



(12)发明专利申请

(10)申请公布号 CN 106716482 A

(43)申请公布日 2017.05.24

(21)申请号 201580051681.7

(74)专利代理机构 上海专利商标事务所有限公司 31100

(22)申请日 2015.09.25

代理人 陈文青 樊云飞

(30)优先权数据

62/055,844 2014.09.26 US

62/143,862 2015.04.07 US

(51)Int.Cl.

G06Q 99/00(2006.01)

A61L 9/01(2006.01)

C08K 5/00(2006.01)

G11D 3/50(2006.01)

(85)PCT国际申请进入国家阶段日
2017.03.24

G06F 17/10(2006.01)

G06F 19/00(2011.01)

(86)PCT国际申请的申请数据

PCT/US2015/052088 2015.09.25

(87)PCT国际申请的公布数据

W02016/049393 EN 2016.03.31

(71)申请人 宝洁公司

地址 美国俄亥俄州

(72)发明人 J·A·荷林谢德 P·J·玛德哈弗
D·T·斯坦顿

权利要求书2页 说明书19页

(54)发明名称

制备发香产品的方法

(57)摘要

本发明涉及设计和制备发香产品和用于产品中的香料原料的方法以及通过此类方法选择的香料原料及其用途。

1. 一种方法,所述方法包括:

- a.) 使用通过数学建模确定的恶臭减少值来选择一种或多种香料原料;
b.) 混合和/或处理所述一种或多种香料原料与一种或多种附加材料以形成产品。

2. 根据权利要求1所述的方法,其中所述产品为消费产品。

3. 根据前述权利要求中任一项所述的方法,其中所述数学建模包括选自以下的技术:多元线性回归、基因功能方法、广义模拟退火、主成分回归、非线性回归、潜结构投影回归、神经网络、支持向量机、逻辑回归、岭回归、群集分析、判别分析、决策树、近邻分类器、分子相似性分析、以及它们的组合,优选地,所述数学建模包括选自以下的技术:多元线性回归、基因功能方法、广义模拟退火、主成分回归、非线性回归、潜结构投影回归、神经网络、支持向量机、逻辑回归、岭回归、以及它们的组合,更优选地,所述数学建模包括选自以下的技术:多元线性回归、潜结构投影回归、神经网络、以及它们的组合,最优选地,所述数学建模包括多元线性回归。

4. 根据前述权利要求中任一项所述的方法,其中所述数学建模包括将分子描述符输入到多元线性回归公式中。

5. 根据前述权利要求中任一项所述的方法,其中所述数学建模提供恶臭减少值,所述恶臭减少值为摩尔响应倒数的对数。

6. 根据前述权利要求中任一项所述的方法,其中所述数学建模足够准确,以提供至少0.5,优选0.5至10,更优选1至10,最优选1至5的恶臭减少值。

7. 根据前述权利要求中任一项所述的方法,其中所述数学建模足够准确,以提供通用恶臭减少值。

8. 根据前述权利要求中任一项所述的方法,其中所述一种或多种附加材料选自表面活性剂、颜色护理聚合物、沉积助剂、表面活性剂促进聚合物、pH调节剂、产品颜色稳定剂、防腐剂、溶剂、助洗剂、螯合剂、染料转移抑制剂、分散剂、酶和酶稳定剂、催化物质、漂白剂、漂白活化剂、聚合物分散剂、粘土污垢去除/抗再沉淀剂、增白剂、抑泡剂、染料、紫外线吸收剂、香料和香料递送体系、结构增弹剂、增稠剂/结构剂、织物软化剂、载体、水溶助长剂、低聚胺、加工助剂、调色剂、颜料以及它们的混合物。

9. 根据权利要求2-8中任一项所述的方法,其中所述消费产品选自婴儿护理品、美容护理品、织物和家居护理品、家庭护理品、女性护理品、健康护理品、小吃和/或饮料产品或装置。

10. 根据前述权利要求中任一项所述的方法,其中所述数学方法使用以下公式中的一个或多个:

$$a) \text{MORV} = -8.5096 + 2.8597 \times (\text{d xp9}) + 1.1253 \times (\text{knotpv}) - 0.34484 \times (\text{e1C202}) - 0.00046231 \times (\text{idw}) + 3.3509 \times (\text{idcbar}) + 0.11158 \times (\text{n2pag22});$$

$$b) \text{MORV} = -5.2917 + 2.1741 \times (\text{dxvp5}) - 2.6595 \times (\text{dxvp8}) + 0.45297 \times (\text{e1C2C2d}) - 0.6202 \times (\text{c1C202}) + 1.3542 \times (\text{CdCH2}) + 0.68105 \times (\text{CaasC}) + 1.7129 \times (\text{idcbar});$$

$$c) \text{MORV} = -0.0035 + 0.8028 \times (\text{SHCsatu}) + 2.1673 \times (\text{xvp7}) - 1.3507 \times (\text{c1C1C3d}) + 0.61496 \times (\text{c1C102}) + 0.00403 \times (\text{idc}) - 0.23286 \times (\text{nd2}); \text{和}$$

$$d) \text{MORV} = -0.9926 - 0.03882 \times (\text{Sd0}) + 0.1869 \times (\text{Ssp30H}) + 2.1847 \times (\text{xp7}) + 0.34344 \times (\text{e1C302}) - 0.45767 \times (\text{c1C2C3}) + 0.7684 \times (\text{CKetone}).$$

11. 一种通过根据前述权利要求中任一项所述的方法制备的消费产品。

制备发香产品的方法

技术领域

[0001] 本发明涉及设计和制备发香产品和用于产品中的香料原料的方法以及通过此类方法选择的香料原料及其用途。

背景技术

[0002] 通常采用经验方法或基本建模方法来设计和/或配制发香产品。此类方法耗时、昂贵并且经验方法一般不产生最优的设计/配方,因为并非所有的组分和参数都能被考虑到。此外,此类方法的方面可能受到现有组分的限制。因此,需要有效的和高效的方法来克服此类方法的缺点。本文所述的建模体系满足了上述需要,因为它们可用于确定可用于制备新型和优异发香产品的香料原料的恶臭减少能力。此外,此类建模体系更快并且更有效。

发明内容

[0003] 本发明涉及设计和制备发香产品和用于产品中的香料原料的方法以及通过此类方法选择的香料原料及其用途。

具体实施方式

[0004] 定义

[0005] 如本文所用,“MORV”是指恶臭减少值。

[0006] 如本文所用,通用恶臭减少值是指对于相应的材料,所有四个MORV公式均获得至少0.5的值。

[0007] 如本文所用,“产品”是指香料递送体系和/或消费产品。

[0008] 除非另外指明,如本文所用,“消费品”包括制品、婴儿护理品、美容护理品、织物和家用护理品、家庭护理品、女性护理品、保健护理品、小吃和/或饮料产品或旨在以出售形式被使用或消费且不旨在用于此后的商业制造或修改的装置。此类产品包括但不限于家居装饰品、电池、尿布、围兜、擦拭物;涉及处理毛发(人、狗、和/或猫)的产品和/或方法,包括漂白、着色、染色、调理、用洗发剂洗发、定型;除臭剂和止汗剂;个人清洁用品;化妆品;皮肤护理,包括施涂膏霜、洗剂和供消费者使用的其它局部施用产品;以及剃刮产品、涉及处理织物、硬质表面和在织物区域中的任何其它表面的产品和/或方法、以及家居护理,包括:空气护理、汽车护理、盘碟洗涤、织物调理(包括柔化)、衣物洗涤、衣物洗涤和漂洗添加剂和/或护理、硬质表面清洁和/或处理、以及供消费者或机构使用的其它清洁产品;涉及卫生纸、面巾纸、纸帕、和/或纸巾的产品和/或方法;棉塞、妇女卫生巾;涉及口腔护理的产品和/或方法,包括牙膏、牙胶、洗牙液、义齿粘合剂、牙齿美白剂;非处方保健产品,包括咳嗽和感冒药物、止痛药、宠物保健和营养品、以及水纯化产品;旨在主要供在常规膳食之间消费或作为膳食补充的加工食物产品(非限制性示例包括炸薯片、未经发酵的玉米片、爆花用玉米、咸饼干、玉米片、谷类食物棒、蔬菜脆片或松脆片、什锦小吃、杂锦小吃、杂粮片、薄脆饼干小吃、干酪小吃、炸猪皮、玉米小吃、粒状小吃、挤出小吃和百吉饼);以及咖啡和清洁和/或处

理组合物。

[0009] 除非另外指明,如本文所用,术语“清洁和/或处理组合物”包括片剂、颗粒状或粉末状多功能或“重垢型”洗涤剂,尤其是清洁洗涤剂;液体、凝胶或糊剂状的多功能洗涤剂,尤其是所谓重垢液体型;液体精细织物洗涤剂;手洗餐具洗涤剂或轻垢型餐具洗涤剂,尤其是高起泡型的那些;机洗餐具洗涤剂,包括各种用于家用或公共机构用途的片剂、颗粒状、液体和漂洗助剂型;液体清洁剂和消毒剂,包括抗菌手洗型、洗涤皂、漱口水、假牙清洁剂、汽车或地毯清洗剂、浴室清洁剂;洗发剂和护发液;沐浴凝胶和泡沫浴液和金属清洁剂;以及清洁辅剂诸如漂白添加剂和“去污棒”或预处理型。

[0010] 如本文所用,术语“区域”包括纸制品、织物、衣服和硬质表面。

[0011] 如本文所用,当用于权利要求中时,冠词“一个”和“一种”被理解为是指一种或多种受权利要求书保护的或所述的物质。

[0012] 除非另有说明,否则所有组分或组合物含量均涉及那个组分或组合物的活性物质含量,并且不包括可能存在于市售来源中的杂质,例如残余溶剂或副产物。

[0013] 除非另外指明,所有百分比和比率均按重量计。除非另外指明,所有百分比和比率均基于总组合物计。

[0014] 应当理解,在本说明书中给出的每一最大数值限度包括每一更低数值限度,如同该更低数值限度在本文中也明确地表示。在本说明书中给出的每一最小数值限度将包括每一更高数值限度,如该更高数值限度在本文中也明确地表示。在本说明书中给出的每一数值范围将包括落在该较大数值范围内的每一更窄的数值范围,如该更窄的数值范围在本文中也明确地表示。

[0015] 产品

[0016] 本发明公开了一种方法,所述方法包括:

[0017] a.) 使用通过数学建模确定的恶臭减少值来选择一种或多种香料原料;

[0018] b.) 混合和/或处理所述一种或多种香料原料与一种或多种附加材料以形成产品。

[0019] 优选地,所述产品为消费产品。

[0020] 优选地,所述数学建模包括选自以下的技术:多元线性回归、基因功能方法、广义模拟退火、主成分回归、非线性回归、潜结构投影回归、神经网络、支持向量机、逻辑回归、岭回归、群集分析、判别分析、决策树、近邻分类器、分子相似性分析、以及它们的组合。

[0021] 优选地,所述数学建模包括选自以下的技术:多元线性回归、基因功能方法、广义模拟退火、主成分回归、非线性回归、潜结构投影回归、神经网络、支持向量机、逻辑回归、岭回归、以及它们的组合。

[0022] 优选地,所述数学建模包括选自以下的技术:多元线性回归、潜结构投影回归、神经网络、以及它们的组合。

[0023] 优选地,所述数学建模包括多元线性回归。

[0024] 优选地,所述数学建模包括将分子描述符输入到线性回归公式中。

[0025] 优选地,所述数学建模提供恶臭减少值,其为摩尔响应倒数的对数。

[0026] 优选地,所述数学建模足够准确,以提供至少0.5,优选0.5至约10,更优选约1至约10,最优选约1至约5的恶臭减少值。

[0027] 优选地,所述数学建模足够准确,以提供通用恶臭减少值。

[0028] 优选地,所述数学方法采用以下公式中的一个或多个:

[0029] a) $MORV = -8.5096 + 2.8597 \times (d_{xp9}) + 1.1253 \times (knot_{pv}) - 0.34484 \times (e_{1C202}) - 0.00046231 \times (idw) + 3.3509 \times (idcbar) + 0.11158 \times (n_{2pag22})$;

[0030] b) $MORV = -5.2917 + 2.1741 \times (d_{xvp5}) - 2.6595 \times (d_{xvp8}) + 0.45297 \times (e_{1C2C2d}) - 0.6202 \times (c_{1C202}) + 1.3542 \times (CdCH2) + 0.68105 \times (CaasC) + 1.7129 \times (idcbar)$;

[0031] c) $MORV = -0.0035 + 0.8028 \times (SHCsatu) + 2.1673 \times (x_{vp7}) - 1.3507 \times (c_{1C1C3d}) + 0.61496 \times (c_{1C102}) + 0.00403 \times (idc) - 0.23286 \times (nd2)$; 和

[0032] d) $MORV = -0.9926 - 0.03882 \times (Sd0) + 0.1869 \times (S_{sp30H}) + 2.1847 \times (x_{p7}) + 0.34344 \times (e_{1C302}) - 0.45767 \times (c_{1C2C3}) + 0.7684 \times (CKetone)$ 。

[0033] 优选地,所述一种或多种附加材料选自表面活性剂、颜色护理聚合物、沉积助剂、表面活性剂促进聚合物、pH调节剂、产品颜色稳定剂、防腐剂、溶剂、助洗剂、螯合剂、染料转移抑制剂、分散剂、酶和酶稳定剂、催化物质、漂白剂、漂白活化剂、聚合物分散剂、粘土污垢去除/抗再沉淀剂、增白剂、抑泡剂、染料、紫外线吸收剂、香料和香料递送体系、结构增弹剂、增稠剂/结构剂、织物软化剂、载体、水溶助长剂、低聚胺、加工助剂、调色剂、颜料、以及它们的混合物。

[0034] 优选地,所述消费产品选自婴儿护理品、美容护理品、织物和家居护理品、家庭护理品、女性护理品、健康护理品、小吃和/或饮料产品或装置。

[0035] 优选地,所述消费产品可包含约0.00025%至约30%的采用由本文所公开的模型提供的信息制得的香料。

[0036] 优选地,由本文公开的任何方法制得的消费产品是所公开的方法。

[0037] 用于产品的附加材料

[0038] 虽然对于本发明的目的而言不是必需的,但下文所举例说明的材料的非限制性列表适用于本发明的产品,并且可期望将其掺入到本发明的某些实施方案中以例如有助于或提高处理待清洁底物的清洁性能,或在含着色剂、染料等的情况下调节清洁组合物的美观性。这些附加组分的明确性质及其掺入量将取决于产品的物理形式以及其所应用的操作的性质。适宜的助剂材料包括但不限于表面活性剂、颜色护理聚合物、沉积助剂、表面活性剂促进聚合物、pH调节剂、产品颜色稳定剂、防腐剂、溶剂、助洗剂、螯合剂、染料转移抑制剂、分散剂、酶和酶稳定剂、催化物质、漂白剂、漂白活化剂、聚合物分散剂、粘土污垢去除/抗再沉淀剂、增白剂、抑泡剂、染料、紫外线吸收剂、香料和香料递送体系、结构增弹剂、增稠剂/结构剂、织物软化剂、载体、水溶助长剂、低聚胺、加工助剂、调色剂、颜料。

[0039] 如所述,上述产品不需要所有上述材料。因此,申请人产品的某些实施方案不包含以下材料中的一种或多种:表面活性剂、颜色护理聚合物、沉积助剂、表面活性剂促进聚合物、pH调节剂、产品颜色稳定剂、防腐剂、溶剂、助洗剂、螯合剂、染料转移抑制剂、分散剂、酶和酶稳定剂、催化物质、漂白剂、漂白活化剂、聚合物分散剂、粘土污垢去除/抗再沉淀剂、增白剂、抑泡剂、染料、紫外线吸收剂、香料和香料递送体系、结构增弹剂、增稠剂/结构剂、织物软化剂、载体、水溶助长剂、低聚胺、加工助剂、调色剂、颜料。然而,当存在所述材料中的一种或多种时,一种或多种此类材料可按如下所述存在:

[0040] 漂白剂-不同于漂白催化剂的漂白剂包括光漂白剂、漂白活化剂、过氧化氢、过氧化氢源、预成形过酸。合适的漂白剂的示例包括无水过硼酸钠(一水合物或四水合物)、无水

过碳酸钠、四乙酰基乙二胺、壬酰羟苯磺酸盐、磺化酞菁锌、以及它们的混合物。

[0041] 当使用漂白剂时,本发明的组合物可包括按本主题清洁组合物的重量计约0.1%至约50%或甚至约0.1%至约25%的漂白剂。

[0042] 表面活性剂-根据本发明的组合物可包含表面活性剂或表面活性剂体系,其中所述表面活性剂可选自非离子表面活性剂、阴离子表面活性剂、阳离子表面活性剂、两性表面活性剂、两性离子表面活性剂、半极性非离子表面活性剂以及它们的混合物。

[0043] 所述表面活性剂通常以按所述受试组合物的重量计约0.1%至约60%,约1%至约50%,或甚至约5%至约40%的含量存在。

[0044] 助洗剂-本发明的组合物可包含一种或多种洗涤剂助剂或助洗剂体系。当使用助洗剂时,本主题组合物将通常包含按本主题组合物的重量计至少约1%,约5%至约60%,或甚至约10%至约40%的助洗剂。

[0045] 助洗剂包括但不限于聚磷酸酯的碱金属盐、铵盐和链烷醇铵盐;碱金属硅酸盐;碱土金属和碱金属碳酸盐;硅铝酸盐助洗剂和聚羧酸盐化合物;醚羟基聚羧酸盐;马来酸酐与乙烯或乙烯基甲基醚的共聚物;1,3,5-三羟基苯-2,4,6-三磺酸;和羧基甲氧基琥珀酸;多元乙酸(诸如乙二胺四乙酸和次氨基三乙酸)以及聚羧酸酯(诸如苯六甲酸、琥珀酸、柠檬酸、氧联二琥珀酸、聚马来酸、苯1,3,5-三羧酸、羧基甲氧基琥珀酸)的各种碱金属盐、铵盐和取代的铵盐、以及它们的可溶性盐。

[0046] 螯合剂-本文的组合物可包含螯合剂。合适的螯合剂包括铜、铁和/或锰螯合剂以及它们的混合物。

[0047] 当使用螯合剂时,所述组合物可包含按本主题组合物的重量计约0.1%至约15%或甚至约3.0%至约10%的螯合剂。

[0048] 染料转移抑制剂-本发明的组合物还可包含一种或多种染料转移抑制剂。合适的聚合物染料转移抑制剂包括但不限于N-乙烯基吡咯烷酮与N-乙烯基咪唑的共聚物、聚乙烯基吡咯烷酮聚合物、聚胺N-氧化物聚合物、聚乙烯基噁唑烷酮和聚乙烯基咪唑、或它们的混合物。

[0049] 当存在于受试组合物中时,染料转移抑制剂可按所述组合物的重量计以约0.0001%至约10%,约0.01%至约5%,或甚至约0.1%至约3%的含量存在。

[0050] 分散剂-本发明的组合物还可包含分散剂。合适的水溶性有机材料包括均聚酸或共聚酸或它们的盐,其中多元羧酸包含至少两个彼此间隔不超过两个碳原子的羧基。

[0051] 酶-所述组合物可包含一种或多种酶,所述酶提供清洁性能和/或织物护理有益效果。合适的酶的示例包括但不限于:半纤维素酶,过氧化物酶、蛋白酶、纤维素酶、木聚糖酶、脂肪酶、磷脂酶、酯酶、角质酶、果胶酶、甘露聚糖酶、果胶裂解酶、角质素酶、还原酶、氧化酶、酚氧化酶、脂氧合酶、木质素酶、普鲁兰酶、鞣酸酶、戊聚糖酶、麦拉宁酶、 β -葡聚糖酶、阿拉伯糖苷酶、透明质酸酶、软骨素酶、漆酶和淀粉酶、或它们的混合物。典型的组合为包含蛋白酶、脂肪酶、角质酶和/或与淀粉酶结合的纤维素酶的酶混合物。

[0052] 当存在于清洁组合物中时,上述共轭酶可以按所述组合物重量计约0.00001%至约2%,约0.0001%至约1%,或甚至约0.001%至约0.5%酶蛋白的含量存在。

[0053] 酶稳定剂-用于洗涤剂中的酶可使用多种技术来稳定。本发明采用的酶可由最终组合物中存在的钙和/或镁离子的水溶性来源稳定,最终组合物向酶提供这种离子。在含水

组合物包含蛋白酶的情况下,可加入可逆蛋白酶抑制剂以进一步改善稳定性。

[0054] 催化金属配合物-申请人的组合物可包含催化金属配合物。一类包含金属的漂白催化剂是包含下列的催化剂体系:具有确定漂白催化活性的过渡金属阳离子,诸如铜阳离子、铁阳离子、钛阳离子、钇阳离子、钨阳离子、钼阳离子或锰阳离子;具有很低或无漂白催化活性的辅助金属阳离子,诸如锌阳离子或铝阳离子;以及对于催化和辅助金属阳离子有确定稳定性常数的螯合剂,尤其是乙二胺四乙酸、乙二胺四(亚甲基膦酸)以及它们的水溶性盐。此类催化剂公开于U.S.4,430,243中。

[0055] 如果需要,本文的组合物可经由锰化合物来催化。这些化合物和用量是本领域熟知的,并且包括例如公开于U.S.5,576,282中的锰基催化剂。

[0056] 可用于本发明的钴漂白催化剂是已知的,并且描述于例如U.S.5,597,936、U.S.5,595,967中。此类钴催化剂易于通过已知的方法制备,诸如例如U.S.5,597,936和U.S.5,595,967中教导的。

[0057] 本文的组合物还可适宜地包含具有大多环刚性配体-缩写为“MRL”的过渡金属配合物。作为实施项而不是作为限制,可调节本文的组合物和方法,使得在含水洗涤介质中提供大约至少一亿分之一的活性MRL物质,并且在洗涤液体中通常可提供约0.005ppm至约25ppm,约0.05ppm至约10ppm,或甚至约0.1ppm至约5ppm的MRL。

[0058] 本发明的过渡金属漂白催化剂中合适的过渡金属包括例如锰、铁和铬。适宜的MRL包括5,12-二乙基-1,5,8,12-四氮杂双环[6.6.2]十六烷。

[0059] 通过已知步骤易于制备适宜的过渡金属MRL,诸如例如在WO 00/32601和U.S.6,225,464中所提出的。

[0060] 溶剂-适宜的溶剂包括水和其它溶剂诸如亲脂性流体。适宜的亲脂性流体的示例包括硅氧烷、其它硅氧烷、烃、二元醇醚、甘油衍生物诸如甘油醚、全氟胺、全氟化和氢氟醚溶剂、低挥发性无氟有机溶剂、二醇溶剂、其它对环境友好的溶剂、以及它们的混合物。

[0061] 调色染料-所述液体衣物洗涤剂组合物可包含调色染料。用于本发明的衣物洗涤护理组合物中的调色染料可包括聚合物或非聚合物染料、有机或无机颜料、或它们的混合物。优选地,所述调色染料包括聚合物染料,所述聚合物染料包含发色团组分和聚合物组分。所述发色团组分的特征在于,它在暴露于光之后吸收蓝色、红色、紫罗兰色、紫色或它们组合的波长范围内的光。优选地,所述发色团组分在水和/或甲醇中表现出约520纳米至约640纳米的吸收光谱最大值,并且在另一方面,在水和/或甲醇中表现出约560纳米至约610纳米的吸收光谱最大值。

[0062] 虽然可使用任何适宜的发色团,但是所述染料发色团优选选自苯并二咪唑、次甲基、三苯甲烷、萘酰亚胺、吡唑、萘醌、葱醌、偶氮、噁嗪、吡嗪、咕吨类、三苯二噁嗪和酞菁染料发色团。可优选单偶氮和重氮染料发色团。

[0063] 所述调色染料可包含染料聚合物,所述染料聚合物包含与至少三个连续重复单元中的一个或多个共价键合的发色团。应当理解,所述重复单元自身无需包含发色团。所述染料聚合物可包含至少5,或至少10,或甚至至少20个连续重复单元。

[0064] 所述重复单元可衍生自有机酯诸如苯基二羧酸酯与氧基亚烷氧基和聚氧基亚烷氧基的组合。重复单元可衍生自烯烃、环氧化物、氮丙啶、碳水化合物,包括含有改性纤维素的单元,所述改性纤维素诸如羟烷基纤维素;羟丙基纤维素;羟丙基甲基纤维素;羟丁基纤

纤维素;和羟丁基甲基纤维素,或它们的混合物。所述重复单元可衍生自烯烃或环氧化物、或它们的混合物。所述重复单元可为C₂-C₄亚烷氧基基团,有时称为烷氧基基团,优选衍生自C₂-C₄亚烷氧基。所述重复单元可为C₂-C₄烷氧基基团,优选乙氧基基团。

[0065] 出于本发明的目的,所述至少三个连续的重复单元形成聚合物组分。所述聚合物组分可直接或经由连接基团间接地与所述发色团共价键合。适宜的聚合物组分的示例包括具有多个重复单元的聚氧化烯链。优选地,所述聚合物组分包含具有2至约30个重复单元,2至约20个重复单元,2至约10个重复单元,或甚至约3或4至约6个重复单元的聚氧化烯链。聚氧化烯链的非限制性示例包括环氧乙烷、环氧丙烷、缩水甘油氧化物、环氧丁烷、以及它们的混合物。

[0066] 香料递送技术-所述流体织物增强组合物可包含一种或多种香料递送技术,所述技术稳定并且增强香料成分的沉积以及自所处理基底的释放。此类香料递送技术也可用于提高香料自所处理基底释放的持久性。香料递送技术、制备某些香料递送技术的方法以及此类香料递送技术的用途公开于US 2007/0275866 A1中。

[0067] 优选地,所述流体织物增强组合物可包含约0.001重量%至约20重量%,或约0.01重量%至约10重量%,或约0.05重量%至约5重量%,或甚至约0.1重量%至约0.5重量%的香料递送技术。优选地,所述香料递送技术可选自:香料微胶囊、前香料、聚合物颗粒、官能化硅氧烷、聚合物辅助递送、分子辅助递送、纤维辅助递送、胺辅助递送、环糊精、淀粉包封的谐香剂、沸石和无机载体、以及它们的混合物:

[0068] 优选地,所述香料递送技术可包括用壁材料至少部分包围有益剂而形成的微胶囊。所述有益剂可包含选自以下的材料:香料,诸如3-(4-叔丁基苯基)-2-甲基丙醛、3-(4-叔丁基苯基)-丙醛、3-(4-异丙基苯基)-2-甲基丙醛、3-(3,4-亚甲基二氧基苯基)-2-甲基丙醛、和2,6-二甲基-5-庚烯醛、 α -二氢大马酮、 β -二氢大马酮、 γ -二氢大马酮、 β -大马烯酮、6,7-二氢-1,1,2,3,3-五甲基-4(5H)-茛酮、甲基-7,3-二氢-2H-1,5-苯并二氧环丙-3-酮、2-[2-(4-甲基-3-环己烯基-1-基)丙基]环戊-2-酮、2-仲丁基环己酮、和 β -二氢紫罗兰酮、里哪醇、乙基里哪醇、四氢里哪醇、和二氢月桂烯醇;硅氧烷油、蜡诸如聚乙烯蜡;精油诸如鱼油、茉莉、樟脑、薰衣草;皮肤凉爽剂诸如薄荷醇、乳酸甲酯;维生素诸如维生素A和E;防晒剂;甘油;催化剂诸如锰催化剂或漂白催化剂;漂白颗粒诸如过硼酸盐;二氧化硅颗粒;止汗剂活性物质;阳离子聚合物、以及它们的混合物。合适的有益剂可得自Givaudan Corp. (Mount Olive, New Jersey, USA)、International Flavors&Fragrances Corp. (South Brunswick, New Jersey, USA)、或Quest Corp. (Naarden, Netherlands)。优选地,所述微胶囊壁材料可包含:三聚氰胺、聚丙烯酰胺、硅氧烷、二氧化硅、聚苯乙烯、聚脲、聚氨酯、基于聚丙烯酸酯的材料、明胶、苯乙烯马来酸酐、聚酰胺、以及它们的混合物。优选地,所述三聚氰胺壁材料可包含与甲醛交联的三聚氰胺、与甲醛交联的三聚氰胺-二甲氧基乙醇、以及它们的混合物。优选地,所述聚苯乙烯壁材料可包含与二乙烯基苯交联的聚苯乙烯。优选地,所述聚脲壁材料可包含与甲醛交联的脲、与戊二醛交联的脲、以及它们的混合物。优选地,所述基于聚丙烯酸酯的材料可包含由甲基丙烯酸甲酯/甲基丙烯酸二甲氨基甲酯形成的聚丙烯酸酯、由胺丙烯酸酯和/或甲基丙烯酸酯与强酸形成的聚丙烯酸酯、由羧酸丙烯酸酯和/或甲基丙烯酸酯单体与强碱形成的聚丙烯酸酯、由胺丙烯酸酯和/或甲基丙烯酸酯单体与羧酸丙烯酸酯和/或羧酸甲基丙烯酸酯单体形成的聚丙烯酸酯、以及它们的混合物。优选

地,所述香料微胶囊可涂覆有沉积助剂、阳离子聚合物、非离子聚合物、阴离子聚合物、或它们的混合物。合适的聚合物可选自:聚乙烯甲醛、部分羟基化的聚乙烯甲醛、聚乙烯胺、聚乙烯亚胺、乙氧基化聚乙烯亚胺、聚乙烯醇、聚丙烯酸酯、以及它们的组合。合适的沉积助剂描述于上文中,并且在标题为“沉积助剂”的段落中。优选地,所述微胶囊可为香料微胶囊。优选地,可使用一种或多种类型的微胶囊,例如具有不同香料有益剂的两种微胶囊类型。

[0069] 优选地,所述香料递送技术可包含胺反应产物(ARP)或硫反应产物。还可使用“反应性”聚胺和/或聚硫化物,其中胺和/或硫官能团与一种或多种PRM预反应以形成反应产物。通常,所述反应性胺为伯胺和/或仲胺,并且可为聚合物或单体(非聚合物)的一部分。此类ARP还可与附加的PRM混合以提供聚合物辅助递送和/或胺辅助递送的有益效果。聚胺的非限制性示例包括基于聚烷基亚胺的聚合物,诸如聚乙烯亚胺(PEI)或聚乙烯胺(PVAm)。单体(非聚合)胺的非限制性示例包括羟基胺,诸如2-氨基乙醇及其烷基取代的衍生物,和芳胺诸如邻氨基苯甲酸酯。ARP可与香料预混,或分开加入到免洗型或洗去型应用中。在另一方面中,包含不是氮和/或硫的杂原子如氧、磷或硒的材料可用作胺化合物的替代物。在另一方面,上述替代化合物可与胺化合物组合使用。在另一方面中,单个分子可包含胺部分和一个或多个替代杂原子部分,例如硫醇、膦和硒醇。所述有益效果可包括改善的香料递送以及受控的香料释放。合适的ARP及其制备方法可见于USPA 2005/0003980 A1和USP 6,413,920 B1中。

[0070] 制备清洁和/或处理组合物的方法

[0071] 本发明的清洁组合物可配制成为任何适宜形式,并且通过配制人员所选的任何方法制备,其非限制性示例描述于申请人示例以及U.S.5,879,584;U.S.5,691,297;U.S.5,574,005;U.S.5,569,645;U.S.5,565,422;U.S.5,516,448;U.S.5,489,392;U.S.5,486,303中,将所有所述文献以引用的方式并入本文中。

[0072] 使用方法

[0073] 本发明的产品可以任何常规方式使用。简而言之,它们可以与用作通过常规方法和过程设计并生产的消费品相同的方式使用。例如,本发明的清洁和/或处理组合物可用于清洁和/或处理某区域特别是表面或织物。通常,使区域的至少一部分与纯态或洗涤液体稀释态的申请人组合物的实施方案相接触,然后任选地洗涤和/或漂洗该区域。出于本发明的目的,洗涤包括但不限于擦洗和机械搅拌。织物可包括能够在正常消费者使用条件下洗涤的任何织物。包含公开的清洁组合物的清洁溶液通常具有约5至约10.5的pH。此类组合物在溶液中的典型使用浓度为约500ppm至约15,000ppm。当洗涤溶剂为水时,水温通常在约5°C至约90°C范围内,并且当所述区域包括织物时,水与织物的质量比通常为约1:1至约100:1。

[0074] 实施例

[0075] MORV模型需要执行1.1.2.1版winMolconn程序(Hall Associates Consulting, <http://www.molconn.com/index.html>)。以下是如何执行程序并且生成所需描述符的描述。

[0076] 使用winMolconn计算分子结构描述符:

[0077] 1) 组装MACCS结构-数据文件(还称为SDF文件或SMILES文件)形式的一种或多种香料成分的分子结构

[0078] 2) 使用在适当计算机上运行的1.1.2.1版winMolconn程序,使用上述SDF或SMILES

文件作为输入,计算得自所述程序的全套分子描述符。

[0079] a.对于输入文件中的每种结构,winMolconn输出为ASCII文本文件格式,通常空格分隔,包含第一栏中的结构标识符,和其余栏中相应的分子描述符。

[0080] 3) 使用Excel[®]或某些其它适当技术,将文本文件解析成栏。每栏包含输入中每种分子结构的单个描述符值。分子描述符标记可见于所得表的第一行。

[0081] 4) 找到并且提取描述符栏,其由分子描述符标记标识,对应于每种模型所需的输入。

[0082] a.需注意,winMolconn分子描述符标记是区分大小写的。

[0083] 每个MORV模型可为简单的多变量代数公式形式。

[0084] 1) 对于由羧酸产生的恶臭,计算香料原料的MORV值:

[0085] a.对于感兴趣的每种香料原料:

[0086] i.使用winMolconn程序(1.1.2.1版),计算全套可用分子描述符。

[0087] ii.由winMolconn的输出,提取下列分子描述符的值:dxvp9、knotpv、e1C202、idw、idcbar、和n2pag22。需注意,这些描述符标记是区分大小写的。

[0088] iii.使用公式1,通过用计算出的winMolconn描述符值替代公式中所示的相应标记,计算MORV值。

[0089] 公式1: $MORV = -8.5096 + 2.8597 \times (dxp9) + 1.1253 \times (knotpv) - 0.34484 \times (e1C202) - 0.00046231 \times (idw) + 3.3509 \times (idcbar) + 0.11158 \times (n2pag22)$

[0090] 2) 计算由胺产生的香料原料恶臭的MORV值:

[0091] a.对于感兴趣的每种香料原料:

[0092] i.使用winMolconn程序(1.1.2.1版),计算全套可用分子描述符。

[0093] ii.由winMolconn的输出,提取下列分子描述符的值:dxvp5、dxvp8、e1C2C2d、c1C202、CdCH2、CaasC、和idcbar。需注意,这些标记是区分大小写的。

[0094] iii.使用公式2,通过用计算出的winMolconn描述符值替代公式中所示的相应标记,计算MORV值。

[0095] 公式2: $MORV = -5.2917 + 2.1741 \times (dxvp5) - 2.6595 \times (dxvp8) + 0.45297 \times (e1C2C2d) - 0.6202 \times (c1C202) + 1.3542 \times (CdCH2) + 0.68105 \times (CaasC) + 1.7129 \times (idcbar)$

[0096] 3) 计算由有机硫化物产生的香料原料恶臭的MORV值:

[0097] a.对于感兴趣的每种香料原料:

[0098] i.使用winMolconn程序(1.1.2.1版),计算全套可用分子描述符。

[0099] ii.由winMolconn的输出,提取下列分子描述符的值:SHCsatu、xvp7、c1C1C3d、c1C102、idc、和nd2。需注意,这些标记是区分大小写的。

[0100] iii.使用公式3,通过用计算出的winMolconn描述符值替代公式中所示的相应标记,计算MORV值。

[0101] 公式3: $MORV = -0.0035 + 0.8028 \times (SHCsatu) + 2.1673 \times (xvp7) - 1.3507 \times (c1C1C3d) + 0.61496 \times (c1C102) + 0.00403 \times (idc) - 0.23286 \times (nd2)$

[0102] 4) 对于由包含吡啶部分的化合物产生的恶臭,计算香料原料的MORV值:

[0103] a.对于感兴趣的每种香料原料:

[0104] i.使用winMolconn程序(1.1.2.1版),计算全套可用分子描述符。

[0105] ii.由winMolconn的输出,提取下列分子描述符的值:Sd0、Ssp30H、xp7、e1C302、c1C2C3、和CKetone。需注意,这些标记是区分大小写的。

[0106] iii.使用公式4,通过用计算出的winMolconn描述符值替代公式中所示的相应标记,计算MORV值。

[0107] 公式4: $MORV = -0.9926 - 0.03882 \times (Sd0) + 0.1869 \times (Ssp30H) + 2.1847 \times (xp7) + 0.34344 \times (e1C302) - 0.45767 \times (c1C2C3) + 0.7684 \times (CKetone)$

[0108] 实施例计算:

[0109] 实施例1:选择具有期望恶臭减少值的香料成分。

[0110] 通过绘画或通过由相容的文件格式导入结构,将以下香料原料 (PRM) 的结构输入到ChemBioFinder™数据库中:(3R,3aS,7S,8aS)-3,8,8-三甲基-6-亚甲基八氢-1H-3a,7-亚甲基萹;(1S,4aR,8aR)-1-异丙基-4,7-二甲基-1,2,4a,5,6,8a-六氢萹;(1R,4S,4aR,8aR)-4-异丙基-1,6-二甲基-1,2,3,4,4a,7,8,8a-八氢萹-1-酚;异丁酸(1S,2S)-1,7,7-三甲基双环[2.2.1]庚-2-基酯;甲酸(3R,3aS,6R,7R,8aS)-3,6,8,8-四甲基八氢-1H-3a,7-亚甲基萹-3-基酯;乙酸(3R,3aS,6R,7R,8aS)-3,6,8,8-四甲基八氢-1H-3a,7-亚甲基萹-6-基酯;(Z)-3-甲基-2-(戊-2-烯-1-基)环戊-2-烯-1-酮;(1R,4S,4aS,6R,8aS)-4,8a,9,9-四甲基八氢-1,6-亚甲基萹-1(2H)-醇;1-((2S,3S)-2,3,8,8-四甲基-1,2,3,4,5,6,7,8-八氢萹-2-基)乙-1-酮;4-(4-羟基-4-甲基戊基)环己-3-烯-1-甲醛;丙酸(1R,2R,4S)-1,7,7-三甲基双环[2.2.1]庚-2-基酯;4,6,6,7,8,8-六甲基-1,3,4,6,7,8-六氢环戊并[g]异苯并吡喃;(2E,6E)-壬-2,6-二烯-1-醇;(3Z,6Z)-壬-3,6-二烯-1-醇;(E)-3-甲基环十五碳-4-烯-1-酮;(Z)-氧杂环十七碳-8-烯-2-酮;(E)-氧杂环十六碳-13-烯-2-酮;3-甲基-3-苯基环氧乙烷-2-甲酸乙酯;(E)-8-(1H-吡啶-1-基)-2,6-二甲基辛-7-烯-2-醇;己酸对甲基苯酯;7-甲氧基-2H-苯并吡喃-2-酮;(2E,6E)-3,7,11-三甲基十二碳-2,6,10-三烯-1-醇;3-环己基丙酸烯丙酯;苯甲酸3,7-二甲基辛-1,6-二烯-3-基酯;(Z)-1-(2,2-二甲基-6-亚甲基环己基)丁-2-烯-1-酮;2-((1S,2S)-3-氧代基-2-戊基环戊基)乙酸甲酯;4-烯丙基-2-甲氧基苯酚;苯甲酸(E)-3,7-二甲基辛-2,6-二烯-1-基酯;2-乙氧基萹;1-苯基戊-2-醇;(E)-癸-4-烯醛;棕榈酸乙酯;2,4,5-三甲氧基苯甲醛;2-甲基丁酸苯乙酯;(Z)-癸-4-烯醛;苯甲酸苄酯;7-甲氧基-3,7-二甲基辛醛;(E)-3,7-二甲基辛-2,6-二烯-1-醇;丁酸2-甲基-1-苯基丙-2-基酯;3,7-二甲基辛-6-烯-3-醇;3-甲氧基-3-甲基丁-1-醇;6,6-二甲基-2-亚甲基环己-3-烯-1-羧酸乙酯;(Z)-3-苯基丙烯酸戊酯;2-丙基庚腈;6,6-二甲氧基-2,5,5-三甲基己-2-烯;2,5,6-三甲基环己-3-烯-1-甲醛;2-甲基-5-(丙-1-烯-2-基)环己-2-烯-1-酮;(E)-4-(2,2-二甲基-6-亚甲基环己基)-3-甲基丁-3-烯-2-酮;(E)-己-2-烯-1-醇;6-甲基喹啉;2-异丙基-5-甲基苯酚;(2S,5R)-2-异丙基-5-甲基环己-1-酮;2,6,6-三甲基双环[3.1.1]庚-2-烯;3,7-二甲基辛-3-醇;3,7-二甲基辛-1,6-二烯-3-醇;(E)-3,7-二甲基辛-4,6-二烯-3-醇;1,7,7-三甲基双环[2.2.1]庚-2-酮;2-甲基丁酸异丙酯;(R)-2-甲基-5-(丙-1-烯-2-基)环己-2-烯-1-酮;2-苯基乙-1-醇;(R)-1-甲基-4-(丙-1-烯-2-基)环己-1-烯;(Z)-1-((1R,2S)-2,6,6-三甲基环己-3-烯-1-基)丁-2-烯-1-酮;(1R,2S)-2-(叔丁基)环己-1-醇;5-甲基庚-3-酮;(2S,5S)-2-异丙基-5-甲基环己-1-酮;1,3,3-三甲基-2-氧杂双环[2.2.2]辛烷;(E)-1-(1-乙氧基乙氧基)己-3-烯;邻苯二甲酸二丁酯;(E)-2-异丙基-5-甲基己-2-烯醛;1,1-二乙氧基癸烷;乙酸(2E,6E)-3,7,11-三甲基十二碳-2,6,10-三烯-

1-基酯;对异丙基甲苯;2,6-二甲基辛-7-烯-2-醇;2-苯氧基乙-1-醇;乙酸2-乙氧基-4-甲酰基苯基酯;1-甲基-4-(丙-1-烯-2-基)环己-1-醇;3,7-二甲基辛-1,7-二醇;(Z)-3-甲基-4-(2,6,6-三甲基环己-1-烯-1-基)丁-3-烯-2-酮;(Z)-4-(2,6,6-三甲基环己-1-烯-1-基)丁-3-烯-2-酮;(Z)-己-3-烯醛;己醛;己-3-醇;(Z)-2-甲基丁-2-烯酸乙酯;戊酸乙酯;乙酸2-(叔丁基)环己基酯;(2-甲氧基乙基)苯;异丁酸己酯;乙酸3,7-二甲基辛酯;2-羟基苯甲酸戊酯;2-异丙基-5-甲基环己-1-醇;乙酸丁酯;己酸烯丙酯;乙酸苯酯;4-羟基-3-甲氧基苯甲醛;丁酸丁酯;2-甲基丁-1-醇;庚酸乙酯;2,6-二甲基庚-5-烯醛;1-(4-羟基苯基)丁-1-酮;苯甲醛。结构集以文本文件格式化的MACCS结构-数据文件(SDF)形式导出。使用程序winMolconn(1.1.2.1版)计算下面一组分子结构描述符:c1C1C3d、c1C102、c1C2C3、c1C202、CaasC、CdCH2、CKetone、dxvp5、dxvp8、dxvp9、e1C2C2d、e1C202、e1C302、idc、idcbar、idw、knotpv、n2pag22、nd2、Sd0、SHCsatu、Ssp30H、xp7、xvp7,其中c1C1C3d为具有一个双键和两个连接非氢原子的单键的碳原子(=C<)与甲基碳原子(-CH₃)之间的单键数,c1C102为甲基碳原子(-CH₃)与具有两个单键的氧原子之间的单键数,c1C2C3为具有三个连接非氢原子的单键的碳原子(>CH-)与亚甲基(-CH₂-)碳原子之间的单键数,c1C202为亚甲基(-CH₂-)碳原子与具有两个单键的氧原子之间的单键数,CaasC为单键连接另一个非氢原子的芳族碳原子数,CdCH2为亚甲基基团(-CH₂-)数,CKetone为酮官能团数,dxvp5为价键校正差分5阶路径分子连接性指数,dxvp8为价键校正差分8阶路径分子连接性指数,dxvp9为价键校正差分9阶路径分子连接性指数,e1C2C2d为具有一个双键和一个连接非氢原子的单键的碳原子(=CH-)与亚甲基(-CH₂-)碳原子之间单键的键型电性拓扑状态指数值的总和,e1C202为亚甲基(-CH₂-)碳原子与具有两个单键的氧原子之间单键的键型电性拓扑状态指数值的总和,e1C302为具有三个连接非氢原子的单键的碳原子(>CH-)与具有两个单键的氧原子之间单键的键型电性拓扑状态指数值的总和,idc为Bonchev-Trinajstic信息指数,idcbar为Bonchev-Trinajstic信息指数,idw为Bonchev-Trinajstic信息指数,knotpv为xvc3与xvpc4之间的子图距离,其中xvc3为价键校正3阶分子连接性指数,并且xvpc4为价键校正4阶路径-簇分子连接性指数,n2pag22为路径末端顶点δ值为2和2的路径2子图的数目,nd2为δ值为2的顶点的个数,Sd0为sp²氧原子的电性拓扑状态指数值的总和,SHCsatu为还与sp²碳原子键合的sp³碳上氢原子的氢原子电性拓扑状态指数的总和,Ssp30H为与sp³碳原子键合的氧原子的电性拓扑状态指数值的总和,xp7为7阶路径分子连接性指数,并且xvp7为价键校正的7阶路径分子连接性指数。然后使用上述公式1-4计算MORV值。将结果制成表。将所得表排序,使得所有四个公式均产生0.5或更大MORV值的化合物被划分在列表顶部,随后是任何三个公式产生0.5或更大MORV值的化合物,接着是任何两个公式产生0.5或更大MORV值的化合物,随后是任何一个公式产生0.5或更大MORV值的化合物,接着是所有四个公式均产生小于0.5MORV值的化合物。所述方法使得最适宜的化合物放置在列表顶部,最不适宜的化合物放置在底部。

[0111]

化学名称	MORV (公式 1)	MORV (公式 2)	MORV (公式 3)	MORV (公式 4)
(3R,3aS,7S,8aS)-3,8,8-三甲基-6-亚甲基八氢-1H-3a,7-亚甲基萹	2.45	4.67	4.55	2.16
(1S,4aR,8aR)-1-异丙基-4,7-二甲基-1,2,4a,5,6,8a-六氢萹	0.98	2.33	1.68	0.81
(1R,4S,4aR,8aR)-4-异丙基-1,6-二甲基-1,2,3,4,4a,7,8,8a-八氢萹-1-酚	0.98	1.74	2.21	2.74
异丁酸(1S,2S)-1,7,7-三甲基双环[2.2.1]庚-2-基酯	3.22	1.46	2.48	1.21
甲酸(3R,3aS,6R,7R,8aS)-3,6,8,8-四甲基八氢-1H-3a,7-亚甲基萹-3-基酯	4.03	3.76	4.83	3.19
乙酸(3R,3aS,6R,7R,8aS)-3,6,8,8-四甲基八氢-1H-3a,7-亚甲基萹-6-基酯	4.20	3.63	4.69	3.37
(Z)-3-甲基-2-(戊-2-烯-1-基)环戊-2-烯-1-酮	0.70	0.55	0.92	0.50
(1R,4S,4aS,6R,8aS)-4,8a,9,9-四甲基八氢-1,6-亚甲基萹-1(2H)-醇	3.70	3.03	4.34	4.24

[0112]

1-((2S,3S)-2,3,8,8-四甲基-1,2,3,4,5,6,7,8-八氢萘-2-基)乙-1-酮	2.26	1.36	3.26	2.15
4-(4-羟基-4-甲基戊基)环己-3-烯-1-甲醛	1.74	0.99	2.57	1.23
丙酸(1R,2R,4S)-1,7,7-三甲基双环[2.2.1]庚-2-基酯	3.32	1.55	1.89	0.96
4,6,6,7,8,8-六甲基-1,3,4,6,7,8-六氢环戊并[g]异苯并吡喃	1.93	2.31	4.46	4.47
(2E,6E)-壬-2,6-二烯-1-醇	1.67	1.92	0.70	1.12
(3Z,6Z)-壬-3,6-二烯-1-醇	1.67	1.95	0.20	1.15
(E)-3-甲基环十五碳-4-烯-1-酮	1.59	0.28	2.23	1.11
(Z)-氧杂环十七碳-8-烯-2-酮	0.91	0.37	1.04	1.00
(E)-氧杂环十六碳-13-烯-2-酮	1.09	0.22	1.11	0.87
3-甲基-3-苯基环氧乙烷-2-甲酸乙酯	0.52	-0.85	0.77	1.73
(E)-8-(1H-吡啶-1-基)-2,6-二甲基辛-7-烯-2-醇	1.14	0.12	1.61	3.71
己酸对甲基苯酯	1.80	0.77	0.70	0.22
7-甲氧基-2H-苯并吡喃-2-酮	1.33	0.72	0.20	1.15
(2E,6E)-3,7,11-三甲基十二碳-2,6,10-三烯-1-醇	1.44	1.66	-1.09	1.67
3-环己基丙酸烯丙酯	1.29	1.93	0.86	-1.46
苯甲酸 3,7-二甲基辛-1,6-二烯-3-基酯	0.91	1.97	-0.92	0.63
(Z)-1-(2,2-二甲基-6-亚甲基环己基)丁-2-烯-1-酮	-0.22	0.87	1.79	0.13
2-((1S,2S)-3-氧代基-2-戊基环戊基)乙酸甲酯	1.42	0.09	3.44	-0.13
4-烯丙基-2-甲氧基苯酚	0.18	2.75	0.76	0.37
苯甲酸(E)-3,7-二甲基辛-2,6-二烯-1-基酯	0.24	0.93	-0.67	0.51
2-乙氧基萘	0.75	-0.77	-0.67	1.70
1-苯基戊-2-醇	1.12	-0.20	-0.16	0.90
(E)-癸-4-烯醛	2.24	1.44	0.31	-0.72
棕榈酸乙酯	0.97	0.14	1.36	0.37
2,4,5-三甲氧基苯甲醛	-0.08	1.19	1.68	0.34
2-甲基丁酸苯乙酯	1.00	-0.86	0.89	-0.39
(Z)-癸-4-烯醛	2.24	1.44	0.31	-0.72
苯甲酸苄酯	1.20	0.02	-0.10	0.73
7-甲氧基-3,7-二甲基辛醛	0.93	-0.35	1.06	-1.62
(E)-3,7-二甲基辛-2,6-二烯-1-醇	0.74	0.16	-1.80	1.02
丁酸 2-甲基-1-苯基丙-2-基酯	0.81	-0.13	1.07	-0.02
3,7-二甲基辛-6-烯-3-醇	0.32	-1.00	-1.65	1.03
3-甲氧基-3-甲基丁-1-醇	-1.40	-2.59	0.15	0.62
6,6-二甲基-2-亚甲基环己-3-烯-1-羧酸乙酯	-1.40	0.27	1.36	-0.64
(Z)-3-苯基丙烯酸戊酯	1.45	-0.51	-0.79	0.36
2-丙基庚腈	1.07	-0.66	-0.63	-1.37
6,6-二甲氧基-2,5,5-三甲基己-2-烯	-0.09	-1.06	-0.05	1.56
2,5,6-三甲基环己-3-烯-1-甲醛	-0.51	-0.93	1.63	-0.79

[0113]

2-甲基-5-(丙-1-烯-2-基)环己-2-烯-1-酮	-0.23	0.89	-0.13	-0.84
(E)-4-(2,2-二甲基-6-亚甲基环己基)-3-甲基丁-3-烯-2-酮	0.34	1.53	0.11	0.35
(E)-己-2-烯-1-醇	-0.25	-0.24	-0.01	0.57
6-甲基喹啉	0.21	-0.58	-0.33	0.78
2-异丙基-5-甲基苯酚	-0.66	0.50	0.92	-0.56
(2S,5R)-2-异丙基-5-甲基环己-1-酮	-0.39	-0.25	1.19	-1.61
2,6,6-三甲基双环[3.1.1]庚-2-烯	-0.44	0.92	0.03	-1.62
3,7-二甲基辛-3-醇	0.28	-1.47	-0.03	0.59
3,7-二甲基辛-1,6-二烯-3-醇	0.13	0.22	-1.71	0.96
(E)-3,7-二甲基辛-4,6-二烯-3-醇	0.18	-2.08	-2.14	0.98
1,7,7-三甲基双环[2.2.1]庚-2-酮	0.45	0.01	0.80	-0.63
2-甲基丁酸异丙酯	-0.53	-2.16	0.58	-0.92
(R)-2-甲基-5-(丙-1-烯-2-基)环己-2-烯-1-酮	-0.23	0.89	-0.13	-0.84
2-苯基乙-1-醇	-0.12	-0.85	-0.63	1.18
(R)-1-甲基-4-(丙-1-烯-2-基)环己-1-烯	-0.21	1.46	-0.94	-1.49
(Z)-1-((1R,2S)-2,6,6-三甲基环己-3-烯-1-基)丁-2-烯-1-酮	-0.19	0.07	2.24	0.13
(1R,2S)-2-(叔丁基)环己-1-醇	-1.03	-0.36	0.13	0.54
5-甲基庚-3-酮	-0.28	-1.64	0.60	-1.56
(2S,5S)-2-异丙基-5-甲基环己-1-酮	-0.39	-0.25	1.19	-1.61
1,3,3-三甲基-2-氧杂双环[2.2.2]辛烷	-1.00	0.58	-0.06	-0.94
(E)-1-(1-乙氧基乙氧基)己-3-烯	-0.31	-0.81	0.09	1.62
邻苯二甲酸二丁酯	-0.98	-0.96	0.38	0.79
(E)-2-异丙基-5-甲基己-2-烯醛	-0.23	-1.15	0.83	-1.86
1,1-二乙氧基癸烷	0.09	-1.20	-0.27	1.83
乙酸(2E,6E)-3,7,11-三甲基十二碳-2,6,10-三烯-1-基酯	-0.11	1.09	-0.90	-0.09
对异丙基甲苯	-0.41	-0.18	0.51	-0.57
2,6-二甲基辛-7-烯-2-醇	-0.07	-0.17	0.33	0.68
2-苯氧基乙-1-醇	-0.37	-1.36	-1.27	1.35
乙酸 2-乙氧基-4-甲酰基苯酯	-0.68	0.02	-0.82	0.58
1-甲基-4-(丙-1-烯-2-基)环己-1-醇	-0.13	1.04	-0.64	0.18
3,7-二甲基辛-1,7-二醇	0.35	-0.95	-0.08	1.87
(Z)-3-甲基-4-(2,6,6-三甲基环己-1-烯-1-基)丁-3-烯-2-酮	0.28	-0.01	-1.49	0.35
(Z)-4-(2,6,6-三甲基环己-1-烯-1-基)丁-3-烯-2-酮	0.14	-0.40	-1.10	0.29
(Z)-己-3-烯醛	-0.25	0.21	-0.05	-1.37
己醛	-0.25	-0.92	-0.51	-1.37
己-3-醇	-1.24	-1.90	-0.52	-0.26
(Z)-2-甲基丁-2-烯酸乙酯	-1.57	-2.87	-0.81	-1.41

[0114]

戊酸乙酯	-0.78	-2.24	-0.11	-1.18
乙酸 2-(叔丁基)环己酯	-0.37	0.33	-0.24	0.04
(2-甲氧基乙基)苯	-0.36	-1.05	-0.03	-0.23
异丁酸己酯	0.36	-1.60	0.28	-0.75
乙酸 3,7-二甲基辛酯	0.19	-1.05	-0.62	-2.08
2-羟基苯甲酸戊酯	0.44	-0.32	-0.43	0.15
2-异丙基-5-甲基环己-1-醇	-0.25	0.04	0.19	-0.58
乙酸丁酯	-1.18	-2.31	-1.50	-1.38
己酸烯丙酯	0.33	0.18	0.45	-0.99
乙酸苯酯	-0.02	-1.06	-1.65	-0.70
4-羟基-3-甲氧基苯甲醛	-0.28	0.26	0.08	-0.65
丁酸丁酯	-0.21	-2.02	-0.17	-1.09
2-甲基丁-1-醇	-2.19	-2.16	-0.36	-0.29
庚酸乙酯	0.37	-1.48	-0.11	-0.76
2,6-二甲基庚-5-烯醛	0.28	-0.83	-1.38	-1.48
1-(4-羟基苯基)丁-1-酮	0.28	0.15	0.15	0.27
苯甲醛	-1.01	-1.45	-1.14	-1.07

[0115] 实施例2. 基于实施例-1中获得的信息, 制备下表2中的香料。此类香料具有恶臭减少能力, 但未显示出香料特征变化。

[0116]

化学名称	MRC-A (百分比)	MRC-B (百分比)	MRC-C (百分比)
4-(4-羟基-4-甲基戊基)环己-3-烯-1-甲醛	15	18	5
(1R,4S,4aR,8aR)-4-异丙基-1,6-二甲基-1,2,3,4,4a,7,8,8a-八氢萘-1-酚	3.5	1	2
(2E,6E)-壬-2,6-二烯-1-醇	0.05	0.07	0
(E)-3-甲基环十五碳-4-烯-1-酮	30.845	30	25
己酸对甲基苯酯	0.005	0.002	0
苯甲酸 3,7-二甲基辛-1,6-二烯-3-基酯	15	8.5	9
2-乙氧基萘	5.5	5	1
棕榈酸乙酯	20	30	50
(E)-3,7-二甲基辛-2,6-二烯-1-醇	10	7.128	8
(E)-己-2-烯-1-醇	0.1	0.3	0
总计	100	100	100

[0117] 实施例-3. 包含得自实施例-2的香料的消费产品

[0118] 织物和空气清新剂组合物

[0119]

成分	实施例 4.1	实施例 4.2	实施例 4.3 (范围)
去离子水	余量	余量	余量
乙醇	3.0	3.0	1-5.0%
Lupasol HF+	0.0650	0.0650	0-0.1%
二甘醇	0.175	0.175	0-0.2%
Silwet L-7600	0.1	0.100	0-0.2
马来酸和/或柠檬酸	0.05	0.05	0-0.2
Koralone B-119	0.015	0.015	0-0.1
羟丙基 β -环糊精	0.630	0.630	0-2.0%
氢氧化钠	0.003	0.003	0.001-0.01
其它香料	0	0.4%	0-1.0%
得自实施例-2 的香料	0.03%	0.04%	0-0.1%
总计	100.000	100.000	100.000

[0120] Lupasol HF 聚乙烯亚胺 (购自BASF)

[0121] Silwet L-7600 有机硅氧烷 (购自BASF)

[0122] Koralone B-119 19%活性的1,2-苯并异噻唑-3-酮 (BIT) 在双丙二醇和水中的水性溶液 (购自Dow Chemical)

[0123] 根据实施例2中所示的香料,制备具有香料的HDL-重垢液体组合物A-D。

[0124]

成分	A	B	C	D
	活性物质重量%	活性物质重量%	活性物质重量%	活性物质重量%
AE _{1.8} S	16.3	16.3	12	8
C _{11.8} 直链烷基苯磺酸	2.8	2.8	8	--
HSAS	13.6	13.6	0	22
C24醇, EO9	2.2	2.2	1	1.8
柠檬酸	0.9	0.9	2	1.7
乳酸	---	5.8	---	---
C ₁₂ -C ₁₈ 脂肪酸	2.3	1.3	0.8	3.0
蛋白酶 (55.3mg/g)	1.7	1.7	1.7	1.7
淀粉酶 (25.4mg/g)	0.7	0.7	0.7	0.7
硼砂	3.6	3.6	3.6	3.6
甲酸钙	0.2	0.2	0.2	0.2
聚乙烯亚胺 600, EO20	1.6	1.6	---	1.6
聚乙烯亚胺 600, EO24, PO16	1.6	---	2.0	1.6

[0125]

DTPA	0.3	0.3	0.3	0.3
Tiron [®]	0.8	0.8	0.8	0.8
光学增白剂[7]	0.3	0.3	0.3	0.3
NaOH	4.0	9.3	4.0	9.3
异丙基苯磺酸钠	1.1	1.1	1.1	1.1
甲酸钠	0.2	0.2	0.2	0.2
美观染料	0.03-1.0	0.03-1.0	0.03-1.0	0.03-1.0
任选的其它香料	0.5-3.0	0.5-3.0	0.5-3.0	0.5-3.0
得自实施例-2的香料	0.15-1.0	0.15-1.0	0.15-1.0	0.15-1.0
水和溶剂	余量	余量	余量	余量
pH	5.0	8.0	5.0	8.0

[0126] HSAS 仲烷基硫酸盐, 酸形式

[0127] DTPA 二亚乙基三胺五乙酸 (DTPA)

[0128] Tiron 4,5-二羟基-1,3-苯二磺酸二钠盐一水合物

[0129] 根据实施例2中所示的香料, 制备具有香料的液体织物增强组合物。

[0130]

	A	B	C	D
成分	活性物质重量%	活性物质重量%	活性物质重量%	活性物质重量%
FSA ¹	12	21	18	14
低分子量醇	1.95	3.0	3.0	2.28
结构剂 ^{2,3}	1.25 ^c	—	0.2 ^f	—
任选的其它游离(纯)香料	1.50	1.8	2.0	1.50
得自实施例-2的游离(纯)香料	0.3	0.7	—	—
任选的其它包封香料 ⁴	—	0.6	—	0.6
得自实施例-2的包封香料	—	—	0.6	0.6
包含香料的微胶囊和得自实施例-2的香料 ⁵	—	1.85	1.85	3.7
氯化钙	0.10	0.12	0.1	0.45
DTPA ⁶	0.005	0.005	0.005	0.005
防腐剂(ppm) ⁷	5	5	5	5
消泡剂 ⁸	0.015	0.15	0.11	0.011
聚乙烯亚胺 ⁹	0.15	0.05	—	0.1
递送增强	0.1	0.1	0.2	0.05
PDMS乳液 ¹⁰	—	0.5	1	2.0

[0131]

分散剂 ¹¹	—	—	0.5	0.2
有机硅氧烷	5	—	—	—
前端稳定性辅助 ^{12,13}	0.06 ¹¹	0.63 ¹²	0.36 ¹¹	0.14 ¹²
染料(百万分之一 ppm)	40	11	30	40
氯化铵				0.10
盐酸	0.010	0.01	0.10	0.010
去离子水	余量	余量	余量	余量

[0132] (1) N,N-二(牛油酰氧基乙基)-N,N-二甲基氯化铵。

[0133] (2) 阳离子高直链淀粉玉米淀粉-以商品名HYLONVII[®]购自National Starch。

[0134] (3) 以商品名Rheovis[®] CDE购自BASF[®]的阳离子聚合物。

[0135] (4) 包封的香料和包封的恶臭减少组合物(PMC内)假定为约32%活性

[0136] (5) PMC为具有脲-甲醛外壳的易碎PMC,得自Encapsys of Appleton USA。

[0137] (6) 二亚乙基三胺五乙酸

[0138] (7) 19%活性的1,2-苯并异噻唑-3-酮(BIT)在双丙二醇和水中的水性溶液,以商品名Koralone B-119购自Dow Chemical

[0139] (8) 以商品名DC2310购自DowCorning[®]的硅氧烷消泡剂。

[0140] (9) 以商品名Lupasol[®]购自BASF的聚乙烯亚胺。

[0141] (10) 以商品名DC346得自DowCorning[®]的聚二甲基硅氧烷乳液。

[0142] (11) 非离子表面活性剂诸如TWEEN 20[™],或阳离子表面活性剂如得自Akzo Nobel的Berol 648和Ethoquad[®] C 25。

[0143] (12) 由六亚甲基二异氰酸酯(HDI)与a,w-硅氧烷二醇以及可从Wacker Silicones (Munich, Germany) 商购获得的N'-(3-(二甲基氨基)丙基)-N,N-二甲基-1,3-丙二胺(Jeffcat Z130)或N-(3-二甲基氨基丙基)-N,N-二异丙醇胺(Jeffcat ZR50)反应制得的有机硅氧烷缩聚物。

[0144] (13) 得自Nissan Chemical Co.的Fineoxocol[®]180。

[0145] (14) 得自Sasol的Isofol[®]16。

[0146] 根据实施例2中所示的香料,制备具有香料的沐浴剂组合物。

[0147]

	A	B	C
月桂基聚氧乙烯醚-3 硫酸钠 (28%活性物质)	27.85%	27.85%	27.85%
水	适量	适量	适量
月桂基硫酸钠 (29%活性物质)	10.34	10.34	10.34
椰油酰氨基丙基甜菜碱 B (30%活性物质)	4.01	4.01	4.01
柠檬酸	0.18	0.18	0.18
苯甲酸钠	0.3	0.3	0.3
乙二胺四乙酸二钠	0.12	0.12	0.12
甲基氯异噻唑啉酮/甲基异噻唑啉酮	0.04	0.04	0.04
氯化钠	2.35	1.7	1.6
其它香料	1.25	1	2
得自实施例-2 的香料	0.25	0.175	0.25

[0148] QS-表明使用该材料以使总量达到100%。

[0149] 根据实施例2中所示的香料,制备具有香料的止汗剂组合物。

[0150]

	18.1 隐形固 体	18.2 隐形 固体	18.3 隐形 固体	18.4 软固 体	18.5 软固 体	18.6 软固 体
碱式三氯化铝错 甘氨酸粉末	24	24	24	26.5	26.5	26.5
环戊硅氧烷	适量	适量	适量	适量	适量	适量
聚二甲基硅氧烷	-	-	-	5	5	5
CO-1897 硬脂醇 NF	14	14	14	-	-	-
除臭的氯化蓖麻 油 MP80	3.85	3.85	3.85	-	-	-
二十二醇	0.2	0.2	0.2	-	-	-

[0151]

三山嵛精 (Tribehenin)	-	-	-	4.5	4.5	4.5
C 18-36 酸三甘 油酯	-	-	-	1.125	1.125	1.125
苯甲酸 C12-15 烷基酯	9.5	9.5	5	-	-	-
PPG-14 丁基醚	6.5	6.5	-	0.5	0.5	0.5
聚苯基三甲基硅 氧烷	3	-	3	-	-	-
白色凡士林	3	-	-	3	3	3
矿物油	1.0	1.0	1.0	-	-	-
任选的其它游离 (纯) 香料	1.0	0.75	2.0	0.75	1.0	1.25
得自实施例-2 的 游离 (纯) 香料	0.25	-	0.35	0.175	0.25	0.1
与得自实施例-2 的香料复合的 β - 环糊精	-	3.0	-	-	-	3.0
Talc Imperial 250 USP	3.0	3.0	3.0	-	-	-
载有得自实施例- 2 的香料的聚丙 烯酸酯微胶囊	-	-	1.9	-	-	-

[0152] 适量-表明使用该材料以使总量达到100%。

[0153] 本文所公开的量纲和值不应理解为严格限于所引用的精确值。相反,除非另外指明,否则每个这样的量纲旨在表示所述值以及围绕该值功能上等同的范围。例如,公开为“40mm”的量纲旨在表示“约40mm”。

[0154] 在具体实施方式中引用的所有文件都在相关部分中以引用方式并入本文中;对于任何文件的引用不应当解释为承认其是有关本发明的现有技术。如果此文献中术语的任何含义或定义与以引用方式并入本文的文献中相同术语的任何含义或定义相冲突,将以此文献中赋予该术语的含义或定义为准。

[0155] 虽然已经举例说明和描述了本发明的具体实施方案,但是对于本领域技术人员来说显而易见的是,在不脱离本发明的实质和范围的情况下可作出多个其它改变和修改。因此,本文旨在所附权利要求中涵盖属于本发明范围内的所有此类改变和修改。