



SCHWEIZERISCHE EIDGENOSSENSCHAFT
BUNDESAMT FÜR GEISTIGES EIGENTUM

⑪ CH 649 988 A5

⑤① Int. Cl. 4: C 07 C 121/75
C 09 K 19/32
C 09 K 19/46

Erfindungspatent für die Schweiz und Liechtenstein

Schweizerisch-liechtensteinischer Patentschutzvertrag vom 22. Dezember 1978

⑫ **PATENTSCHRIFT** A5

⑳ Gesuchsnummer: 4257/82

㉔ Anmeldungsdatum: 13.07.1982

㉔ Patent erteilt: 28.06.1985

④⑤ Patentschrift
veröffentlicht: 28.06.1985

㉔ Inhaber:
Merck Patent Gesellschaft mit beschränkter
Haftung, Darmstadt 1 (DE)

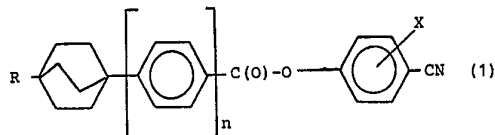
㉔ Erfinder:
Kelly, Stephen Malcolm, Dr., Oberrohrdorf

㉔ Vertreter:
Bovard AG, Bern 25

⑤④ **Nematogene Verbindungen und Flüssigkristallmischungen mit diesen.**

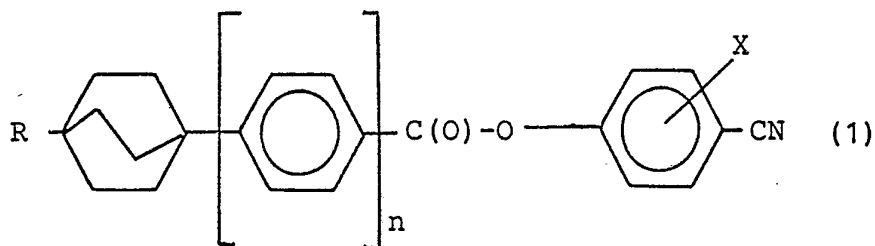
⑤⑦ Neue Nematogene zur Verwendung in Flüssigkristallmischungen für elektrooptische Anzeigen haben die in Anspruch 1 angegebene Formel (1), in der R eine Alkyl-, Alkoxy- oder Alkanoyloxygruppe mit 1 bis 12 C-Atomen im geradkettigen, verzweigten und gegebenenfalls chiralen Alkylteil, n Null oder Eins und X Fluor, Chlor, Brom oder Cyano bedeuten.

Die neuen Verbindungen ermöglichen es, smektische Phasen der damit hergestellten Flüssigkristallmischungen auszuschalten oder mindestens zurückzudrängen, ohne dass dadurch der Klärpunkt bzw. die Schwellspannung nachteilig verändert wird.



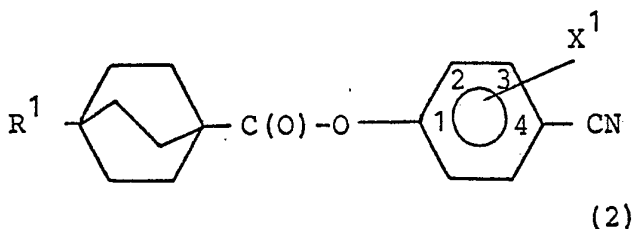
PATENTANSPRÜCHE

1. Nematogene Verbindungen zur Verwendung in elektrooptischen Anzeigen, gekennzeichnet durch die Formel (1)



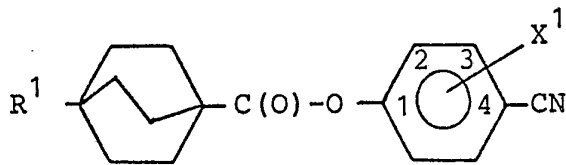
in der R eine Alkyl-, Alkoxy- oder Alkanoyloxygruppe darstellt, deren Alkylteil 1 bis 12 C-Atome in gerader oder verzweigter und gegebenenfalls chiraler Kette enthält, n Null oder Eins ist und X ein Halogenatom gewählt aus Fluor, Chlor und Brom oder die Cyanogruppe bedeutet.

2. Verbindung nach Anspruch 1, gekennzeichnet durch die Formel (2)



in der R eine Alkyl-, Alkoxy- oder Alkanoyloxygruppe darstellt, deren Alkylteil 1 bis 12 C-Atome in gerader oder verzweigter und gegebenenfalls chiraler Kette enthält, n Null oder Eins ist und X ein Halogenatom gewählt aus Fluor, Chlor und Brom oder die Cyanogruppe bedeutet.

8. Mischung nach Anspruch 7, dadurch gekennzeichnet, dass die Verbindung der Formel (2) entspricht



in der R¹ und X¹ die in Anspruch 7 für R bzw. X angegebene Bedeutung haben.

9. Mischung nach Anspruch 7, dadurch gekennzeichnet, dass sie zu 1 bis 50 Mol% aus Verbindungen der Formel (1) besteht.

Die meisten elektrooptischen Geräte bzw. Anzeigen, z.B. solche der Typen TN, GH, HN usw., benötigen nematische Flüssigkristallmischungen, deren nematische Mesophase sich über einen relativ breiten und z.B. von -30°C bis $+90^\circ\text{C}$ reichenden Bereich erstreckt.

in der R¹ und X¹ die in Anspruch 1 für R bzw. X angegebene Bedeutung haben.

3. Verbindung nach Anspruch 2, dadurch gekennzeichnet, dass R¹ in Formel (2) eine C₁-C₁₂-Alkyl- oder Alkoxygruppe und X¹ Halogen bedeutet.

4. Verbindung nach Anspruch 2, dadurch gekennzeichnet, dass X¹ in Formel (2) in 2-Stellung steht.

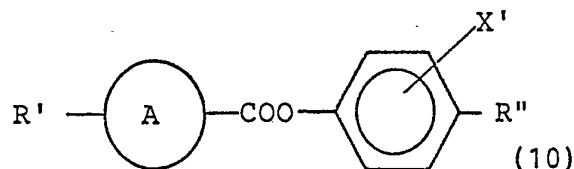
5. Verbindung nach Anspruch 2, dadurch gekennzeichnet, dass X¹ in Formel (2) in 3-Stellung steht.

6. Verbindung nach Anspruch 4, dadurch gekennzeichnet, dass X¹ in Formel (2) Fluor bedeutet und R¹ eine C₃-C₈-Alkylgruppe ist.

7. Flüssigkristallmischung mit nematischer Phase für elektrooptische Anzeigen, dadurch gekennzeichnet, dass die Mischung als Komponente mindestens eine Verbindung der Formel (1) enthält

Viele derartige Flüssigkristallmischungen oder flüssigkristalline Mischungen (auch kurz FK- oder LC-Mischungen genannt) bzw. deren als nematogene Verbindungen oder kurz als Nematogene bezeichneten Komponenten mit sonst guten elektrooptischen Eigenschaften zeigen aber im Gesamtesomorphiebereich bei Temperaturen unterhalb der nematischen Phase einen smektischen Bereich, der mehrere smektische Phasen umfassen kann, die auch als eingeschobene oder «injizierte» smektische Phasen bezeichnet werden; häufig erstrecken sich die injizierten smektischen Phasen bis zu relativ hohen Temperaturen im genannten Bereich und sind dann nachteilig, weil sie die Schaltzeiten oder «Ansprechzeiten» verlängern.

Aus der Literatur [siehe z.B. JP-A 7 455 579 und Gray, G.W. et al., Mol. Cryst. Liq. Cryst. 67 (1981) 1] ist es bekannt, dass Nematogene, die ein laterales Halogenatom enthalten, den smektischen Charakter von Flüssigkristallmischungen wirksam zurückdrängen können. Derartige Verbindungen sind zwar nicht kommerziell erhältlich, aber in verschiedenen Typen bekannt, z.B. in Form von zweikernigen Verbindungen der Formel (10)



in der X' das laterale Halogenatom ist und die Flügelgruppen R', R'' Gruppen ohne ausgeprägte Längspolarisierungswirkung sind, wie Alkylgruppen. Der Ring oder Kern A kann ein 1-Phenyl-4-en-rest sein und dann gegebenenfalls ebenfalls ein laterales Halogenatom X' tragen, oder einen aliphatischen Ring, z. B. einen 1-Cyclohexyl-4-en-ring darstellen, wie in den genannten Literaturstellen beschrieben. Ferner sind aus der Literatur [Gray, G. W., und Kelly, S. M., Mol. Cryst. Liq. Cryst. 75 (1981) 109] auch solche Verbindungen der Formel (10) bekannt, bei welchen der Ring A ein Bicyclo-(2,2,2)-octanring ist.

Wie in der zuletzt genannten Literaturstelle angegeben, verursacht das laterale Halogenatom X' fast immer eine häufig ganz drastische Erniedrigung des Klärpunktes, und zwar im Vergleich zu den entsprechenden Verbindungen, bei welchen X' durch ein Wasserstoffatom ersetzt ist.

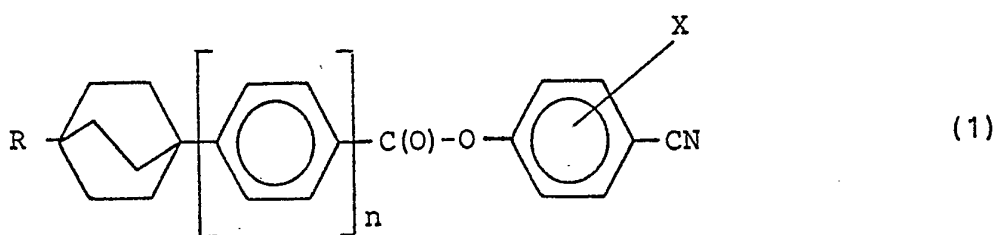
Die bekannten Verbindungen der Formel (10), insbesondere diejenigen mit X' = F, besitzen überdies eine schwach negative DK-Anisotropie ($-\Delta\epsilon$) und erhöhen daher die

Schwellenspannung (V_s) von Anzeigezellen mit verdrehter nematischer Phase (TN); ausserdem erniedrigen sie wegen ihres wie oben erläutert erniedrigten Klärpunktes auch den Klärpunkt einer sie enthaltenden Mischung.

Aufgabe der Erfindung ist es, neue nematogene Verbindungen anzugeben, welche ähnlich wie die bekannten Verbindungen der Formel (10) zum Zurückdrängen oder Ausschalten von smektischen Phasen von FK-Mischungen geeignet sind, aber die Nachteile der Verbindungen (10) nicht oder höchstens in sehr geringem Masse aufweisen, d. h. höhere Klärpunkte und positive Werte der DKA bieten.

Erfindungsgemäss wird diese Aufgabe durch neue Verbindungen der im folgenden angegebenen Formel (1) bzw. durch FK-Mischungen gelöst, welche mindestens eine Verbindung der Formel (1) als Komponente, z. B. in Mischung mit üblichen Nematogenen, enthalten.

Gegenstand der Erfindung sind daher neue nematogene Verbindungen der Formel (1)

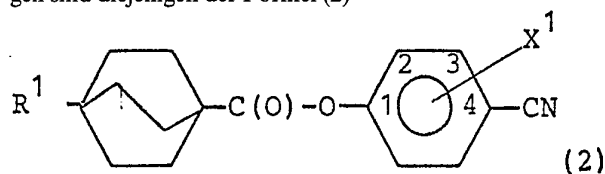


R bedeutet eine Alkyl- ($H_{2m+1}C_m-$), Alkoxy ($H_{2m+1}C_m-O-$) oder Alkanoyloxy- ($H_{2m+1}C_mC(O)-O-$) gruppe, in deren Alkylteil $H_{2m+1}C_m$ m eine Zahl von 1 bis 12 darstellt und die C-Atome in gerader oder verzweigter und gegebenenfalls chiraler Kette vorliegen. Beispiele für R sind dementsprechend Methyl-, Ethyl-, Propyl-, Butyl-, Pentyl-, Hexyl-, Heptyl-, Octyl-, Nonyl-, Decyl-, Undecyl- und Dodecylgruppen in der normalen oder einer verzweigtkettigen isomeren Form, sowie die entsprechenden Alkoxy- bzw. Alkanoyloxygruppen.

Beispiele für chirale Ketten sind die 3-Methylhexyl-, 3-Methylheptyl-, 3-Methyloctyl-, 3-Methylnonyl-, 3-Methyldecyl- und 3-Methylundecylkette sowie die entsprechenden 4-Methylalkylketten.

X in Formel (1) ist Fluor, Chlor, Brom oder Cyano; n bedeutet Null oder Eins, d. h. die Verbindungen der Formel (1) können zweikernig oder dreikernig sein.

Eine bevorzugte Gruppe erfindungsgemässer Verbindungen sind diejenigen der Formel (2)

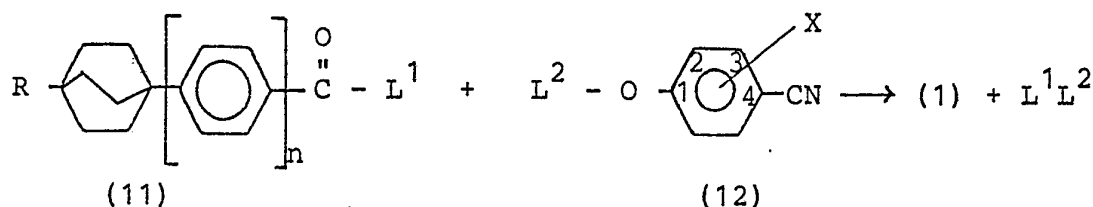


in der R¹ und X¹ die in Formel (1) für R bzw. X angegebene Bedeutung haben. Bei einer bevorzugten Gruppe erfindungsgemässer Verbindungen der Formel (2) bedeutet R¹ eine Alkoxygruppe oder insbesondere Alkylgruppe, vorzugsweise mit 3 bis 8 C-Atomen im Alkylteil, deren C-Atome in gerader Kette vorliegen, und X¹ das Fluoratom, vorzugsweise in 2-Stellung. Spezielle Beispiele erfindungsgemässer Verbindungen (1) werden weiter unten gegeben.

Erfindungsgemässe Flüssigkristallmischungen enthalten mindestens eine Verbindung der Formel (1) als Komponente zusammen mit bekannten Mesogenen und Zusätzen, welche für den Betrieb von elektrooptischen Anzeigezellen der verschiedenen Typen bekannt sind. Vorzugsweise enthalten solche Mischungen zwei oder mehr unterschiedliche Verbindungen der Formel (1), z. B. insgesamt in Anteilen von 1 bis 50 Mol%.

Die FK-Mischungen können in üblicher Weise durch Vereinigen der Komponenten, gegebenenfalls Erwärmen, und Mischen erhalten und in bekannter Weise in die Anzeigezellen eingefüllt werden.

Allgemein können die neuen Verbindungen der Formel (1) nach folgendem Reaktionsschema erhalten werden:

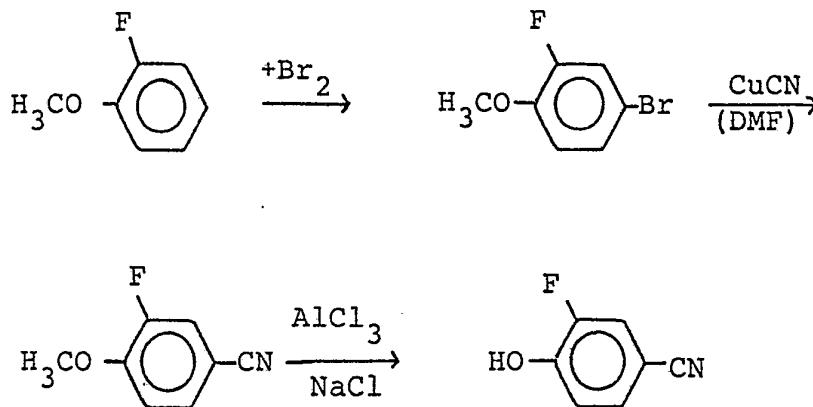


worin L^1 und L^2 Abgangsreste, z. B. L^1 ein Halogenatom, wie Chlor, oder die Hydroxylgruppe, L^2 das Wasserstoffatom oder ein Alkalimetallatom, wie Natrium oder Kalium, sind und R, X und n die in Formel (1) angegebene Bedeutung haben. Die Umsetzung von (11) + (12) wird zweckmässig in einem flüssigen Medium, wie Toluol, gegebenenfalls in Gegenwart eines die als Nebenprodukt entstehende Verbindung L^1L^2 bindenden Mittels, wie Pyridin, als Säurebindungsmittel bzw. Schwefelsäure als wasserbindendes Mit-

tel, durchgeführt, z. B. in äquimolaren Mengen an (11), (12).

Geeignete Verbindungen der Formel (11) sind z. B. in der GB-A 7 926 901 bzw. von Gray, G. W., und Kelly, S. M., in Mol. Cryst. Liq. Cryst. 75 (1981) 109, beschrieben oder können in analoger Weise wie die bekannten Verbindungen (11) erhalten werden.

Als Ausgangsstoffe geeignete Verbindungen der Formel (12) sind entweder bekannt oder analog wie die bekannten Verbindungen (12) erhältlich, z. B. nach folgendem Schema:



Die Erfindung wird anhand der folgenden Beispiele weiter erläutert.

Beispiel 1

Herstellung von 4-Cyano-2-fluorphenyl-4-pentylbicyclo (2,2,2)octan-1-carboxylat (Formel 2; $R^1 = n$ -Pentyl, $X^1 = 2$ -Fluor)

4-Pentylbicyclo(2,2,2)octan-1-carbonsäure (1,0 g, 0,0044 Mol) wurde auf dem Ölbad bei $80^\circ C$ in der zur Herstellung von Säurechloriden üblichen Weise etwa 1 Std. mit Thionylchlorid (25 ml) umgesetzt. Die erhaltene Lösung wurde unter vermindertem Druck eingedampft, mit über Natrium getrocknetem Toluol (20 ml) versetzt und nochmals unter vermindertem Druck eingedampft.

Das so erhaltene Säurechlorid (Formel 11, $n = 1$, $R =$ Pentyl, $L^1 = Cl$) wurde ohne weitere Reinigung in Natriumgetrocknetem Toluol (50 ml) aufgenommen und mit einer Lösung von 0,6 g (0,0044 Mol) 4-Cyano-2-fluorphenol (Formel 12, $L^2 = H$, $X = 2-F$) in frisch destilliertem trockenem Pyridin versetzt. Die so entstandene Mischung wurde 3 Std. unter praktisch wasserfreien Bedingungen auf Rückfluss erhitzt.

Die Reaktionslösung wurde dann abgekühlt, zu verdünnter wässriger Chlorwasserstoffsäure gegeben und dreimal mit je 50 ml Chloroform extrahiert. Die vereinigten organischen Phasen wurden zweimal mit je 250 ml Wasser gewaschen und über Magnesiumsulfat getrocknet. Das nach Abdampfen des Chloroforms unter vermindertem Druck erhaltene rohe Zielprodukt wurde durch Säulenchromatographie an Silicagel mit Toluol als Eluiermittel gereinigt. Nach Abdampfen des Toluols wurde das Produkt mehrmals aus Methanol umkristallisiert, bis die Phasenübergangstemperaturen ($K \cdot N \cdot I$, entsprechend kristallin, nematisch, isotrop; jeweils in $^\circ C$) konstant wurden. Die entsprechenden Werte des Zielproduktes von Beispiel 1 sind wie folgt: $K 84 \cdot N 132,5 \cdot I$.

Die in diesem Beispiel verwendete 4-Pentylbicyclo(2,2,2)octan-1-carbonsäure ist unter anderem in GB-A 7 926 901 beschrieben.

Das 4-Cyano-2-fluorphenol (Formel 12) wurde wie folgt hergestellt:

4-Brom-2-fluoranol wurde nach der von Gray, G. W., und Jones, B. (J. Chem. Soc., 1954, 1467) beschriebenen Methode in fast quantitativer Ausbeute hergestellt und in einer Menge von 93 g (0,4537 Mol) mit wasserfreiem Kupfer(I)-cyanid (49 g, 0,5444 Mol) in trockenem Dimethylformamid (90 ml) nach der von Adamska, G. et al. [Mol. Cryst. Liq. Cryst. 76 (1981) 93] beschriebenen Methode 3,5 Std. unter Rückfluss erhitzt. Aus dem so gewonnenen Rohprodukt wurden 39 g (57% Ausbeute) reines 4-Cyano-2-fluoranol, F $98,5$ bis $99^\circ C$, erhalten.

Aus 5,0 g (0,0329 Mol) des 4-Cyano-2-fluoranolis und 8,75 g (0,0658 Mol) wasserfreiem Aluminiumchlorid sowie 1,9 g (0,0329 Mol) Natriumchlorid wurde eine feinpulverisierte Mischung bereitet und 40 min unter wasserfreien Bedingungen auf dem Ölbad auf $210^\circ C$ erhitzt. Die abgekühlte Mischung wurde mit 250 ml Wasser behandelt und dreimal mit je 50 ml Diethyläther extrahiert. Die vereinigten Ätherextrakte wurden mit Kochsalzlösung (2×250 ml) extrahiert und über Magnesiumsulfat getrocknet.

Das Lösungsmittel wurde unter schwachem Unterdruck verdampft und der Rückstand aus Toluol:Hexan (1 : 1) kristallisiert. Dies ergab 3,0 g (66% Ausbeute) reines 4-Cyano-2-fluorphenol, F $133,5$ bis $134,5^\circ C$.

Beispiel 2

Herstellung von 4-Cyano-2-fluorphenyl-4-(4-hexylbicyclo (2,2,2) octyl)-benzoat

(Formel 1; $n = 1$, $R = n$ -Hexyl, $X = 2-F$)

Die in bekannter Weise [Gray, G. W. et al., Mol. Cryst. Liq. Cryst. 75 (1981) 109] hergestellte 4-(4-Hexylbicyclo(2,2,2)octyl)-benzoesäure wurde in einer Menge von 1,0 g (0,0032 Mol) nach der in Beispiel 1 beschriebenen Methode mit Thionylchlorid in das Säurechlorid (Formel 11, $R = n$ -Hexyl, $n = 1$, $L^1 = Cl$) umgewandelt und als Lösung in Natriumgetrocknetem Toluol (50 ml) mit 0,44 g (0,0032 Mol) 4-Cyano-2-fluorphenol (Formel 12, wie Beispiel 1) in 10 ml trok-

kenem Pyridin wie in Beispiel 1 beschrieben kondensiert und getrocknet.

Auch dieses Zielprodukt zeigt eine enantiotrope nematische Phase (K 117.5 · N 246.5 · I).

Beispiele 3–7

Es wurde nach der in Beispiel 1 beschriebenen Arbeitsweise mit der Abänderung gearbeitet, dass anstelle der dort angegebenen Verbindung (11) für R = Pentyl die entsprechende n-Propyl-, n-Butyl-, n-Hexyl-, n-Heptyl und n-Octylverbindung verwendet wurden. Dies ergab folgende erfindungsgemässe Verbindungen:

(3) 4-Cyano-2-fluorphenyl-4-propylbicyclo (2,2,2) octan-1-carboxylat (K 112 · N 129 · I);

(4) 4-Cyano-2-fluorphenyl-4-butylbicyclo (2,2,2) octan-1-carboxylat (K 91.5 · N 125 · I);

(5) 4-Cyano-2-fluorphenyl-4-hexylbicyclo (2,2,2) octan-1-carboxylat (K 82 · N 123.5 · I);

(6) 4-Cyano-2-fluorphenyl-4-heptylbicyclo (2,2,2) octan-1-carboxylat (K 81 · N 125.5 · I);

(7) 4-Cyano-2-fluorphenyl-4-octylbicyclo (2,2,2) octan-1-carboxylat (K 81.5 · N 120 · I).

Weitere Beispiele für neue erfindungsgemässe Nematogene der Formel (1) sind die folgenden:

4-Cyano-3-fluorophenyl-4-propylbicyclo (2,2,2) octan-1-carboxylat

4-Cyano-3-fluorophenyl-4-pentylbicyclo (2,2,2) octan-1-carboxylat [K 80.5; N/I 65 (monotrop)]

4-Cyano-3-fluorophenyl-4-heptylbicyclo (2,2,2) octan-1-carboxylat

4-Cyano-2-chlorophenyl-4-propylbicyclo (2,2,2) octan-1-carboxylat

4-Cyano-2-chlorophenyl-4-pentylbicyclo (2,2,2) octan-1-carboxylat

4-Cyano-2-chlorophenyl-4-heptylbicyclo (2,2,2) octan-1-carboxylat

4-Cyano-3-chlorophenyl-4-propylbicyclo (2,2,2) octan-1-carboxylat

4-Cyano-3-chlorophenyl-4-pentylbicyclo (2,2,2) octan-1-carboxylat

4-Cyano-3-chlorophenyl-4-heptylbicyclo (2,2,2) octan-1-carboxylat

4-Cyano-2-bromophenyl-4-propylbicyclo (2,2,2) octan-1-carboxylat

4-Cyano-2-bromophenyl-4-pentylbicyclo (2,2,2) octan-1-carboxylat

4-Cyano-2-bromophenyl-4-heptylbicyclo (2,2,2) octan-1-carboxylat

4-Cyano-3-bromophenyl-4-propylbicyclo (2,2,2) octan-1-carboxylat

4-Cyano-3-bromophenyl-4-pentylbicyclo (2,2,2) octan-1-carboxylat

4-Cyano-3-bromophenyl-4-heptylbicyclo (2,2,2) octan-1-carboxylat

2,4-Dicyanophenyl-4-propylbicyclo (2,2,2) octan-1-carboxylat

2,4-Dicyanophenyl-4-pentylbicyclo (2,2,2) octan-1-carboxylat [K 128.5; N/I 101.5 (monotrop)]

2,4-Dicyanophenyl-4-heptylbicyclo (2,2,2) octan-1-carboxylat

3,4-Dicyanophenyl-4-propylbicyclo (2,2,2) octan-1-carboxylat

3,4-Dicyanophenyl-4-pentylbicyclo (2,2,2) octan-1-carboxylat

3,4-Dicyanophenyl-4-heptylbicyclo (2,2,2) octan-1-carboxylat

4-Cyano-2-fluorophenyl-4-(4-propyl-1-bicyclo (2,2,2) octyl)-benzoat

4-Cyano-2-fluorophenyl-4-(4-pentyl-1-bicyclo (2,2,2) octyl)-benzoat

4-Cyano-2-fluorophenyl-4-(4-heptyl-1-bicyclo (2,2,2) octyl)-benzoat

4-Cyano-3-fluorophenyl-4-(4-propyl-1-bicyclo (2,2,2) octyl)-benzoat

4-Cyano-3-fluorophenyl-4-(4-pentyl-1-bicyclo (2,2,2) octyl)-benzoat

4-Cyano-3-fluorophenyl-4-(4-heptyl-1-bicyclo (2,2,2) octyl)-benzoat

4-Cyano-2-chlorophenyl-4-(4-propyl-1-bicyclo (2,2,2) octyl)-benzoat

4-Cyano-2-chlorophenyl-4-(4-pentyl-1-bicyclo (2,2,2) octyl)-benzoat

4-Cyano-2-chlorophenyl-4-(4-heptyl-1-bicyclo (2,2,2) octyl)-benzoat

4-Cyano-3-chlorophenyl-4-(4-propyl-1-bicyclo (2,2,2) octyl)-benzoat

4-Cyano-3-chlorophenyl-4-(4-pentyl-1-bicyclo (2,2,2) octyl)-benzoat

4-Cyano-3-chlorophenyl-4-(4-heptyl-1-bicyclo (2,2,2) octyl)-benzoat

4-Cyano-2-bromophenyl-4-(4-propyl-1-bicyclo (2,2,2) octyl)-benzoat

4-Cyano-2-bromophenyl-4-(4-pentyl-1-bicyclo (2,2,2) octyl)-benzoat

4-Cyano-2-bromophenyl-4-(4-heptyl-1-bicyclo (2,2,2) octyl)-benzoat

4-Cyano-3-bromophenyl-4-(4-propyl-1-bicyclo (2,2,2) octyl)-benzoat

4-Cyano-3-bromophenyl-4-(4-pentyl-1-bicyclo (2,2,2) octyl)-benzoat

4-Cyano-3-bromophenyl-4-(4-heptyl-1-bicyclo (2,2,2) octyl)-benzoat

2,4-Dicyanophenyl-4-(4-propyl-1-bicyclo (2,2,2) octyl)-benzoat

2,4-Dicyanophenyl-4-(4-pentyl-1-bicyclo (2,2,2) octyl)-benzoat

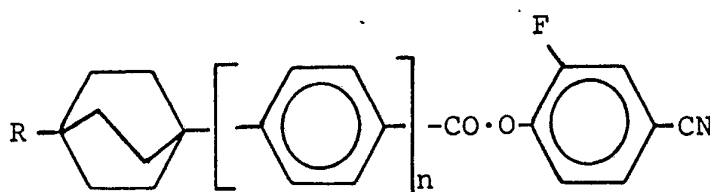
2,4-Dicyanophenyl-4-(4-heptyl-1-bicyclo (2,2,2) octyl)-benzoat

3,4-Dicyanophenyl-4-(4-propyl-1-bicyclo (2,2,2) octyl)-benzoat

3,4-Dicyanophenyl-4-(4-pentyl-1-bicyclo (2,2,2) octyl)-benzoat

3,4-Dicyanophenyl-4-(4-heptyl-1-bicyclo (2,2,2) octyl)-benzoat.

In der folgenden Tabelle sind die Übergangstemperaturen (C-N/I für den Übergang kristallin-nematisch bzw. N-I für den Übergang nematisch-isotrop) in °C sowie die Schmelzenthalpie-Werte ΔH in Kilojoule (kJ) pro Mol für erfindungsgemässe Verbindungen der Formel



zusammengestellt; die Bedeutung der Zeichen ist ebenfalls in der Tabelle angegeben; einige der Übergangstemperaturwerte sind auch in den obigen Beispielen genannt.

R (gerad- kettig)	n	C-N/I (°C)	N-I (°C)	ΔH (kJ · Mol ⁻¹)
C ₃ H ₇	0	112	129	29,1
C ₄ H ₉	0	91,5	125	29,7
C ₅ H ₁₁	0	84	133	32,2
C ₆ H ₁₃	0	82	123,5	
C ₇ H ₁₅	0	81	125,5	38,0
C ₈ H ₁₇	0	81,5	120	
CH ₃	1	177	(173)*	
C ₃ H ₇	1	166	263	
C ₄ H ₉	1	117,5	247	
C ₆ H ₁₃	1	117,5	246,5	
C ₇ H ₁₅	1	112	244	

* monotrope Umwandlung

25

30

35

40

45

50

55

60

65