Chem. Ber. 101, 2947-2955 (1968)

Erwin Weiss und Heinrich Plass

Die Kristallstrukturen der Alkalihydrogenacetylide MC≡CH (M = Na, K, Rb) und -propinylide MC≡CCH₃ (M = Na, K)

Aus dem Institut für Anorganische Chemie der Universität Hamburg

(Eingegangen am 18. März 1968)

Die Kristallstrukturen der Alkalihydrogenacetylide MC = CH (M = Na, K, Rb) und -propinylide $MC = CCH_3$ (M = Na, K) wurden aus Pulverdaten röntgenographisch bestimmt. Alle Verbindungen bilden Schichtenstrukturen mit tetragonalen Elementarzellen (Raumgruppe P 4/nmm). Dabei stehen die stäbchenförmigen Acetylid- bzw. Propinylidgruppen senkrecht zu den Schichtebenen mit ihren H- bzw. CH_3 -Gruppen auf den Schichtaußenseiten und den Metallionen in Verlängerung der C = C-Gruppen im Schichtinneren. Jedes Metallion ist außerdem von vier nächsten antiparallelen Acetylidgruppen umgeben und verschiebt sich mit steigender Größe des Metallions zunehmend in die Einschnürungen dieser C = C-Gruppen.

In einer früheren Veröffentlichung $^{1)}$ wurde den Hydrogenacetyliden $MC \equiv CH$ des Natriums und Kaliums eine tetragonal deformierte Struktur des NaCl-Typs zugeordnet. Diese Struktur ist aus verschiedenen Gründen unwahrscheinlich und erlaubt insbesondere keine plausible Anordnung der H-Atome. Nach den bei Alkalimethylaten $MOCH_3$ $^{2)}$ gefundenen Schichtenstrukturen war eine analoge Struktur der Hydrogenacetylide $^{3)}$ und auch der bisher röntgenographisch noch nicht untersuchten Propinylide zu erwarten, was durch unsere Untersuchungen bestätigt werden konnte.

Strukturbestimmung

Alle Verbindungen wurden nach bekannten Methoden⁴⁾ durch Umsetzung der in fl. Ammoniak gelösten Alkalimetalle mit gereinigtem Acetylen bzw. Propin dargestellt und nach Abdunsten des Lösungsmittels als farblose, sehr feuchtigkeitsempfindliche Pulver erhalten. Die mit einem Zählrohrgoniometer unter Verwendung von

¹⁾ M. v. Stackelberg, Z. physik. Chem., Abt. B 9, 437 (1930).

²⁾ E. Weiss, Z. anorg. allg. Chem. 332, 197 (1964) und dort zitierte Literatur.

³⁾ Nachdem unsere Untersuchungen weitgehend abgeschlossen waren, erhielten wir Kenntnis von bisher nur teilweise veröffentlichten Ergebnissen von H. Föppl (Vortragsreferat in Angew. Chem. 70, 401 (1958)), mit denen unsere Ergebnisse praktisch übereinstimmen.

⁴⁾ Vgl. R. Nast und K. Vester, Z. anorg. allg. Chem. 279, 146 (1955) und die dort zitierte Literatur. Um fremdlinienfreie Diagramme der Propinylide zu erhalten, wurde das verwendete techn. Propin über sein Na-Salz gereinigt. Letzteres wurde mit einem Äthanol/ Wasser-Gemisch zersetzt und das Hydrolysengas über CaCl₂ getrocknet.

Cu- K_{α} -Strahlung ($\lambda=1.5418$ Å) aufgenommenen Diagramme waren tetragonal indizierbar mit den in Tab. 1 und 2 angegebenen Zellkonstanten. Bei der Bestimmung der Intensitäten wurden Textureffekte beobachtet, die auf den blättchenförmigen Habitus der Kristalle zurückzuführen sind. Diese Effekte ließen sich durch intensives Pulvern und "Verdünnen" mit einer röntgenamorphen Substanz weitgehend unterdrücken⁵⁾.

Tab. 1. Zeilkonstanten und Dichten der Hydrogenacetylide (in Klammern die von H. Föppl³⁾ ermittelten Werte)

	NaC≡CH	KC≡CH	RbC≡CH	
a (Å)	$3.828 \pm 0.004 $ (3.84)	$4.299 \pm 0.002 $ (4.31)	$4.533 \pm 0.003 \ (4.55)$	
c (Å)	$8.14_9 \pm 0.01$ (8.18)	$8.45_6 \pm 0.01$ (8.46)	$8.52_4 \pm 0.01$ (8.53)	
c/a	2.129	1.967	1.88	
Zellinhalt (Å3)	119.4	156.3	175.2	
\boldsymbol{z}	2	2	2	
Röntgendichte (g·cm ⁻³)	1.34	1.36	2.09	

Tab. 2. Zellkonstanten und Dichten der Propinylide

	NaC≡CCH ₃	KC≡CCH ₃	
a (Å)	3.836 ± 0.003	4.259 ± 0.002	
c (Å)	$11.37_9 \pm 0.015$	$11.63_5 \pm 0.01$	
c/a	2.966	2.732	
Zellinhalt (Å3)	167.4	211.0	
\boldsymbol{z}	2	2	
Röntgendichte (g⋅cm ⁻³)	1.23	1.23	

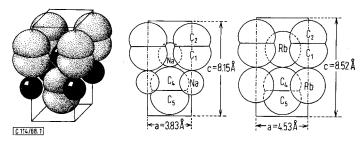
Aus den Abmessungen der zwei Formeleinheiten enthaltenden Elementarzellen sowie den beobachteten systematischen Auslöschungen (Reflexe (hk0) nur mit h+k=2n vorhanden, d. h. Raumgruppe P 4/n oder P 4/nmm) kam praktisch nur eine den Alkalimethylaten $^{2)}$ analoge Struktur in Betracht. Alle Atome liegen auf Gittergeraden parallel zur c-Achse mit z als einzigem freiem Parameter für jede Teilchensorte in den zweizähligen Lagen $(0, 1/2, z \text{ und } 1/2, 0, \overline{z})$ (vgl. Abbild. 1 und 2). Die mit Hilfe von Abstandsbetrachtungen erhaltenen Ausgangsparameter wurden nach dem Verfahren von *Bhuiya und Stanley* overfeinert, wozu ein von J. W. Visser $^{7)}$ geschriebenes

⁵⁾ Bezüglich der Aufnahmetechnik vgl. E. Weiss und R. Wolfrum, Chem. Ber. 101, 35 (1968), und E. Weiss und W. Büchner, Z. anorg. allg. Chem. 330, 251 (1964).

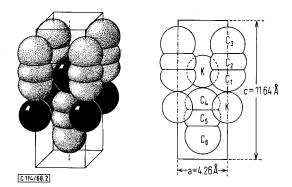
⁶⁾ A. K. Bhuiya und E. Stanley, Acta crystallogr. 16, 981 (1963).

⁷⁾ Für die Überlassung dieses Programms danken wir Herrn Dr. J. W. Visser, Delft. Die Intensitätsberechnungen erfolgten auf der Telefunken-TR 4-Rechenanlage der Universität Hamburg.

ALGOL-Rechenprogramm zur Verfügung stand, das auch Reflexüberlappungen berücksichtigt. Bei den Rechnungen wurden die H-Atome der Hydrogenacetylide vernachlässigt und bei den Propinyliden die CH₃-Gruppe als eine Einheit betrachtet, wobei das Streuvermögen der drei H-Atome durch eine entsprechend korrigierte Streukurve des Methylkohlenstoffs berücksichtigt wurde⁸⁾.



Abbild. 1. Kalottenmodell und Elementarzelle des NaC≡CH bzw. RbC≡CH (ohne H-Atome)



Abbild. 2. Kalottenmodell und Elementarzelle des KC≡CCH3 (ohne H-Atome)

Breitlinien-Kernresonanzmessungen am K-Propinylid⁹⁾ zeigen, daß die Methylgruppen bei Raumtemperatur und auch noch bei tieferen Temperaturen (bis -150° C) um ihre dreizählige Achse rotieren. Insofern ist die Anordnung der Methylgruppen auf den Punktlagen der Symmetrie 4 mm in der Raumgruppe P 4/nmm gerechtfertigt.

Während sich die Lagen der Alkalimetalle in allen untersuchten Verbindungen mit hinreichender Genauigkeit bestimmen ließen, erschien eine Verfeinerung der individuellen C-Lagen nur bei NaC=CH, NaC=CCH3 und KC=CCH3 sinnvoll. Beim Kalium- und Rubidium-hydrogenacetylid wurden die Acetylidgruppen als starre Einheiten mit festgelegtem C=C-Abstand (1.2 Å) betrachtet und antiparallel gegeneinander verschoben. Die nach dem Kriterium des kleinsten R-Wertes ($R=100\cdot\Sigma(|I_{\rm beob.}-I_{\rm ber.}|)/\Sigma I_{\rm beob.})$ resultierenden Endparameter sind in Tab. 3 aufgeführt.

⁸⁾ Vgl. E. Weiss, H. Alsdorf und H. Kühr, Chem. Ber., im Druck.

⁹⁾ H. Kühr, Diplomarb., Univ. Hamburg 1966.

	NaC≡ CH	KC≡CH	RbC≡CH	$NaC \equiv CCH_3$	KC≡CCH ₃
z _M	0.356 ± 0.001	0.332 ± 0.001	0.320 ± 0.001	0.385 ± 0.001	0.373 ± 0.001
z_{C^1}	0.661 ± 0.004	0.672	0.670	0.593 ± 0.012	0.592 ± 0.004
z_{C^2}	0.805 ± 0.004	0.812	0.810	0.689 ± 0.012	0.694 ± 0.004
z_{C^3}	_	_	-	0.821 ± 0.012	0.827 ± 0.004
$M-C^{1}$ (Å)	2.49 ± 0.05	(2.87)	(2.98)	2.37 ± 0.15	2.55 ± 0.05
C^1-C^2 (Å)	1.17 ± 0.06	(1.20)	(1.20)	1.09 ± 0.2	1.19 ± 0.06
$C^1 - C^3$ (Å)	-			1.5 ± 0.2	1.55 ± 0.06
$M - C^4 (Å)$	2.71	3.04	3.21	2.72	3.04
M-C ⁵ (Å)	3.01	3.27	3.39	2.84	3.11

Tab. 3. Parameter und kürzeste Atomabstände

Beschreibung der Strukturen

Wie aus den Abbildd. 1 und 2 ersichtlich ist, liegen in allen untersuchten Verbindungen lineare Acetylidgruppen vor. Durch ihre antiparallele Anordnung in Richtung der c-Achse entsteht eine ausgesprochene Schichtenstruktur, wobei jede Schicht nach außen durch die H-Atome bzw. CH₃-Gruppen begrenzt wird. Die im Schichtinneren befindlichen Metallionen liegen einerseits in Verlängerung einer Acetylidgruppe $(M-C^1)$ und sind andererseits von vier antiparallelen Acetylidgruppen $(M-C^4)$ und $(M-C^5)$ umgeben. Obwohl sich die C-Lagen nur innerhalb relativ großer Fehlergrenzen festlegen lassen, läßt eine Betrachtung der Metall-C-Abstände folgendes deutlich erkennen:

- 1. In allen Verbindungen sind die $M-C^1$ -Abstände um etwa 0.2-0.5 Å kürzer als die $M-C^4$ -Abstände. Hierin kommt die bekannte Abweichung der Acetylen-C-Atome von der Kugelsymmetrie zum Ausdruck, d. h. ihre deutliche Abplattung in Richtung der C=C-Achse.
- 2. Mit zunehmender Größe des Metalls verschieben sich die antiparallelen Struktureinheiten stärker ineinander, so daß das Metallion zunehmend in die Einschnürungen der vier umgebenden Acetylidgruppen zu liegen kommt (vgl. Abbild. 1) und sich die Abstände $M-C^4$ und $M-C^5$ angleichen (Tab. 3). Hand in Hand damit wird sich die negative Ladung der Acetylidgruppen zunehmend auf beide C-Atome verteilen, so daß die mesomere Grenzstruktur (2) in

$$|\overset{\Theta}{C} = C - R \iff |C = \overset{\Theta}{\underline{C}} - R$$
1
2

ein zunehmendes Gewicht erhält und damit die Bindungsordnung abnimmt. Damit findet die bereits früher $^{10)}$ festgestellte Erniedrigung der $\nu_{C\equiv C}$ -Frequenzen und die damit einhergehende Abnahme der Kraftkonstante $k_{C\equiv C}$ in den Acetyliden der schweren Alkalimetalle eine Erklärung.

¹⁰⁾ R. Nast und J. Gremm, Z. anorg. allg. Chem. 325, 62 (1963).

Tab. 4. Berechnete und gemessene Netzebenenabstände und Intensitäten von NaC=CH, KC=CH, RbC=CH, NaC=CCH3 und KC=CCH3

	L1-1	hkl d(Å)		$I_{ m ber.}$	$I_{\text{beob.}}$	
	IIKI	ber.	beob.	per.		
NaC≡CH	001	8.1489	8.132	95.67	100.0	
	002	4.0743	4.073	27.62	31.3	
	101	3.4650	3.469	1.14	0.8	
	102	2.7900	2.7917	32.32	35.2	
	003 110	2.7162 2.7070	2.7127	78.39	70.7	
	111	2.5690	2.5721	14.89	11.0	
	112	2.2547	2.2583	9.77	8.1	
	103	2.2153	2.2168	5.66	4.9	
	004	2.0371	2.0350	3.08	4.1	
	113 200	1.9174 1.9141	1.9163	20.07	21.1	
	201	1.8634	1.8647	3.29	4.2	
	104	1.7983	1.7985	1.67	1.5	
	202	1.7325	1.7326	2.14	3.4	
	211	1.6754	_	0.13	_	
	005 114	1.6297 1.6277	1.6276	3.56	4.7	
	212	1.5783	1.5782	3.96	6.8	
	203	1.5646	1.5645	2.19	3.2	
	105	1.4995	1.4994	0.63	1.5	
	213	1.4483	1.4487	0.87	1.2	
	115 204	1.3962 1.3949	1.3952	1.34	2.4	
	006 220	1.3581 1.3535	1.3572	1.56	3.0	
	221	1.3352	1.3354	0.35	0.6	
	214	1.3106	1.3109	0.37	1.4	
	222	1.2845	1.2833	0.32	1.0	
	106	1.2799	1.2033	}	1.0	
	301	1.2114		0.01		
	205	1.2409		0.07		
	302	1.2177		1		
	116 223	1.2139 { 1.2114 {	1.2142	2.13	7.1	
	310	1.2106		ł		
	311	1.1974	1.1973	0.29	0.9	
	215	1.1810	1.1802	0.18	_	
	007	1.1641	1)		
	312	1.1605	1.1611	0.43	0.7	
	303	1.1550))		
	224	1.1273	1.1270	0.20	1.8	
	107	1.1137	1.1142	0.04	s. s.	
	206	1.1076	1.1070	0.50	2.5	
	313	1.1057).)		
	304	1.0814	_ ,	0.03		
	117 216	1.0694 1.0640	1.0693	0.28	0.8	
	321	1.0530	_ ,	0.00	-	
	225	1.0412)	10410	1	0.7	
	314	1.0407	1.0418	0.21	0.6	
	322	1.0274		0.12		

	hkl	d (Å) ber.	d (Å) beob.	$I_{ m ber.}$	$I_{ m beob.}$	
КС≡СН	001	8.4565	8.473	47.36	46.4	
	002	4.2283	4.234	28.11	28.6	
	101	3.8325	3.844	10.61	5.4	
	110	3.0401	3.0421	1		
	102	3.0146	3.0159	95.70	100.0	
	111	2.8608	2.8649	10.50	5.6	
	003	2.8188	2.8191	9.61	11.9	
	112	2.4683	2.4708	16.64	16.5	
	103	2.3573	_	0.21		
	200	2.1497	2.1501	14.46	20.3	
	004	2.1141	2.1127	0.93	S. S.	
	201	2.0834	2.0849	2.92	6.6	
	113	2.0670	2.0668	10.95	7.8	
	202	1.9162	1.9171	5.02	4.7	
	104	1.8972	1.8953	5.83	5.2	
	211	1.8749	1.8755	2.59	4.7	
	212	1.7503	1.7504	6.49	8.0	
	114	1.7359		1.38		
			1 7006		1.9	
	203	1.7093	1.7086	4.24		
	005	1.6913	1.50(1	0.21		
	213	1.5884	1.5861	0.04	S. S.	
	105	1.5739		0.89		
	220	1.5200	1.5202	2.24	2.6	
	204	1.5073	_	0.62	_	
	221	1.4961		0.51		
	115	1.4780	1.4783	0.39	S. S.	
	222	1.4304	1.4231	3.33	2.0	
	214	1.4224	1.1231	3.33	2.0	
	301	1.4130 \	1.4086	0.94 }	s. s.	
	006	1.4094	1.4000	0.54	J. J.	
	310	1.3596)	1.3593	2.98	3.6	
	302	1.3573	1.3373	2.76	3.0	
	311	1.3423	1)		
	106	1.3393	1.3407	1.57	1.3	
	223	1.3379)	,		
	205	1.3292		0.21	_	
	312	1.2943	1.2935	0.99	0.5	
	116	1.2787	,	,		
	303 215	1.2775 1.2699	1.2774	1.87	s. s.	
RbC≡CH	001	8.5237	8.588	69.41	58.0	
	002	4.2618	4.275	44.62	49.6	
	101	4.0023	4.015	86.06	82.5	
	110	3.2054	3.2135	85.87	100.0	
	102	3.1051	3.1125	53.53	63.2	
	111	3.0003	3.0079	15.86	14.2	
	003	2.8412	2.8435	15.99	19.5	
	112	2.5617	2.5664	28.37	20.5	
	103	2.4074		1.20		
	200	2.2666	2.2692	19.77	23.8	
	201	2.1904	2.1920	4.18	3.7	
	004	2.1309	,)		
	113	2.1262	2.1298	18.42	18.0	
	202	2.0012	2.0035	8.37	6.0	
	211	1.9723	1.9729	12.67	15.9	
	104	1.9285	1.9294	11.18	8.7	
	104					

	h kl	d (Å) ber.	d (Å) beob.	$I_{ m ber.}$	$I_{ m beob.}$	
RbC≡CH	114	1.7746	1.7738	6.99	2.2	
(Fortsetzung)	203	1.7718)	0.01		
	005 213	1.7047 1.6503	_	0.81 0.35	_	
	220	1.6027))		
	105	1.5956	1.6007	3.44	5.7	
	221	1.5751	- ,	0.61		
	204	1.5525	_	0.15	_	
	115	1.5051		1.40		
	222	1.5001	- .	1.32		
	301	1.4878	_	1.14	_	
	214	1.4688	1 4224	3.85		
	310	1.4335	1.4324	2.32	5.9	
	302	1.4242	1 4195	1.89	1.5	
	006 311	1.4206 1.4136	1.4185	1.09	1.5	
NaC≡CCH ₃	001	11.378	11.451	100.93	100.0	
	002	5.6892	5.695	4.72	5.4	
	003	3.7928	3.795	1.67	1.0	
	101	3.6352	3.636	9.80	8.1	
	102	3.1807	3.1865	8.17 5.95	8.8 10.1	
	004 110	2.8446 2.7126)	2.8435)		
	103	2.6971	2.6700	36.52	37.1	
	111	2.6387	2.6352	10.96	13.4	
	112	2.4485	_	0.80		
	104	2.2850	2.2847	2.55	4.7	
	005	2.2757	J	J		
	113	2.2064	2.2200	1.68	1.5	
	114 105	1.9631 1.9572	1.9762	6.10	4.1	
	200	1.9181		{		
	006	1.8964	1.9164	7.53	6.2	
	201	1.8914	1.8960 ′	3.19	3.2	
	202	1.8176	-	0.16	- .	
	115	1.7434	1.7560	3.15	2.5	
	203	1.7117	1 7127	240	2.2	
	106 211	1.7000 1.6964	1.7127	2.48	2.2	
	212	1.6426	1.6410	.)		
	007	1.6255	1.6224	1.64	0.9	
	204	1.5903	1.5921	2.34	1.0	
	213	1.5631	1.5645	1.33	3.3	
	116	1.5542	,	J		
	107	1.4967	1.4942	1.90	1.9	
	214	1.4691	1.4754	1.37	1.6	
	205 008	1.4666 1.4223	1.4670 ∫	0.01	0.3	
	117	1.3943	1.4215	0.00		
	215	1.3699		0.05		
	220	1.3563	١)		
	206	1.3486	1 2/107	2.01	1.9	
	221	1.3468	1.3487	2.01	1.9	
	108	1.3336 J	J	J		
	222	1.3193	1.3201	0.03	3.0	
	223	1.2771		0.17	-	

NaC≡CCH ₃ 216 1.2722 (Fortsetzung) 301 1.2707 009 1.2643 118 1.2596		hkl	d (Å) ber.	d (Å) beob.	I _{ber} .	$I_{ m beob.}$	
$ \begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$		301 009	1.2707 1.2643	1.2635	1.00	0.6	
$ \begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$		302	1.2476	_ ,		_	
$ \begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$						_	
$ \begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$		310		1 2135	١	2 8	
$ \begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$				1.2133	1.73	2.0	
$ \begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$			1	1.2010	1.13	1.5	
$ \begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$		312			0.03	_	
$ \begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	KC≡CCH ₃	001	11.635	11.78	99.55	100.0	
$ \begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	-	002	5.8174		3.78	4.1	
$ \begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$				2 990			
$ \begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$							
004 2.9087 } 2.9116 } 17.81 } 20.4 103 2.8674 2.8714 5.01 6.5 112 2.6742 2.6773 1.02 2.1 104 2.4019 2.4037 } 4.25 } 5.4 005 2.3270 2.3276 1.20 1.5 200 2.1293 2.1305 7.08 8.8 201 2.0945)))							
$ \begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$				2.9116	17.81	20.4	
$ \begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$		103	,			6.5	
113 2.3785 2.3803 \ 4.25 \ 005 2.3270 2.3276 1.20 1.5 200 2.1293 2.1305 7.08 8.8 201 2.0945 \)					1.02	2.1	
005 2.3270 2.3276 1.20 1.5 200 2.1293 2.1305 7.08 8.8 201 2.0945)				,	4.25	5.4	
201 2 0945)))		005		2.3276	1.20	1.5	
201 2.0945 2.0933 9.42 10.4			,	2.1305	7.08	8.8	
114 2.0921 (2.0933 (9.43) 10.4			\	2.0933	9.43	10.4	
105 2.0420 2.0429 1.18 6.8			2.0420	2.0429	1.18	6.8	
202 1.9996 — 0.23 —				_			
$egin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$				1 9700			
211 1.8795 1.8790 0.10 0.3 203 1.8665 1.8667 1.28 2.1							
115 1.8413 1.8405 1.56 1.6							
212 1.8100 1.8097 2.98 3.2							
106 1.7648 1.7640 2.08 2.0					2.08	2.0	
$\left\{ egin{array}{ccc} 204 & 1.7181 & 1.7178 \ 213 & 1.7095 & 1.7095 \ \end{array} ight\} \left\{ \left\{ \begin{array}{ccc} 3.47 \end{array} ight\} \left\{ \begin{array}{ccc} 4.5 \end{array} ight.$					3.47	4.5	
007 1.6621 1.6603 0.06 s. s.						S. S.	
116 1.6303 1.6289 0.05 s. s. 214 1.5933 — 0.10 —							
205 1.5709 1.5698 0.65 0.6							
107 1.5484 1.5471 0.69 0.2		107					
220 1.5056 1.5047 1.09 1.2							
221 1.4932 1.4921 0.54 1.0							
215 1.4738 1.4725 0.47 0.4 222 1.4576				1.4725	0.47	0.4	
117 1.4552 $1.4531 $ $0.21 $ 0.5		117	1.4552	1.4531	0.21	0.5	
008 1.4544 J J J J 206 1.4337 1.4332 0.02 0.1				1.4332	0.02	0.1	
301 1.4091) 1.4026) 0.20) 0.20		301	1.4091	1	١		
$ \begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$				1.4020	0.30	0.8	
$\begin{bmatrix} 1.3791 \\ 108 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1.3767 \\ 1.3763 \end{bmatrix} = 0.46 $ 0.6				1.3767	0.46	0.6	
$ \begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$		216	1.3588		2.11	2.4	

$ \begin{array}{c cccc} KC \equiv CCH_3 & 311 & 1.3378 \\ (Fortsetzung) & 224 & 1.3371 \\ & 303 & 1.3330 & 1.3326 \end{array} \right\} \qquad 1.24 $	
$ \begin{array}{ccc} 312 & 1.3120 \\ 207 & 1.3102 \\ 118 & 1.3096 \end{array} \right\} 1.3085 \left. \right\} 0.22 \left. \right\} 1.0$	
009 1.2928 1.2913 0.07 s. s.	
304 1.2757 — 0.01 —	
313 1.2722 1.2705 0.31 0.5	
225 1.2641 - 0.17 -	
217 1.2523 1.2505 0.37 0.4	
109 1.2370 - 0.38 -	
314 1.2221 1.2205 0.62 0.8	
305 1.2118 - 0.07 -	
208 1.2010 1.2000 0.07 0.3	
226 1.1892 - 0.01 -	F11.4/c03

[114/68]