

Untersuchungen zur thermischen Stabilität von mono- und disubstituierten Alkylaromaten

Von F. WOLF und G. SCHWACHULA

Mit 3 Abbildungen

Inhaltsübersicht

Zur Untersuchung der bei der katalytischen Dehydrierung auftretenden Nebenreaktionen wurden eine Reihe von reinen Alkylaromaten unter Dehydrierungsbedingungen pyrolysiert. Aus der gaschromatographischen Analyse der Endprodukte und aus dem Vergleich der Crackingwerte konnten Aussagen über die thermische Stabilität von mono- und disubstituierten Alkylaromaten gemacht werden.

Für die Synthese von Ionenaustauscherharzen auf Polymerisationsbasis dient Divinylbenzol als vernetzende Komponente bei der Erzeugung eines unlöslichen, nur noch begrenzt quellbaren Styrol/Divinylbenzol-Copolymerisates.

Divinylbenzol wird technisch durch katalytische Dehydrierung von Diäthylbenzol unter Wasserdampfzusatz hergestellt.

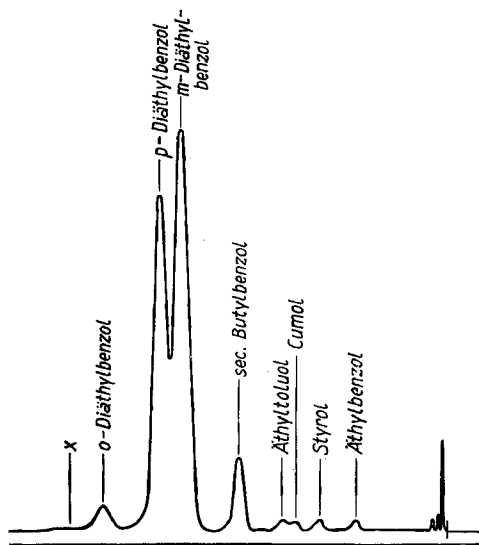
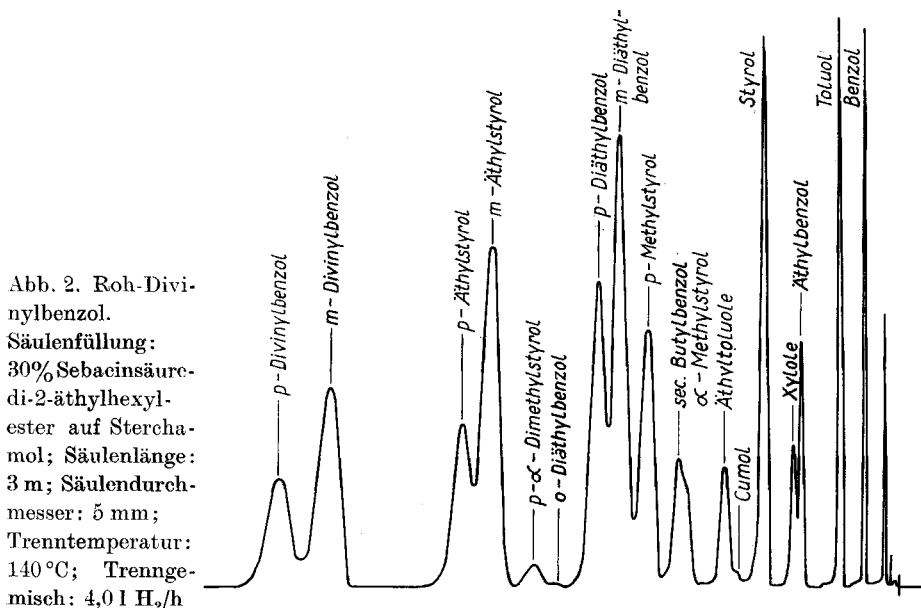


Abb. 1. Roh-Diäthylbenzol.
Säulenfüllung: 30% Sebacinsäure-di-2-äthylhexylester auf Sterchamol; Säulenlänge: 3 m; Säulendurchmesser: 4 mm; Trenntemperatur: 140 °C; Trenngemisch: 4,01 H₂/h; Probenmenge: 10 µl

Über die gaschromatographische Analysenmethodik für Divinylbenzol haben wir vor kurzem an anderer Stelle berichtet¹⁾.

Abb. 1 zeigt ein Gaschromatogramm des zur Dehydrierung eingesetzten Diäthylbenzols, Abb. 2 ein Gaschromatogramm des Roh-Divinylbenzols nach der Dehydrierung.

Aus Abb. 2 ist zu sehen, daß neben dem gewünschten Reaktionsprodukt Divinylbenzol auch Äthylstyrol als Zwischenprodukt sowie entsprechende Abbauprodukte durch Abspaltung von Alkylresten auftreten.



Zur Klärung der Frage, welche Verbindungen unter den Inhaltsstoffen des Roh-Divinylbenzols während der Dehydrierungsreaktion am stärksten zu einem Abbau neigen, wurde eine Reihe von reinen mono- und disubstituierten Alkyларomaten hinsichtlich ihrer thermischen Stabilität in einem Laborreaktor getestet.

Abb. 3 zeigt die für diese Versuche verwendete Apparatur.

Als Katalysator diente der bekannte technische gelbe Styrolkontakt (144 G) auf Basis Zinkoxid/Chromoxid (Katalysatorkorndurchmesser: Kontaktrohrdurchmesser = 1:12). Das Leervolumen des Reaktors betrug 300 ml. Die Reaktionstemperatur wurde bei $650^\circ \pm 10^\circ\text{C}$ gehalten. Die Temperaturmessung erfolgte an der Außenwand des Kontaktrohres. Das

¹⁾ G. SCHWACHULA u. F. WOLF, Chem. Technik 18, Heft 7, S. 421–424 (1966).

Verhältnis von eingesetzter organischer Phase zu gleichzeitig zugespeistem Wasser lag für alle Versuche bei 1:4. Die Kontaktbelastung belief sich auf 50 ml organische Phase/300 ml Kontaktvolumen/Stunde.

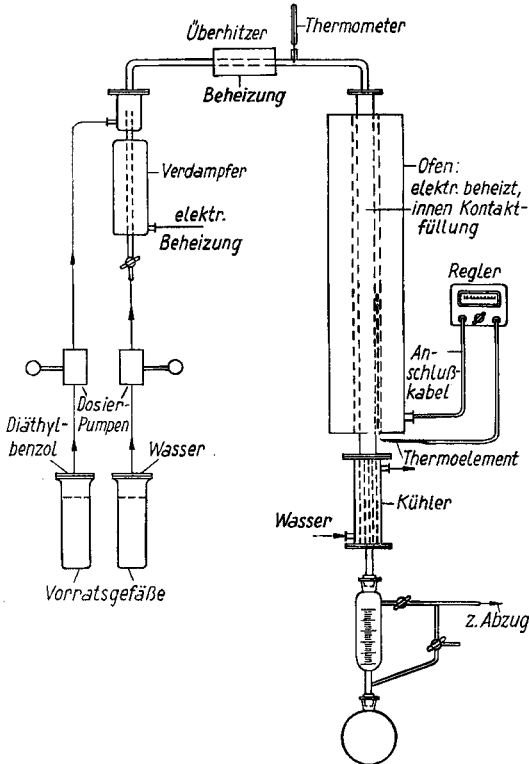


Abb. 3.
Dehydrierungsapparatur (Schema)

Von der organischen Phase wurden nach der Dehydrierung Volumen, Gewicht und Brechungsindex bestimmt. Die Ermittlung ihrer Zusammensetzung erfolgte gaschromatographisch.

Aus den Meßwerten wurde der gewichtsmäßige Anteil der Abbauprodukte, der nicht im Endprodukt erscheint, d. h. gasförmig entweicht (Kondensationstemperatur 20 °C), als Crackung berechnet:

$$C_r = \frac{m_A - m_E}{m_A} \cdot 100 (\%).$$

C_r = Crackung,

m_A = Menge des Ausgangsproduktes (g),

m_E = Menge des Endproduktes (g).

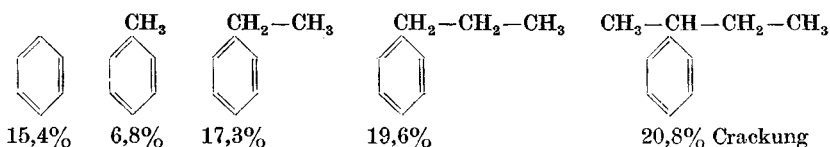
Tab. 1 zeigt eine Zusammenstellung der Ergebnisse zur thermischen Stabilität von mono- und disubstituierten Alkylaromaten unter den Reaktionsbedingungen der Dehydrierung.

Tabelle 1

Ergebnisse der Pyrolyse unter Dehydrierbedingungen

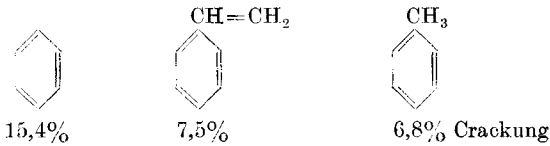
Lfd. Nr.	Eingesetzte Substanz	n_D^{20} vor Dehydrierung	n_D^{20} nach Dehydrierung	Dosierte Menge g	Endprodukt-Menge g	Crackung %
1	Benzol	1,5030	1,5038	22,1	18,70	15,4
2	Toluol	1,4992	1,5005	21,6	20,12	6,8
3	Äthylbenzol	1,4988	1,5294	21,6	17,86	17,3
4	m-Xylol	1,4990	1,5025	21,6	18,45	14,6
5	Styrol	1,5492	1,5459	22,6	20,90	7,5
6	iso-Propylbenzol	1,4930	1,5391	21,4	16,43	23,2
7	n-Propylbenzol	1,4980	1,5047	22,1	17,78	19,6
8	p-Äthyltoluol	1,4978	1,5345	21,4	17,52	18,1
9	p-Methylstyrol	1,5405	1,5405	22,4	20,58	8,1
10	sec. Butylbenzol	1,4920	1,5223	21,4	16,95	20,8
11	p-Diäthylbenzol	1,4979	1,5465	21,5	19,10	11,2
12	Diäthylbenzol (Gemisch)	1,4955	1,5518	21,6	17,35	19,7
13	p-Äthylstyrol	1,5323	1,5499	22,8	18,25	20,0
14	p-Divinylbenzol	1,5735	1,5715	22,6	18,01	20,3
15	Allylbenzol	1,5171	1,5478	22,8	17,42	23,6
16	Allyltoluol	1,5121	1,5361	22,4	18,55	17,2
17	p-Äthylallylbenzol	1,5120	1,5472	22,3	17,57	21,1
18	β -Methylstyrol	1,5486	1,5460	22,4	16,58	26,0
19	sec. Butyltoluol	1,4962	1,5416	21,6	12,35	42,8
20	sec. Butyläthylbenzol	1,4960	1,5331	21,5	16,81	21,8

Betrachtet man in Tab. 1 die Crackung, d. h. den durch thermischen Abbau gasförmig entwickelten Teil des Einsatzproduktes bei der homologen Reihe: Benzol, Toluol, Äthylbenzol, n-Propylbenzol, sec. Butylbenzol, so sieht man, daß die Crackung im Falle des Toluols ein Minimum aufweist und dann mit zunehmender Kohlenstoffzahl der Alkylketten ansteigt.

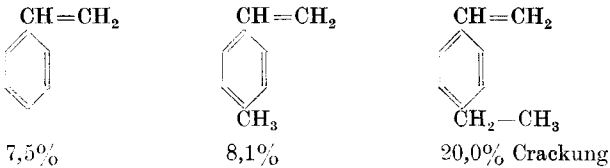


Die Einführung einer Methylgruppe an den Benzolkern bewirkt eine Stabilisierung, während die weitere Zunahme an CH_2 -Gruppen in der Alkylkette eine Senkung der thermischen Beständigkeit nach sich zieht. Auch die Ein-

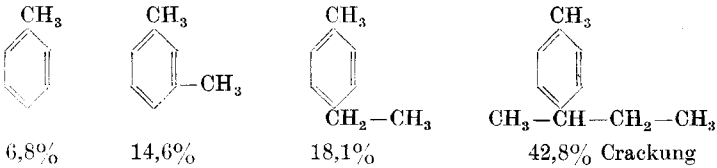
führung einer Vinylgruppe an den Benzolkern stabilisiert diesen, allerdings nicht so stark wie im Falle einer Methylgruppe.



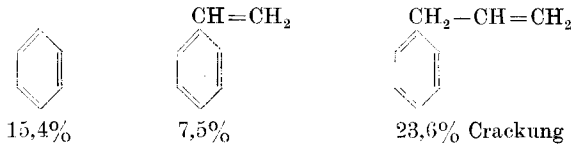
Betrachtet man die Ergebnisse für Alkylstyrole im Vergleich zu Styrol, so ergibt sich, daß die stabilisierenden Wirkungen der Vinyl- und Methylgruppe sich nicht additiv verhalten, sondern auch in dieser Reihe eine Zunahme der Crackung mit steigender Kohlenstoffzahl zu verzeichnen ist.



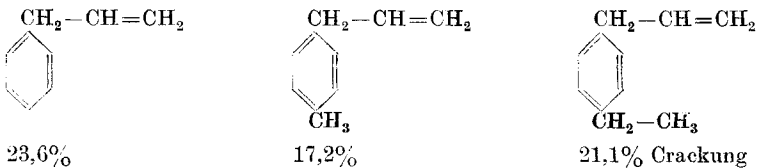
Das gleiche gilt für die Reihe des alkylsubstituierten Toluols, in der ebenfalls die Einführung der zweiten Methylgruppe keine weitere Stabilisierung gegenüber Toluol hervorruft.



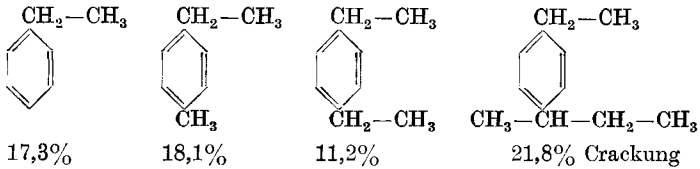
Ist die stabilisierend wirkende Vinylgruppe durch eine Methylengruppe vom Benzolkern getrennt, so wird ihre Wirkung aufgehoben. Allylbenzol ist thermisch instabiler als Benzol.



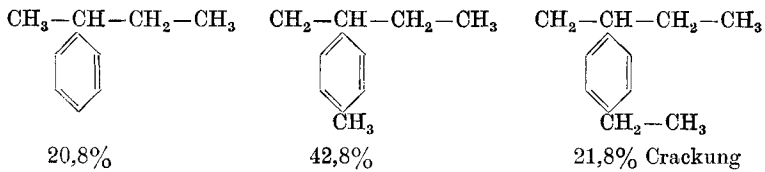
Substituiert man aber das Allylbenzol mit einer weiteren Alkylgruppe, so folgt durch diese eine Erhöhung der Stabilität, wobei auch die Äthylgruppe noch förderlich ist.



Dies kompliziert bei disubstituierten Alkylaromaten die Aussagen beträchtlich. Vergleicht man nämlich weiterhin die alkylsubstituierten Äthylbenzole, so ergibt sich, daß nicht die Einführung einer Methylgruppe eine zu erwartende Verbesserung der Stabilität bewirkt, sondern die Einführung einer Äthylgruppe.

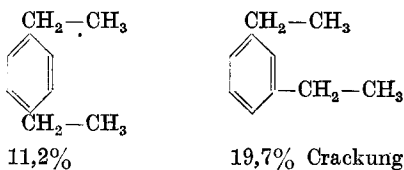


Ein ähnliches Bild zeigt sich bei den substituierten Butylbenzolen.

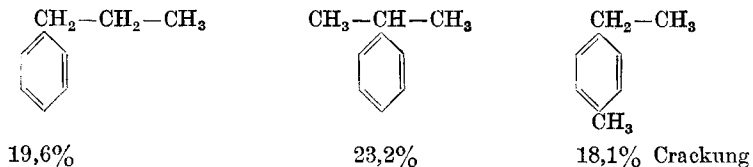


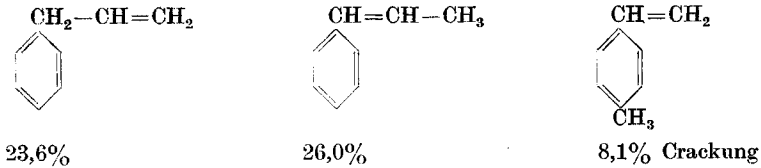
Es ergibt sich, daß man bei der Beurteilung der thermischen Beständigkeit von disubstituierten Alkylaromaten die Wirkung beider Seitengruppen und ihre gegenseitige Beeinflussung berücksichtigen muß. Dabei bezieht sich diese Wechselwirkung offenbar nicht nur auf die Art und Länge der beiden Substituenten, sondern auch auf ihre Stellung zueinander.

So finden wir bei Einsatz von p-Diäthylbenzol eine geringere Crackung als bei dem Isomergemisch des Diäthylbenzols.



Diese unterschiedliche thermische Beständigkeit der isomeren Diäthylbenzole findet sich auch bei anderen isomeren Verbindungen wieder und ist nicht auf disubstituierte Alkylbenzole beschränkt. Dies zeigt auch ein Vergleich der Crackwerte von n-Propylbenzol, iso-Propylbenzol und p-Methyläthylbenzol, des weiteren von vinylgruppenhaltigen Verbindungen, wie Allylbenzol, β -Methylstyrol und p-Methylstyrol.





Betrachtet man die drei für die Divinylbenzolherstellung wichtigen Produkte p-Diäthylbenzol, p-Äthylstyrol und p-Divinylbenzol, so zeigt sich, daß hier scheinbar die Einführung weder der einen noch der zweiten Vinylgruppe eine Verbesserung der thermischen Stabilität gegenüber Diäthylbenzol bewirkt.

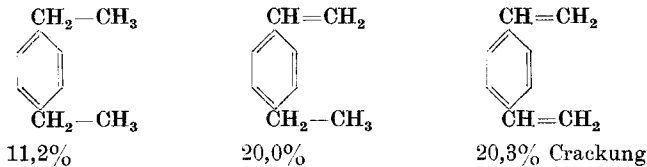
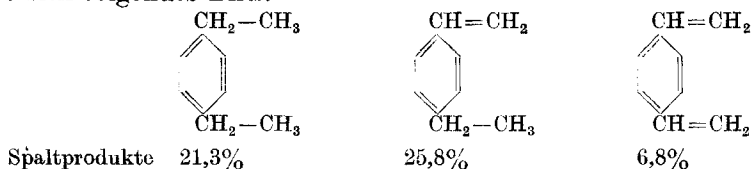


Tabelle 2

Gaschromatographische Bestimmung des Spaltungsanteils der zur Pyrolyse eingesetzten Verbindungen: p-Diäthylbenzol, Diäthylbenzol-Isomerengemisch, p-Äthylstyrol, p-Divinylbenzol

Entstandene Substanzen	Eingesetztes Produkt			
	p-Diäthylbenzol Gew.-%	Diäthylbenzol-Isomerengemisch Gew.-%	p-Äthylstyrol Gew.-%	p-Divinylbenzol Gew.-%
Benzol	0,14	2,62	0,21	1,33
Toluol	0,69	4,35	1,40	—
Äthylbenzol	0,78	1,38	7,15	—
Xylol	0,78	2,54	—	—
Styrol	3,30	12,85	9,59	1,04
iso-Propylbenzol	—	—	—	—
Äthyltoluol	1,75	1,64	0,52	—
sec. Butylbenzol	—	1,82	—	—
p-Methylstyrol	13,88	15,57	6,90	4,44
m-Diäthylbenzol	—	6,08	—	—
p-Diäthylbenzol	22,25	3,75	5,03	3,73
o-DÄB	—	—	—	—
m-Äthylstyrol	—	8,94	—	—
p-Äthylstyrol	18,45	2,85	37,00	5,22
m-Divinylbenzol	—	23,80	—	—
p-Divinylbenzol	38,04	11,81	32,20	84,30

Vergleicht man mit den Crackungswerten dieser Verbindungen ihre gaschromatographische Zusammensetzung nach der Pyrolysereaktion (Tab. 2), so ist ersichtlich, daß beim p-Divinylbenzol mit dem höchsten Wert der Crackung die geringsten Mengen an Spaltprodukten auftreten. Dabei werden als Spaltprodukte nur die aromatischen Verbindungen gerechnet, die um mindestens ein Kohlenstoffatom ärmer als das jeweilige Einsatzprodukt sind, nicht aber die durch partielle Hydrierung entstandenen Verbindungen Äthylstyrol und Diäthylbenzol. Zieht man diesen gaschromatographisch ermittelten Anteil an Spaltprodukten bei den drei eingesetzten Verbindungen p-Diäthylbenzol, p-Äthylstyrol und p-Divinylbenzol zum Vergleich heran, so ergibt sich folgendes Bild:



Daraus läßt sich ableiten, daß die Einführung einer zweiten Vinylgruppe (p-Divinylbenzol) eine erhöhte Instabilität des Benzolringes nach sich zieht, so daß nicht bevorzugt eine Abspaltung der Seitenketten erfolgt, sondern der Ring aufbricht und damit der höhere Crackungswert folgert. Da letzteres aber fast genau so hoch wie beim Äthylstyrol gefunden wird, Äthylstyrol jedoch einen hohen Anteil an aromatischen Spaltprodukten bildet, ist Divinylbenzol an sich stabiler als Äthylstyrol.

Die hier aufgezeigten Ergebnisse über die unterschiedliche thermische Stabilität verschiedener mono- und disubstituierter Alkyларomaten lassen sich u. a. deuten, wenn man von der Tatsache ausgeht, daß im Benzol die π -Elektronenverteilung durch Einführung von Substituenten beeinflusst wird.

Dabei bewirkt die Resonanzenergie eine Erhöhung der Stabilität des Moleküls, wie im Falle des Benzols und seiner Homologen (aromatischer Zustand) bekannt ist. Benzol besitzt eine Resonanzenergie von etwa 36 kcal/Mol. Die gesättigten Alkylderivate des Benzols zeigen dagegen einen etwas geringeren Wert.

WHELAND²⁾ gibt für einige Alkyларomaten folgende über Verbrennungswärmen bestimmte Resonanzenergien an:






Benzol	36,0 kcal/Mol
Toluol	35,4 kcal/Mol
Äthylbenzol	35,2 kcal/Mol
n-Propylbenzol	35,4 kcal/Mol
m-Xylol	34,8 kcal/Mol
Styrol	38,1 kcal/Mol

²⁾ G. W. WHELAND, Resonance in Organic Chemistry, New York 1955.

Neuere Werte der Verbrennungsenthalpien sind bei ROSSINI und Mitarbeitern³⁾ zu finden, aus denen man unter Benutzung der Inkremente nach KLAGES⁴⁾²⁾ die Resonanzenergie berechnen kann.

Für einige Verbindungen, die im Rahmen dieser Arbeit von Interesse waren, sind in der Literatur keine Verbrennungsenthalpien zu finden. Wir bestimmten in einem adiabatischen Kalorimeter (der Firma Janke und Kunkel [Stauffen/Breisgau]) die fehlenden Verbrennungsenthalpien. Über die Einzelheiten der experimentellen Durchführung werden wir demnächst an anderer Stelle berichten⁵⁾. Hier sei nur erwähnt, daß wir einer Vorschrift von MACKLE und MAYRICK⁶⁾ folgend die Flüssigkeiten in Polyäthylenkapseln zur Verbrennung brachten und damit in der für die Bestimmung von Verbrennungswärmen geforderten Fehlergrenze von 0,1% lagen. Allerdings tritt bei Substanzen mit einem Siedepunkt unter 180 °C ein geringer Abdampfverlust durch die Polyäthylenfolie auf, der bei MACKLE und MAYRICK nicht beschrieben ist und bei der Errechnung der Verbrennungsenthalpie berücksichtigt werden muß.

Vergleicht man die gefundenen Crackungswerte der eingesetzten Verbindungen mit den Resonanzenergien, so ergibt sich folgendes Bild:

		CH_3 	CH_2-CH_3 	$\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_3$ 	$\text{CH}_3-\text{CH}(\text{CH}_3)-\text{CH}_3$ 
RE (kcal/Mol)	36,0 (L)	35,4 (L)	35,2 (L)	35,4 (L)	34,6 (L)
Cr (%)	15,4	6,8	17,3	19,6	23,6

L = Literaturwert der Resonanzenergie (RE), E = eigene Messung,
Cr = Crackung

In Übereinstimmung mit den Ergebnissen der Pyrolyseversuche nimmt die Resonanzenergie der Alkylaromaten mit steigender Kohlenstoffatomzahl im allgemeinen ab. Bei Toluol wird eine erhöhte Stabilität im Vergleich zu Benzol hinsichtlich der Crackung gefunden, während die Resonanzenergie demgegenüber abnimmt. Man könnte annehmen, daß die erhöhte Stabilität auf den Hyperkonjugationseinfluß der Methylgruppe zurückzuführen ist, der sich allerdings nach neuen Werten der Verbrennungsenthalpie in der Resonanzenergie nicht widerspiegelt, während er bei reaktionskinetischen Messungen als gesichert gelten darf.⁷⁾

³⁾ F. D. ROSSINI, K. S. PITZER, R. L. ARNETT, R. M. BRAUN u. G. C. RIMENTEL, Selected Values of Physical and Thermodynamic Properties of Hydrocarbons and Related Compounds, Pettsburth, Pa., 1959.

⁴⁾ F. KLAGES, Ber. dtsch. chem. Ges. **82**, 358 (1949).

⁵⁾ G. SCHWACHULA, F. WOLF, K. BIER u. U. BIERING, im Druck.

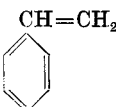
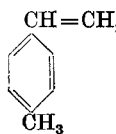
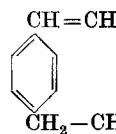
⁶⁾ H. MACKLE u. R. G. MAYRICK, Pure Appl. Chem. **2**, 25 (1961).

⁷⁾ J. W. BAKER, Hyperconjugation, Oxford 1952.

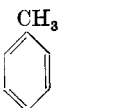
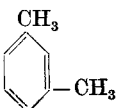
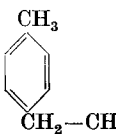
Es muß in diesem Zusammenhang betont werden, daß der hier durchgeführte Vergleich zwischen den Crackungswerten und der Resonanzenergie rein qualitativ zu sehen ist. Die Resonanzenergien beziehen sich auf die Energie eines Moleküls im Grundzustand, während z. B. bei der Dealkylierung Moleküle im angeregten Zustand reagieren.

Geht man aber davon aus, daß bei der Dehydrierung der untersuchten Alkylaromaten eine Chemisorption der Substanzen an der Katalysatoroberfläche stattfindet, bei der eine Wechselwirkung zwischen dem Kontakt und dem π -Elektronensextett des Phenylringes eintritt, und alle eingesetzten Alkylaromaten in erster Näherung dadurch gleichartig beeinflußt werden, so sind Art und Ausmaß der Dehydrierung bzw. Dealkylierung u. a. doch von der Wechselwirkung der Substituenten mit dem Phenylring und der Substituenten untereinander abhängig. Eine Voraussetzung ist, wie es hier erfolgt, daß die Versuche unter vergleichbaren, konstanten Bedingungen durchgeführt werden. In einer folgenden Arbeit wird der Einfluß von verschiedenen Katalysatoren beschrieben.

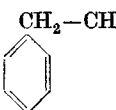
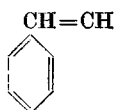
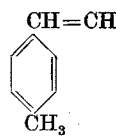
Eine weitere Übereinstimmung zwischen den gemessenen Crackungswerten und der Abstufung der Resonanzenergien findet man bei den Verbindungen: Styrol, p-Methylstyrol und p-Äthylstyrol

			
RE (kcal/Mol)	38,1 (L)	36,5 (L)	34,8 (E)
Cr (%)	7,5	8,1	20,0

sowie in der Reihe: Toluol, m-Xylol und p-Methyläthyl-benzol

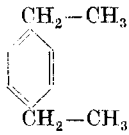
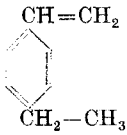
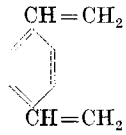
			
RE (kcal/Mol)	35,4 (L)	34,8 (L)	34,6 (L)
Cr (%)	6,8	14,6	18,1

Demgegenüber zeigt ein Vergleich bei den isomeren Verbindungen Allylbenzol, β -Methylstyrol und p-Methylstyrol deutlich, daß neben der Resonanzenergie andere Einflußgrößen die thermische Stabilität bestimmen.

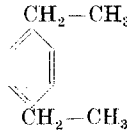
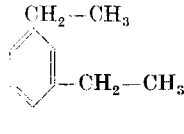
			
RE (kcal/Mol)	33,7 (E)	36,6 (L)	36,5 (L)
Cr (%)	23,6	26,0	8,1

Zieht man wiederum den gaschromatographisch ermittelten Prozentgehalt an aromatischen Spaltprodukten heran, so zeigt dieser eine qualitative Übereinstimmung mit den ermittelten Crackungswerten. Der Spaltungsanteil beträgt für Allylbenzol 8,9%, für β -Methylstyrol 14,2% und für p-Methylstyrol 6,1%. Der Übereinstimmung zwischen dem Verlauf der Resonanzenergien der betrachteten Verbindungen und ihren Crackungswerten wird noch dadurch verfälscht, daß Allylbenzol und β -Methylstyrol unter den Bedingungen der Dehydrierung im Reaktor zu Hydrinden und Inden cyclisieren, die ihrerseits stabile Resonanzhybride darstellen⁸⁾.

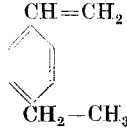
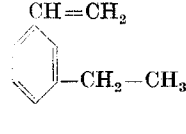
Ähnliches läßt sich für die schon vorhin diskutierten Verbindungen p-Diäthylbenzol, p-Äthylstyrol und p-Divinylbenzol feststellen:

			
RE (kcal/Mol)	34,1 (L)	34,8 (E)	38,5 (E)
Cr (%)	11,1	20,0	20,3
aromatische Spaltprodukte (%)	21,3	25,8	6,8

Dabei erweist sich das p-Diäthylbenzol entgegen seiner relativ geringen Resonanzenergie als recht stabil hinsichtlich der thermischen Stabilität, während das m-Diäthylbenzol bei fast gleicher Resonanzenergie einen doppelt so großen Crackungswert aufweist.

		
RE (kcal/Mol)	34,1 (L)	34,0 (L)
Cr (%)	11,2	23,0

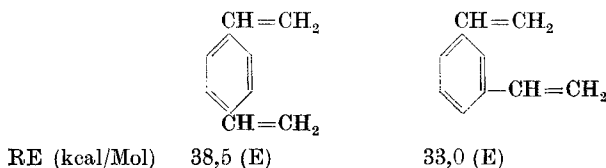
Für einen Vergleich der thermischen Stabilitäten von m- und p-Äthylstyrol sowie von m- und p-Divinylbenzol mangelte es uns an der Möglichkeit, die meta-Verbindungen in größeren Mengen herzustellen, während wir sie in kleineren Mengen in einem präparativen Gaschromatographen isolieren konnten⁹⁾ und ihre Verbrennungsenthalpien bestimmten.

		
RE (kcal/Mol)	34,8 (E)	36,0 (E)

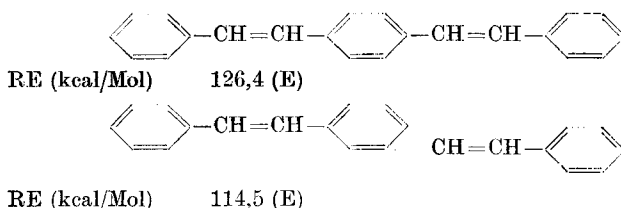
⁸⁾ G. SCHWACHULA, Dissertation Martin-Luther-Universität Halle 1964, Tab. 27.

⁹⁾ G. SCHWACHULA u. M. HENKE, Die präparative gaschromatographische Trennung der Divinylbenzole, in Vorbereitung.

Es zeigte sich dabei, daß die para-ständige Äthylgruppe die Resonanzfähigkeit des Vinylbenzols mehr beeinträchtigt als die meta-ständige.



Die beiden para-ständigen Vinylgruppen des Divinylbenzols sind über den Phenylring hinweg in der Lage zu konjugieren. Daraus resultiert eine höhere Resonanzenergie als im Falle der metaständigen Vinylgruppen des m-Divinylbenzols. Dieser Unterschied zeigt sich noch deutlicher in den Verbindungen m- und p-Distyrylbenzol, die wir als Modellsubstanzen synthetisierten und ihre Verbrennungsenthalpien bestimmten.



Hier unterscheiden sich die meta- und para-Verbindung um etwa 12 kcal/Mol. Die Resonanzenergie der meta-Verbindung ist praktisch die Summe der Resonanzenergien von Stilben 76,0 kcal/Mol und Styrol 38,1 kcal/Mol. Eine Beeinflussung der beiden Styrolgruppierungen untereinander findet nicht statt. Hingegen wird durch die erhöhte Konjugationsmöglichkeit beim p-Distyrylbenzol die Resonanzenergie gegenüber der entsprechenden Summe aus Stilben und Styrol beträchtlich erhöht (12,3 kcal/Mol).

Zusammenfassung

Faßt man die Ergebnisse der vorliegenden Arbeit nochmals kurz zusammen, so lassen sich folgende Schlußfolgerungen hinsichtlich der thermischen Stabilität von mono- und Dialkylaromaten unter den Bedingungen der Dehydrierung ziehen:

1. Die thermische Stabilität von monosubstituierten Alkylaromaten nimmt mit zunehmender Länge der Seitenkette ab.
2. Durch Einführung einer Methyl- bzw. Vinylgruppe wird der Benzolkern stabilisiert.
3. Führt man in einen Alkylaromaten einen weiteren Substituenten ein, so ist dessen Beitrag zur Erhöhung der Stabilität abhängig von der Art des Ersts substituenten. Zur Beurteilung der Stabilität solcher Verbindungen

müssen beide Substituenten in ihrer Wirkung zueinander in Betracht gezogen werden.

4. Bei disubstituierten Alkylaromaten ist die Stabilität nicht allein von der Art der Substituenten, sondern auch von ihrer Stellung zueinander abhängig.

5. Auch bei monosubstituierten isomeren Alkylbenzolen findet man eine Abhängigkeit der thermischen Stabilität von der Anordnung der Kohlenstoffatome.

6. Für die von uns gefundene Stabilisierung der einzelnen Alkylaromaten durch bestimmte Alkylgruppen sind u. a. wahrscheinlich Mesomerieeffekte (Erhöhung der Resonanzenergie und Hyperkonjugation) verantwortlich.

Halle, Institut für Technische Chemie der Martin-Luther-Universität
Halle-Wittenberg, und
Wolfen, VEB Farbenfabrik.

Bei der Redaktion eingegangen am 13. Juni 1967.