トナリド(PFW社製商品名、6-アセチル-1, 1, 2, 4, 4, 7-ヘキサメチルテトラヒドロナフタレン)、 β -

メチルナフチルケトン、エチルマルトール、カンファー、ムスコ、ムセノ
ン（フィルメニッヒ社製商品、3-メチル-5-シクロペンタデセン-1-
オン）、シベトン、グロバノン（シムライズ社製商品名、8-シクロヘキサ
デセノン）、メチルノニルケトン、cis-ジャスモン、パラアミルシクロヘキ
サノン（4-ペンチルシクロヘキサノン）等が挙げられる。なかでも他の香
料と調合することでフローラルな甘さを強調する観点から、イオノン、ダマ
セノン、イソ・イー・スーパー、またはγ-メチルイオノンが好ましい。

[0072] アセタール類としては、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ルアセタール、エチルアセトアセテートエチレングリコールアセタール、ボアザンブレンフォルテ（花王株式会社製商品名、エトキシメチルシクロドデシルエーテル）、トロエナン（花王株式会社製商品名、5-メチル-5-プロピル-2-（1-メチルブチル）-1, 3-ジオキサン）、フロロパール（シムライズ社製商品名、2, 4, 6-トリメチル-4-フェニル-1, 3-ジオキサン）、マグノラン（シムライズ社製商品名、2, 4-ジメチル-4, 4a, 5, 9b-テトラヒドロインデノ [1, 2-d] [1, 3] ジオキサン）等が挙げられる。

[0073] エーテル類としては、セドリルメチルエーテル、エストラゴール、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、リモネンオキサイド、ローズオキサイド、ネロールオキサイド、1, 8-シネオール、ローズフラン、アンブロキサン（花王株式会社製商品名、[3aR-（3aα, 5aβ, 9aα, 9bβ）] 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）、ハーバベル（花王株式会社製商品名、3, 3, 5-トリメチルシクロヘキシルエチルエーテル）、ガラクソリド（IFF社製商品名、ヘキサメチルヘキサヒドロシクロペンタベンゾピラン）、フェニルアセトアルデヒドジメチルアセタール、メチルイソオイゲノール等が挙げられる。

[0074] カルボン酸類としては、安息香酸、フェニル酢酸、桂皮酸、ヒドロ桂皮酸

、酪酸、2-ヘキセン酸等が挙げられる。

[0075] ラクトン類としては、アンブレットリド、 γ -デカラクトン、 δ -デカラクトン、 γ -バレロラクトン、 γ -ノナラクトン、 γ -ウンデカラクトン、 δ -ヘキサラクトン、 γ -ジャスモラクトン、ウイスキーラクトン、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、11-オキサヘキサデカノリド、ブチリデンフタリド、等が挙げられる。

[0076] ニトリル類としては、トリデセン-2-ニトリル、ゲラニルニトリル、シトロネリルニトリル、ドデカンニトリル等が挙げられる。

[0077] アミン類としては、インドール、スカトール、6-メチルキノリン、6-イソプロピルキノリン、イソブチルキノリン等が挙げられる。

[0078] シッフ塩基類としては、オーランチオール、リガントラル等が挙げられる。

[0079] また、前記式(1)で表される化合物および前記炭素数8以上14以下のアルコールを含む本発明の香料組成物は、天然精油や天然抽出物を更に含むことも好ましい。

[0080] 天然精油や天然抽出物としては、オレンジ、レモン、ライム、ベルガモット、バニラ、マンダリン、ペパーミント、スペアミント、ラベンダー、ガルバナム、カモミル、ローズマリー、ユーカリ、セージ、バジル、ローズ、ロックローズ、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、ベチバー、パチュリ、ヘイ、レモングラス、ラブダナム、グレープフルーツ、エレミオイル、ベルガモット油等の天然物のオイル、コンクリート、アブソリュート、レジノイド、オレオレジン、チンキ、浸液、バルサム等が挙げられる。

[0081] 本発明の香料組成物中、前記式(1)で表される化合物および前記炭素数8以上14以下のアルコール以外のその他の成分の合計含有量は、調合香料の種類、目的とする香気の種類及び香気の強さ等により適宜選択することができるが、本発明の香料組成物を含む組成物中、好ましくは1質量%以上、より好ましくは5質量%以上、更に好ましくは10質量%以上、そして、好

ましくは99質量%以下、より好ましくは80質量%以下、更に好ましくは70質量%以下である。

[0082] 本発明の香料組成物は、ベースとして、それ自身は匂いを持たない油剤と組み合わせることができる。このような油剤は、香料成分を均一に混合させ、製品に配合しやすく、適度な強度の香りを賦香しやすくすることができる。前記油剤の例としては、エチレングリコール、プロピレングリコール、ブチレングリコール、ジプロピレングリコール等の多価アルコール、ミリスチン酸イソプロピル、アジピン酸ジブチル、セバシン酸ジエチル等のエステル、流動パラフィン、スクワラン等の炭化水素、ポリオキシエチレンアルキルエーテル、ソルビタン脂肪酸エステル等の界面活性剤等が挙げられる。

[0083] これらのなかでも、全ての香料成分の溶解性を向上させる観点から、前記油剤としては多価アルコールおよびエステルが好ましく、ジプロピレングリコールおよびミリスチン酸イソプロピルがより好ましい。かかる油剤の含有量は、香料組成物中、好ましくは0.01質量%以上、より好ましくは1質量%以上、さらに好ましくは5質量%以上、そして、好ましくは95質量%以下、より好ましくは90質量%以下、さらに好ましくは80質量%以下である。

[0084] 本発明は、本発明の香料組成物を含有する洗浄剤組成物、本発明の香料組成物を含有する化粧料、および本発明の香料組成物を含有する繊維処理組成物も提供する。

[0085] 本発明の洗浄剤組成物としては、身体用洗浄剤組成物、衣料用洗浄剤組成物、硬質表面用洗浄剤組成物が好ましく、身体用洗浄剤組成物、衣料用洗浄剤組成物がより好ましく、衣料用洗浄剤組成物が更に好ましい。

[0086] 身体用洗浄剤組成物の例としては、皮膚用洗浄剤組成物、毛髪用洗浄剤組成物、石鹸組成物が挙げられ、皮膚用洗浄剤組成物が好ましい。

[0087] 硬質表面用洗浄剤組成物の例としては、多用途洗浄剤 (All purpose Cleaner)、食器用洗浄剤組成物が挙げられる。

[0088] 本発明の繊維処理組成物としては、柔軟剤組成物が好ましい。

- [0089] 本発明の洗浄剤組成物を除く化粧料としては、香水、乳液、化粧水、日焼け止めが好ましく、香水がより好ましい。
- [0090] 本発明の洗浄剤組成物には、本発明の香料組成物以外に、陰イオン界面活性剤を含有することが好ましく、更に非イオン界面活性剤、pH調整剤、粘度調整剤、溶媒、油剤、防腐剤、水等を配合することができる。
- [0091] 本発明の繊維処理組成物には、本発明の香料組成物以外に、陽イオン界面活性剤を含有することが好ましく、更にpH調整剤、溶媒、油剤、防腐剤、水等を配合することができる。
- [0092] 本発明の香水には、本発明の香料組成物以外に、溶媒、水等を含有することができる。
- [0093] 式(1)で表される化合物は、木様の香気を有する。この木様の香気は、わずかに土様とフローラル-ミューゲ様の側面のある、ミント及びカンファー様の香気である。この木様の香気は、更に蜜様な甘さがある香気である。さらに、式(1)で表される化合物と炭素数8以上14以下のアルコールからなる組成物は、炭素数8以上14以下のアルコールに対してナチュラル感が付与されるという、新たな印象を与えることができる。
- [0094] 従って本発明は、本発明の式(1)で表される化合物または式(1)で表される化合物と炭素数8以上14以下のアルコールからなる組成物を賦香成分として使用する方法、具体的には、香料組成物、洗浄剤組成物、化粧料又は繊維処理組成物の賦香成分として使用する方法である。前記洗浄剤組成物としては、身体用洗浄剤組成物、衣料用洗浄剤組成物、硬質表面用洗浄剤組成物が好ましく、身体用洗浄剤組成物、衣料用洗浄剤組成物がより好ましく、衣料用洗浄剤組成物が更に好ましい。前記身体用洗浄剤組成物の例としては、皮膚用洗浄剤組成物、毛髪用洗浄剤組成物、石鹸組成物が挙げられ、皮膚用洗浄剤組成物が好ましい。前記硬質表面用洗浄剤組成物の例としては、多用途洗浄剤(All purpose Cleaner)、食器用洗浄剤組成物が挙げられる。前記化粧料としては、香水が好ましい。前記繊維処理組成物としては、柔軟剤組成物が好ましい。

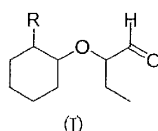
[0095] 前記使用する方法において、本発明の式（Ⅰ）で表される化合物または式（Ⅰ）で表される化合物と炭素数8以上14以下のアルコールからなる組成物は、洗浄剤組成物、化粧品又は柔軟剤組成物に対して、好ましくは0.0001質量%以上、より好ましくは0.001質量%以上そして、好ましくは30質量%以下、より好ましくは20質量%以下、さらに好ましくは10質量%以下、1質量%以下、より好ましくは0.1質量%以下の含有量で使用する。この量で使用するにより、香料素材としてこの香料組成物を他の成分と処方すると、木様の香気が付与されるという、新たな印象を付与することができる。

[0096] 前記使用する方法において、本発明の香料組成物は、それ自身は匂いを持たない油剤と組み合わせてもよい。前記油剤については、前記香料組成物において説明したものと同様である。また、前記使用する方法において、その他の香料として、通常用いられる他の香料成分や、所望組成の調合香料を含んでもよい。そのような、その他の香料としては、前記香料組成物において説明したものと同様である。

[0097] 本発明は、以下の態様を含む。

<1> 式（Ⅰ）で表される化合物。

[0098] [化10]



[0099] [前記式（Ⅰ）中、

Rは炭素数1以上5以下のアルキル基である]

[0100] <2> Rはt-ブチル基である、<1>に記載の調香剤。

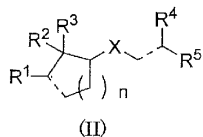
[0101] <3> <1>又は<2>に記載の化合物を含む香料組成物。

[0102] <4> 前記香料組成物中、前記式（Ⅰ）の化合物の含有量は、0.05質量%以上30質量%以下である、<1>～<3>のいずれかひとつに記載の香料組成物。

- [0103] <5> 前記香料組成物中、前記式(1)の化合物の含有量は、0.5質量%以上20質量%以下である、<1>~<4>のいずれかひとつに記載の香料組成物。
- [0104] <6> 前記香料組成物中、前記式(1)の化合物の含有量は、1質量%以上10質量%以下である、<1>~<5>のいずれかひとつに記載の香料組成物。
- [0105] <7> 炭素数8以上14以下のアルコールを更に含む、<3>~<6>のいずれかひとつに記載の香料組成物。
- [0106] <8> 炭素数8以上14以下のアルコールがアルコール系香料化合物である、<7>に記載の香料組成物。
- [0107] <9> 炭素数8以上14以下のアルコールがモノアルコールである、<7>または<8>に記載の香料組成物。
- [0108] <10>炭素数8以上14以下のアルコールが、バクダノール(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)、シンナミックアルコール、シトロネロール、ゲラニオール、フェネチルアルコール、ジヒドロミルセノール、サンダルマイソールコア(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)、アンバーコア(1-(2-tert-ブチルシクロヘキシルオキシ)-2-ブタノール)、リナロール、ミルセノール、ネロール、テトラヒドロリナロール、テトラヒドロゲラニオール、ヒドロキシシトロネロール、ターピネオール、イソプレゴール、ノポール、チモール、オイゲノール、及び3-メチル-5-フェニルペンタノールからなる群から選ばれる、<7>~<9>のいずれかひとつに記載の香料組成物。
- [0109] <11>炭素数8以上14以下のアルコールが、バクダノール、サンダルマイソールコア、及びアンバーコアからなる群から選ばれる一つ以上である、<7>~<10>のいずれかひとつに記載の香料組成物。
- [0110] <12>炭素数8以上14以下のアルコールが、式(11)で表される化

化合物を含む<7>に記載の香料組成物。

[0111] [化11]



[0112] [前記式 (I) 中、

R^1 および R^2 は、それぞれ独立して、水素原子またはメチル基であり、

R^3 は、メチル基、エチル基、 n -プロピル基、イソプロピル基、または t -ブチル基であり、

R^4 は、メチル基またはエチル基であり、

R^5 は、ヒドロキシ基またはヒドロキシメチル基であり、

X は、 $-CH_2-$ または $-O-$ であり、

n は、1または2であり、

破線は、それぞれ独立して、単結合または二重結合である。]

[0113] <13> 前記炭素数8以上14以下のアルコールは、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、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、及び1-(2- t -ブチルシクロヘキシルオキシ)-2-ブタノールからなる群から選ばれる一つ以上である<7>~<10>のいずれかひとつに記載の香料組成物。

[0114] <14> 炭素数8以上14以下のアルコールに対する式(I)で表される化合物の質量比[式(I)で表される化合物/炭素数8以上14以下のアルコール]が0.001以上20以下である、<7>~<13>のいずれかひとつに記載の香料組成物。

[0115] <15> 炭素数8以上14以下のアルコールに対する式(I)で表される化合物の質量比[式(I)で表される化合物/炭素数8以上14以下のアルコール]が0.01以上10以下である、<7>~<14>のいずれかひとつに記載の香料組成物。

- [0116] <16> 炭素数8以上14以下のアルコールに対する式(1)で表される化合物の質量比〔式(1)で表される化合物／炭素数8以上14以下のアルコール〕が0.05以上5以下である、<7>～<15>のいずれかひとつに記載の香料組成物。
- [0117] <17> 炭素数8以上14以下のアルコールに対する式(1)で表される化合物の質量比〔式(1)で表される化合物／炭素数8以上14以下のアルコール〕が0.07以上1以下である、<7>～<16>のいずれかひとつに記載の香料組成物。
- [0118] <18> 香料組成物中、前記式(1)で表される化合物および前記炭素数8以上14以下のアルコール以外であって、好ましくはアルコール、フェノール、エステル、カーボネート、アルデヒド、ケトン、アセタール、エーテル、ラクトン、ニトリル、及びアミンのうち1種以上を更に含む、<7>～<17>のいずれかひとつに記載の香料組成物。
- [0119] <19> 前記式(1)で表される化合物および前記炭素数8以上14以下のアルコール以外であって、その他の成分の合計含有量、好ましくはアルコール、フェノール、エステル、カーボネート、アルデヒド、ケトン、アセタール、エーテル、ラクトン、ニトリル、及びアミンの合計含有量が、1質量%以上99質量%以下である、<7>～<18>のいずれかひとつに記載の香料組成物。
- [0120] <20> 前記式(1)で表される化合物および前記炭素数8以上14以下のアルコール以外であって、その他の成分の合計含有量、好ましくはアルコール、フェノール、エステル、カーボネート、アルデヒド、ケトン、アセタール、エーテル、ラクトン、ニトリル、及びアミンの合計含有量が5質量%以上80質量%以下である、<7>～<19>のいずれかひとつに記載の香料組成物。
- [0121] <21> 前記式(1)で表される化合物および前記炭素数8以上14以下のアルコール以外であって、その他の成分の合計含有量、好ましくはアルコール、フェノール、エステル、カーボネート、アルデヒド、ケトン、アセ

タール、エーテル、ラクトン、ニトリル、及びアミンの合計含有量が10質量%以上70質量%以下である、＜7＞～＜20＞のいずれかひとつに記載の香料組成物。

[0122] ＜22＞ 香料組成物中、前記式（I）で表される化合物および前記炭素数8以上14以下のアルコール以外であって、好ましくは天然精油又は天然抽出物をさらに含む、＜7＞～＜17＞のいずれかひとつに記載の香料組成物。

[0123] ＜23＞ ＜3＞～＜22＞のいずれかひとつに記載の香料組成物を含む化粧料。

[0124] ＜24＞ ＜3＞～＜22＞のいずれかひとつに記載の香料組成物を含む洗浄剤組成物。

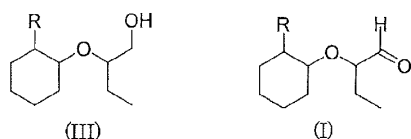
[0125] ＜25＞ ＜3＞～＜22＞のいずれかひとつに記載の香料組成物を含む繊維処理剤組成物。

[0126] ＜26＞ ＜1＞または＜2＞に記載の化合物を賦香成分として使用する方法。

[0127] ＜27＞ ＜1＞または＜2＞に記載の化合物と炭素数8以上14以下のアルコールとからなる組成物を賦香成分として使用する方法。

[0128] ＜28＞ 式（III）の化合物を酸化することにより式（I）の化合物を得る＜1＞に記載の化合物の製造方法。

[0129] [化12]



[0130] [前記式（I）および（III）中、
Rは炭素数1以上5以下のアルキル基である]

[0131] 以下の実施例において、「%」は特記しない限り「質量%」である。また、触媒の質量は乾燥状態での質量である。

[0132] ＜ガスクロマトグラフィーの装置及び分析条件＞

GC装置：アジレント・テクノロジー株式会社製7890B、水素炎イオン化型検出器

[0133] カラム：収率を分析する場合は、DB-1（キャピラリーカラム、100%ジメチルポリシロキサン、内径0.25mm、長さ30m、膜厚0.25μm、アジレント・テクノロジー株式会社製）を用いた。

[0134] シス体およびトランス体を分析する場合は、DB-WAX（キャピラリーカラム、ポリエチレングリコール、内径0.25mm、長さ30m、膜厚0.25μm、アジレント・テクノロジー株式会社製）を用いた。

[0135] キャリアガス：He、1.5mL/min

注入条件：300℃、スプリット比100/1

打ち込み量：1μL

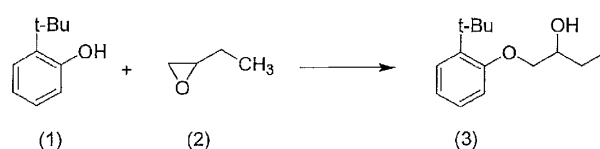
検出条件：FID方式、300℃

カラム温度条件：80℃から出発し、10℃/分の速度で300℃まで昇温した。その後、300℃10分間保持した。

[0136] [製造例1]

1-(2-tert-ブチルフェニルオキシ)-2-ブタノールの製造

[0137] [化13]

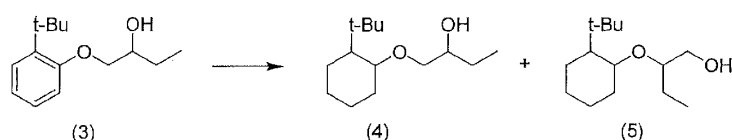


[0138] ジムロートと滴下ロートをつけた1リットル丸底フラスコに、窒素気流下、2-tert-ブチルフェノール（1）（富士フィルム和光純薬工業株式会社製、350g）と48%水酸化ナトリウム水溶液（関東化学株式会社製）35gを加え、80℃に加熱した。これに1,2-ブチレンオキシド（2）（東京化成工業株式会社製、176g）を約2時間で滴下し、その後80℃で5時間攪拌した。反応混合物を冷却後、下層の水酸化ナトリウム水溶液を有機層と分離し、前記有機層の蒸留を行い、収率96%で1-(2-tert-ブチルフェニルオキシ)-2-ブタノール（3）を得た。

[0139] [製造例 2]

1-(2-tert-ブチルシクロヘキシルオキシ)-2-ブタノール (4) および 2-(2-tert-ブチルシクロヘキシルオキシ)-1-ブタノール (5) の混合物の製造

[0140] [化14]



[0141] 500 ml オートクレーブに、製造例 1 で得られた 1-(2-tert-ブチルフェニルオキシ)-2-ブタノール (3) (250 g)、及び活性炭担持パラジウム触媒 (エヌ・イー ケムキャット株式会社製、商品名：S タイプ、50% 含水晶、パラジウム担持量 2%、4.75 g)、活性炭担持ルテニウム触媒 (エヌ・イー ケムキャット株式会社製、50% 含水晶、ルテニウム担持量 5%、0.25 g) を加え、水素圧 2.0 MPa、190℃ で 6 時間反応を行った。

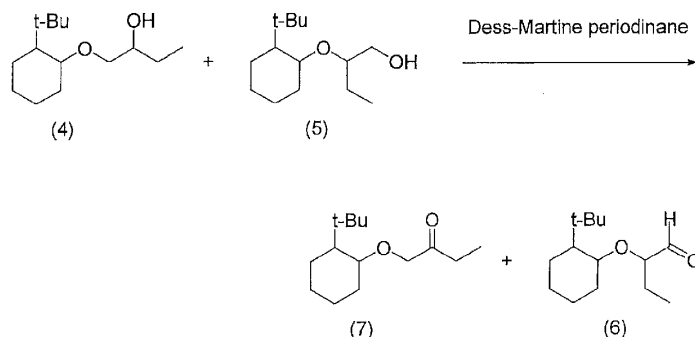
[0142] 反応終了後、触媒を濾過してろ液の蒸留を行うことにより、収率 25% で 1-(2-tert-ブチルシクロヘキシルオキシ)-2-ブタノール (4) および 2-(2-tert-ブチルシクロヘキシルオキシ)-1-ブタノール (5) の混合物を得た。生成物をガスクロマトグラフィーで分析した結果、1-(2-tert-ブチルシクロヘキシルオキシ)-2-ブタノール (4) と 2-(2-tert-ブチルシクロヘキシルオキシ)-1-ブタノール (5) の質量比は、(4) : (5) = 75 : 25 であった。

[0143] [実施例 1]

2-(2-tert-ブチルシクロヘキシルオキシ)-ブタナール (6) の製造

[0144]

[化15]



[0145] 製造例2で得られた1-(2-*t*-ブチルシクロヘキシルオキシ)-2-ブタノール(4)および2-(2-*t*-ブチルシクロヘキシルオキシ)-1-ブタノール(5)の混合物158gを20段精留塔を用いて還流比20にて精留することにより、収率50%にて化合物(4)と化合物(5)の質量比が31:69の1-(2-*t*-ブチルシクロヘキシルオキシ)-2-ブタノール(4)および2-(2-*t*-ブチルシクロヘキシルオキシ)-1-ブタノール(5)の混合物を得た。

[0146] 得られた1-(2-*t*-ブチルシクロヘキシルオキシ)-2-ブタノール(4)および2-(2-(*t*-ブチルシクロヘキシルオキシ)-1-ブタノール(5)の混合物(化合物(4)と化合物(5)の質量比は31:69である)(1g)をジクロロメタン(43.8mL)に溶解し、0℃にてDess-Martinペルヨージナン(2.2g)を加えた。10分後、冷却浴を取り外し、反応混合物を室温まで温め、30分攪拌し反応を行った。

[0147] 後処理として反応混合物へ飽和チオ硫酸ナトリウム水溶液を加えて反応を停止させた。反応混合物をジエチルエーテルで抽出し、有機相を硫酸ナトリウムで乾燥し、硫酸ナトリウムをろ過した後、得られたろ液から溶媒を留去して、2-(2-*t*-ブチルシクロヘキシルオキシ)ブタナール(6)と1-(2-*t*-ブチルシクロヘキシルオキシ)ブタン-2-オン(7)との混合物を得た。

[0148] 得られた2-(2-*t*-ブチルシクロヘキシルオキシ)ブタナール(6)

と1-(2-tert-ブチルシクロヘキシルオキシ)ブタン-2-オン(7)の混合物に亜硫酸水素ナトリウム水溶液(100 mL)を添加し、得られた水溶液を室温(25℃)で30分攪拌した。反応混合物をヘキサン(50 mL)にて抽出を行った後、分離された水相に1 mol/Lの水酸化ナトリウム溶液をpH 10になるまでゆっくり滴下した。室温(25℃)にて水相を12時間攪拌後、ジエチルエーテル(100 mL)にて抽出し、有機相を硫酸ナトリウムで乾燥し、硫酸ナトリウムをろ過した後、有機相から溶媒を減圧留去して粗生成物を得た。得られた粗生成物をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製することで、収率77%にて2-(2-tert-ブチルシクロヘキシルオキシ)ブタナール(6)を得た。

[0149] 2-(2-tert-ブチルシクロヘキシルオキシ)ブタナール(6) (ジアステレオマー混合物)

$^1\text{H-NMR}$ (400 MHz, CDCl_3) : δ = 9.75 (s, 0.5 H), 9.68 (s, 0.5 H), 3.96 (m, 1 H), 3.60 (m, 1 H), 3.25 (m, 1 H), 2.06~1.56 (m, 9 H), 1.56~1.19 (m, 4 H), 1.03 (s, 9 H)

$^{13}\text{C-NMR}$ (100 MHz, CDCl_3) : δ = 205.73, 204.82, 84.34, 82.50, 81.50, 79.74, 52.02, 51.51, 33.27, 31.10, 29.35, 29.28, 28.66, 28.56, 28.47, 26.56, 26.48, 25.82, 25.79, 24.44, 24.31, 24.22, 24.11, 9.22

IR (neat) : 2931, 2862, 1731, 1078, 1013 cm^{-1}

[0150] [官能評価]

実施例1で得られた2-(2-tert-ブチルシクロヘキシルオキシ)ブタナール(6)の匂いと調合香料中での効果を専門パネラー3名で評価した。評価は匂い試験紙(大文字洋紙製、150 mm×7 mm)を用いて行い、匂い試験紙の先端に実施例1の2-(2-tert-ブチルシクロヘキシルオキシ)ブ

タナール（６）を賦香して、室内にて評価を行った。官能評価は匂いの特性の観点から行った。官能評価において専門パネラー３名が感じられた香り全体の質や特徴に関しても記述した。

[0151] [実施例１の評価]

[２－（２－ｔ－ブチルシクロヘキシルオキシ）ブタナール（６）の匂い評価]

実施例１の２－（２－ｔ－ブチルシクロヘキシルオキシ）ブタナール（６）は、わずかに土様とフローラル-ミューゲ様の側面のある、ミント及びカンファー様と、蜜様な甘さがある木様の香気を持つことが確認された。

[0152] [実施例２：調合例１]

下記表１の組成のフローラル・ローズ香調の調合香料９５０質量部に、実施例１で得られた２－（２－ｔ－ブチルシクロヘキシルオキシ）ブタナール（６）を５０質量部加えた組成物（実施例２）、またはプロピレングリコールを５０質量部加えた組成物（比較例１）をそれぞれ調製し、官能評価を実施した。

[0153] なお、表１中、炭素数８以上１４以下のアルコールは、バグダノール、シンナミックアルコール、シトロネロール、ゲラニオール、およびフェネチルアルコールである。実施例２中、これら炭素数８以上１４以下のアルコールの合計量は、４１．５質量％であり、式（１）の化合物（２－（２－ｔ－ブチルシクロヘキシルオキシ）ブタナール（６））の量は５質量％である。また、式（１）で表される化合物と、炭素数８以上１４以下のアルコールの質量比〔式（１）で表される化合物／炭素数８以上１４以下のアルコール〕は、０．１２であった。

[0154]

[表1]

<フローラルローズ調合香料組成>

バクダノール（I F F社製） ^{*1)}	10質量部
サリチル酸ベンジル	50質量部
シンナミックアルコール [*]	5質量部
シトロネロール [*]	100質量部
シクロペンタデカノリド	50質量部
ダマセノン	0.5質量部
フロローサ（ジボダン社製） ²⁾	50質量部
ゲラニオール [*]	100質量部
酢酸ゲラニル	15質量部
ヘリオトロピン（高砂香料工業社製） ³⁾	10質量部
イソ・イー・スーパー（I F F社製） ⁴⁾	50質量部
MD J（花王株式会社製） ⁵⁾	100質量部
メチルイソオイゲノール	5質量部
フェネチルアルコール [*]	200質量部
ジプロピレングリコール	204.5質量部
合計	950質量部

[0155] 表1中、*は炭素数8以上14以下のアルコールである。

1) バクダノール：I F F社製商品名、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) フロローサ：ジボダン社製商品名、4-メチル-2-(2-メチルプロピル) テトラヒドロ-2H-4-ピラノール

3) ヘリオトロピン：高砂香料工業社製商品名、3, 4-メチレンジオキシベンズアルデヒド

4) イソ・イー・スーパー：I F F社製商品名、1-(1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8-オクタヒドロ-2, 3, 8, 8-テトラメチル-2-ナフタレニル)-エタン-1-オン

5) MD J：花王株式会社製商品名、メチル-(2-ペンチル-3-オキ

ソシクロペンチル) アセテート

[0156] [表2]

<調合例組成>

	表1のフローラルー ローズ調合香料	実施例1の化 合物(6)* ¹	ジプロピレン グリコール	合計
実施例2	950質量部	50質量部	—	1000質量部
比較例1	950質量部	—	50質量部	1000質量部

*1: 2-(2-tert-ブチルシクロヘキシルオキシ)ブタナール(6)

[0157] 専門パネラー3名による官能評価の結果、実施例2の香料組成物は比較例1の香料組成物と比較して、前記調合香料の香り全体に調和しナチュラル感を増強することで、前記調合香料の香りをより天然に近い香りとすることが見出された。

[0158] [実施例3: 調合例2]

下記表3の組成のフローラルーオリエンタル香調の調合香料920質量部に、実施例1で得られた2-(2-tert-ブチルシクロヘキシルオキシ)ブタナール(6)を80質量部加えた組成物(実施例3)、およびジプロピレングリコールを80質量部加えた組成物(比較例2)をそれぞれ調製し、官能評価を実施した。

[0159] なお、表3中、炭素数8以上14以下のアルコールは、ジヒドロミルセノール、サンダルマイソールコア、およびアンバーコアである。実施例3中、これら炭素数8以上14以下のアルコールの合計量は、12.9質量%であり、式(1)の化合物(2-(2-tert-ブチルシクロヘキシルオキシ)ブタナール(6))は5質量%である。また、式(1)で表される化合物と、炭素数8以上14以下のアルコールの質量比[式(1)で表される化合物/炭素数8以上14以下のアルコール]は、0.38であった。

[0160]

[表3]

＜フローラルーオリエンタル調合香料組成＞

ベルガモット油	80質量部
ジヒドロミルセノール*	25質量部
アリルー2ーペンチロキシグリコレート	5質量部
メチルフェニルカルビニルアセテート	10質量部
イランベース	50質量部
ローズベース	50質量部
ジャスミンベース	100質量部
MD J（花王株式会社製） ⁵⁾	130質量部
メチルイオノンガンマ	150質量部
サンダルマイソールコア（花王株式会社製） ^{*6)}	50質量部
トナリド（PFWアロマケミカルズ社製） ⁷⁾	100質量部
ベンジルサリシレート	50質量部
クマリン	50質量部
バニリン	20質量部
アンバーベース（アンバーコア）*	50質量部
合計	920質量部

[0161] 表3中、*は炭素数8以上14以下のアルコールである。

5) MD J：花王株式会社製商品名、メチルー（2ーペンチルー3ーオキソシクロペンチル）アセテート

6) サンダルマイソールコア：花王株式会社製商品名、2ーメチルー4-(2, 2, 3-トリメチルー3-シクロペンテンー1ーイル)ー2ーブテンー1ーオール

7) トナリド：PFWアロマケミカルズ社製商品名、1ー（3, 5, 5, 6, 8, 8ーヘキサメチルー5, 6, 7, 8ーテトラヒドロナフタレンー2ーイル）エタンー1ーオン

[0162]

[表4]

＜調合例組成＞

	表3のフローラルー オリエンタル香調 の調合香料	実施例1の化 合物(6)*1	ジプロピレン グリコール	合計
実施例3	920質量部	80質量部	－	1000質量部
比較例2	920質量部	－	80質量部	1000質量部

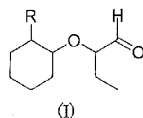
* 1:2－(2－t－ブチルシクロヘキシルオキシ)ブタナール(6)

- [0163] 専門パネラー3名による官能評価の結果、実施例3の香料組成物は比較例2の香料組成物と比較して、前記調合香料の香りに調和し、フローラルーオリエンタル調の調合香料の香りの甘さを強調することが見出された。
- [0164] 本発明の式(1)で表される化合物および式(1)で表される化合物を含む香料組成物は、木様の香気を持つ。この木様の香気は、わずかに土様とフローラルーミューゲ様の側面のある、ミント及びカンファー様の香気である。この木様の香気は、更に蜜様な甘さがある香気である。

請求の範囲

[請求項1] 式（Ⅰ）で表される化合物。

[化16]



[前記式（Ⅰ）中、

Rは炭素数1以上5以下のアルキル基である]

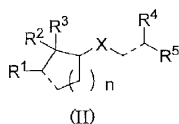
[請求項2] Rはt-ブチル基である、請求項1記載の化合物。

[請求項3] 請求項1または2記載の化合物を含む香料組成物。

[請求項4] 炭素数8以上14以下のアルコールを更に含む請求項3に記載の香料組成物。

[請求項5] 前記炭素数8以上14以下のアルコールが、式（Ⅱ）で表される化合物を含む請求項4に記載の香料組成物。

[化17]



[前記式（Ⅱ）中、

R¹およびR²は、それぞれ独立して、水素原子またはメチル基であり、

R³は、メチル基、エチル基、n-プロピル基、イソプロピル基、またはt-ブチル基であり、

R⁴は、メチル基またはエチル基であり、

R⁵は、ヒドロキシ基またはヒドロキシメチル基であり、

Xは、-CH₂-または-O-であり、

nは、1または2であり、

破線は、それぞれ独立して、単結合または二重結合である。]

[請求項6] 前記炭素数8以上14以下のアルコールが、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、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、及び1-(2-tert-ブチルシクロヘキシルオキシ)-2-ブタノールからなる群から選択される一つ以上である請求項4又は5に記載の香料組成物。

[請求項7] 炭素数8以上14以下のアルコールに対する式(1)で表される化合物の質量比[式(1)で表される化合物/炭素数8以上14以下のアルコール]が0.001以上20以下である、請求項4～6いずれか一項に記載の香料組成物。

[請求項8] 前記式(1)で表される化合物および前記炭素数8以上14以下のアルコール以外であって、アルコール、フェノール、エステル、カーボネート、アルデヒド、ケトン、アセタール、エーテル、ラクトン、ニトリル、およびアミンのうち1種以上を更に含む請求項4～7のいずれか一項に記載の香料組成物。

[請求項9] 請求項3～8のいずれか一項に記載の香料組成物を含む化粧料。

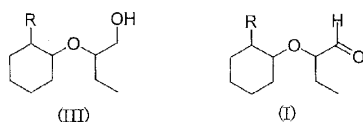
[請求項10] 請求項3～8のいずれか一項に記載の香料組成物を含む洗浄剤組成物。

[請求項11] 請求項3～8のいずれか一項に記載の香料組成物を含む繊維処理剤組成物。

[請求項12] 請求項1または2に記載の化合物を賦香成分として使用する方法。

[請求項13] 式(111)の化合物を酸化することにより式(1)の化合物を得る請求項1に記載の化合物の製造方法。

[化18]



[前記式(1)および(111)中、

Rは炭素数1以上5以下のアルキル基である]