

## Zusammenfassung

Das ungesättigte makrocyclische Keton (*E/Z*)-8-Cyclohexadecenon (8-CHD; Globanone®) ist ein begehrter Moschusriechstoff für die Duftstoffindustrie und wird industriell über zwei Reaktionsstufen, ausgehend vom makrocyclischen 1,9-Cyclohexadecadien (isomeres Gemisch: 1,9-CHDD), synthetisiert. In dieser Arbeit wurde die direkte Oxidation des 1,9-CHDD zu 8-CHD durchgeführt, ohne über die Zwischenstufe des Monoepoxids zu gehen. Mittels Wacker-Oxidation ließ sich das Zielprodukt 8-CHD selektiv unter milden Reaktionsbedingungen darstellen. Darüber hinaus gelang es, das anfänglich anaerobe Oxidationssystem unter Gesichtspunkten „Grüner Chemie“ mit Sauerstoff als finalem Oxidans zu koppeln. Die als Hauptnebenprodukte gebildeten 1,8- bzw. 1,9-Cyclohexadecandione konnten durch Baeyer-Villiger-Oxidation und Hydrierversuche in potenziell kosmetikrelevante Substanzklassen überführt und so Möglichkeiten einer effektiven Seitenstromnutzung aufgezeigt werden. Mechanistische Untersuchungen zur Klärung der Ursache für die Katalysatordeaktivierung lassen eine Inhibierung des Katalysators durch das reine (*E/E*)-1,9-CHDD vermuten und stellen ein großes Problem für das zugrundeliegende Reaktionssystem dar.

## Abstract

The unsaturated macrocyclic ketone (*E/Z*)-8-cyclohexadecenone (8-CHD; Globanone®) is a highly appreciated musk fragrance for the fragrance industry and is synthesized industrially in two reaction steps starting from the macrocyclic 1,9-cyclohexadecadiene (isomeric mixture: 1,9-CHDD). In the present work, direct oxidation of 1,9-CHDD to 8-CHD was performed in a single reaction step. Using a modified Wacker-type oxidation reaction, the target product 8-CHD was selectively synthesized under mild reaction conditions. The initially anaerobic oxidation system was furthermore successfully coupled with oxygen as the final oxidant under the aspects of "green chemistry". The 1,8- and 1,9-cyclohexadecanediones formed as main side-products and considered as waste products were converted into potentially cosmetically relevant substance classes by Baeyer-Villiger oxidation and hydrogenation. Mechanistic investigations revealed that the catalyst was presumably inhibited by one of the diene isomers and presented a major drawback for this Wacker-type oxidation.