

# DIE PARAMETER DER QUANTENCHEMISCHEN RECHNUNGSMETHODE VON DEL RE. III.

DER  $\epsilon_{CC}$ -RESONANZPARAMETER

Von

J. NAGY und M. T. VÁNDORFFY

Lehrstuhl für Anorganische Chemie, Technische Universität, Budapest

Eingegangen am 9. Dezember 1975

In den vorhergehenden Mitteilungen [1, 2] wurden die C—H und C—C Bindungsparameter der quantenchemischen Del Re Methode aufgrund der prinzipiellen Ladungsverteilung des Methans ermittelt. In der gegenwärtigen Arbeit wird zur Prüfung der Anwendbarkeit der Parameter die Berechnung der Ladungsverteilung einer großen Zahl von Alkanmolekülen durchgeführt, und die Korrelation zwischen den berechneten  $q_C$ -Werten und den NMR  $^{13}\text{C}$ -Signalen untersucht [3]. Wie in der vorhergehenden Mitteilung [2] gezeigt wurde, hat eine wesentliche Änderung des  $\epsilon_{CC}$ -Resonanzparameters keinen wesentlichen Einfluß auf die Ergebnisse der Modellverbindungen. Bei den Rechnungen an zahlreichen Alkanmolekülen zeigte sich aber, daß für die Ladungsverteilung einiger symmetrischer Moleküle nur in jenem Falle der NMR-Tendenz entsprechenden Ergebnisse erhalten werden können, wenn mit kleinerem Wert als 1,00, in diesem Falle mit  $\epsilon_{CC} = 0,75$  Wert gerechnet wird.

Die Parameter der Rechnungen sind in Tab. I zusammengestellt. Jede Rechnung wurde mit  $\epsilon_{CC} = 1,00$  und auch mit  $\epsilon_{CC} = 0,75$  Wert durchgeführt.

Tabelle I

Die Bindungsparameter der Del Re-schen Rechnungen

$\gamma_{\text{H}(\text{C})}$	$\gamma_{\text{C}(\text{H})}$	$\gamma_{\text{C}(\text{C})}$	$\delta_{\text{H}}^{\text{H}}$	$\delta_{\text{C}}^{\text{C}}$	$\epsilon_{\text{CH}}$	$\epsilon_{\text{CC}}$
0,85	0,15	0,165	0	0,08	1,00	1,00
0,85	0,15	0,155	0	0,08	1,00	0,75

Die Korrelation zwischen den berechneten  $q_C$ -Werten und den NMR  $^{13}\text{C}$ -Signalen sind in Abb. 1 und Abb. 2 dargestellt. Für die bessere Auswertung der Ergebnisse wurde die Gleichung der regressierten Geraden bestimmt und

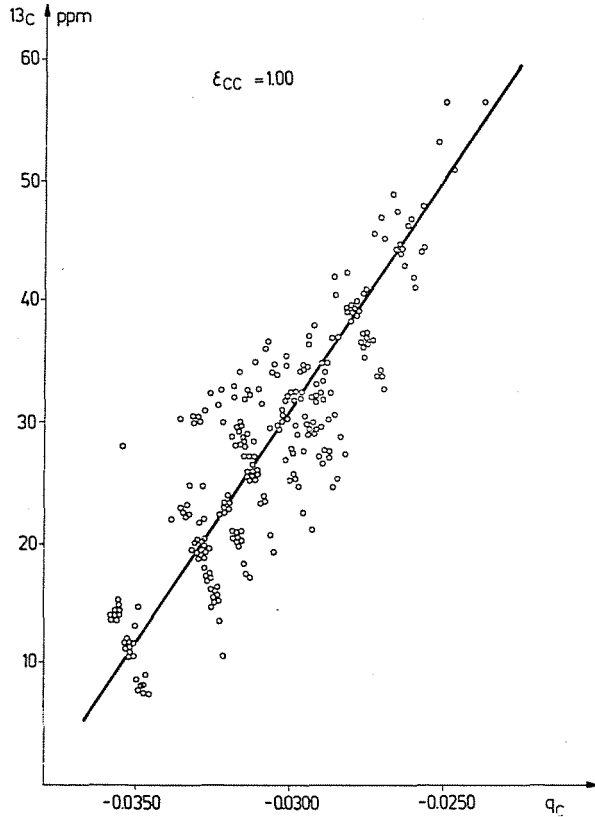


Abb. 1. Korrelation zwischen den berechneten  $q_C$  und experimentellen  $^{13}\text{C}$  NMR-Werten. Parametersystem  $\varepsilon_{\text{CC}} = 1,00$

die zu den experimentellen NMR-Signalen gehörenden regressierten  $q_C$ -Ladungen berechnet.

$$q^{\text{regr}} = \frac{^{13}\text{C} - 145,59}{3823,5} \quad \text{wenn } \varepsilon_{\text{CC}} = 1,00 ,$$

$$q^{\text{regr}} = \frac{^{13}\text{C} - 134,79}{3608,2} \quad \text{wenn } \varepsilon_{\text{CC}} = 0,75 .$$

Durch Vergleich der regressierten und berechneten  $q_C$ -Ladungen ist es möglich, die Ergebnisse auszuwerten.

Die Rechnungsergebnisse von 59 Alkanmolekülen, mit den  $\varepsilon_{\text{CC}} = 1,00$  und  $\varepsilon_{\text{CC}} = 0,75$  Parametersystemen, wurden in Tabelle II und Tabelle III zusammengestellt. Die Tabellen enthalten die Verbindungen, die Bezeichnung

der Moleküle und Atome, die experimentellen  $^{13}\text{C}$ -Signale, die berechneten  $q_{\text{C}}$ -Werte, die regressierten  $q_{\text{C}}$ -Werte und die Differenz zwischen den beiden  $q_{\text{C}}$ -Werten.

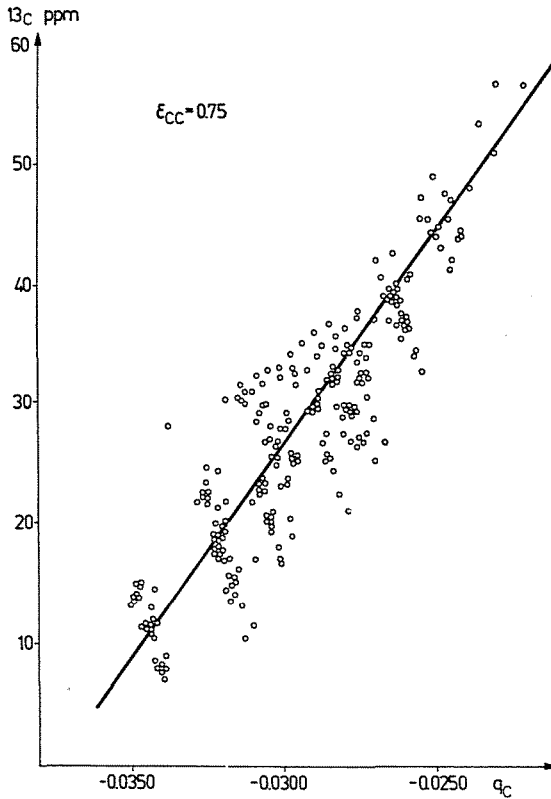


Abb. 2. Korrelation zwischen den berechneten  $q_{\text{C}}$  und experimentellen  $^{13}\text{C}$  NMR-Werten  
Parametersystem  $\epsilon_{\text{CC}} = 0,75$

Tabelle II

Die berechnete Ladungsverteilung der Alkane bei  $\epsilon_{CC} = 1,00$ 

	Verbindung	C <sub>x</sub>	<sup>13</sup> C	ber q <sub>Cx</sub>	reg <sup>r</sup> q <sub>Cx</sub>	$\Delta$ ( $q_{C_x}^{reg} - q_{C_x}^{ber}$ )	
1.	C <sub>1</sub> —C <sub>2</sub> —C <sub>3</sub> —C—C	C <sub>1</sub>	13,5	-0,0358	-0,0345	0,0013	
		C <sub>2</sub>	22,2	-0,0323	-0,0323	0,0000	
		C <sub>3</sub>	34,1	-0,0304	-0,0292	0,0012	
2.	$\begin{array}{c} \text{C} \\   \\ \text{C}_1-\text{C}_2-\text{C}_3-\text{C}_4 \end{array}$	C <sub>1</sub>	21,9	-0,0337	-0,0323	0,0014	
		C <sub>2</sub>	29,9	-0,0322	-0,0303	0,0019	
		C <sub>3</sub>	31,6	-0,0309	-0,0298	0,0011	
		C <sub>4</sub>	11,5	-0,0354	-0,0351	0,0003	
3.	$\begin{array}{c} \text{C} \\   \\ \text{C}_1-\text{C}_2-\text{C} \\   \\ \text{C} \end{array}$	C <sub>1</sub>	31,6	-0,0324	-0,0298	0,0026	] (+)
		C <sub>2</sub>	28,0	-0,0354	-0,0308	0,0046	
4.	C <sub>1</sub> —C <sub>2</sub> —C <sub>3</sub> —C—C—C	C <sub>1</sub>	13,7	-0,0358	-0,0345	0,0013	
		C <sub>2</sub>	22,7	-0,0322	-0,0321	0,0001	
		C <sub>3</sub>	31,7	-0,0298	-0,0298	0,0000	
5.	$\begin{array}{c} \text{C} \\   \\ \text{C}_1-\text{C}_2-\text{C}_3-\text{C}_4-\text{C}_5 \end{array}$	C <sub>1</sub>	22,7	-0,0335	-0,0321	0,0014	
		C <sub>2</sub>	27,9	-0,0317	-0,0308	0,0009	
		C <sub>3</sub>	41,9	-0,0285	-0,0271	0,0014	
		C <sub>4</sub>	20,8	-0,0319	-0,0326	-0,0007	
		C <sub>5</sub>	14,3	-0,0357	-0,0343	0,0014	
6.	$\begin{array}{c} \text{C}_4 \\   \\ \text{C}_1-\text{C}_2-\text{C}_3-\text{C}-\text{C} \end{array}$	C <sub>1</sub>	11,4	-0,0353	-0,0351	0,0002	] (-)
		C <sub>2</sub>	29,4	-0,0306	-0,0304	0,0002	
		C <sub>3</sub>	36,8	-0,0307	-0,0285	0,0022	
		C <sub>4</sub>	18,7	-0,0330	-0,0332	-0,0002	
7.	$\begin{array}{c} \text{C} \\   \\ \text{C}_1-\text{C}_2-\text{C}_3-\text{C}_4 \\   \\ \text{C} \end{array}$	C <sub>1</sub>	28,7	-0,0319	-0,0306	0,0013	] (-)
		C <sub>2</sub>	30,3	-0,0336	-0,0302	0,0034	
		C <sub>3</sub>	36,5	-0,0294	-0,0285	0,0009	
		C <sub>4</sub>	8,5	-0,0350	-0,0359	-0,0009	
8.	$\begin{array}{c} \text{C} \quad \quad \text{C} \\ \diagdown \quad \diagup \\ \text{C}_1-\text{C}_2-\text{C}-\text{C} \end{array}$	C <sub>1</sub>	19,2	-0,0332	-0,0331	0,0001	
		C <sub>2</sub>	34,0	-0,0306	-0,0292	0,0014	

[Fortsetzung der Tab. II. - (2)]

	Verbindung	$C_X$	$^{13}C$	$q_{C_X}^{ber}$	$q_{C_X}^{regr}$	$\Delta$ $(q_{C_X}^{regr} - q_{C_X}^{ber})$	
9.	$C_1-C_2-C_3-C_4-C-C-C$	$C_1$	13,7	-0,0358	-0,0345	0,0013	] (-)
		$C_2$	22,6	-0,0322	-0,0322	0,0000	
		$C_3$	32,0	-0,0297	-0,0297	-0,0000	
		$C_4$	29,0	-0,0293	-0,0305	-0,0012	
10.	$\begin{array}{c} C \\   \\ C_1-C_2-C_3-C_4-C_5-C_6 \end{array}$	$C_1$	22,4	-0,0335	-0,0322	0,0013	
		$C_2$	28,1	-0,0316	-0,0307	0,0009	
		$C_3$	38,9	-0,0279	-0,0279	-0,0000	
		$C_4$	29,7	-0,0294	-0,0303	-0,0009	
		$C_5$	23,0	-0,0321	-0,0321	0,0000	
		$C_6$	13,6	-0,0358	-0,0345	0,0013	
11.	$\begin{array}{c} C_7 \\   \\ C_1-C_2-C_3-C_4-C_5-C_6 \end{array}$	$C_1$	10,9	-0,0353	-0,0352	0,0001	
		$C_2$	29,5	-0,0303	-0,0304	-0,0001	
		$C_3$	34,3	-0,0296	-0,0291	0,0005	
		$C_4$	39,0	-0,0280	-0,0279	0,0001	
		$C_5$	20,2	-0,0318	-0,0328	-0,0010	
		$C_6$	13,9	-0,0357	-0,0344	0,0013	
		$C_7$	18,8	-0,0330	-0,0332	-0,0002	
12.	$\begin{array}{c} C_1 \quad C_6 \\ \diagdown \quad   \\ C_2-C_3-C_4-C_5 \\ \diagup \quad C \end{array}$	$C_1$	} 20,0	-0,0331	-0,0328	0,0003	
		$C_2$		17,7	-0,0331	-0,0334	
		$C_3$	31,9	-0,0301	-0,0297	0,0004	
		$C_4$	40,6	-0,0285	-0,0275	0,0010	
		$C_5$	26,8	-0,0301	-0,0311	-0,0010	
		$C_6$	11,6	-0,0352	-0,0350	0,0002	
13.	$\begin{array}{c} C_1 \quad C \\ \diagdown \quad \diagup \\ C_2-C_3-C \\ \diagup \quad \diagdown \\ C \quad C \end{array}$	$C_1$	22,7	-0,0334	-0,0321	0,0013	
		$C_2$	25,7	-0,0313	-0,0314	-0,0001	
		$C_3$	49,0	-0,0266	-0,0253	0,0013	
14.	$\begin{array}{c} C \\   \\ C_1-C_2-C_3-C_4-C_5 \\   \\ C \end{array}$	$C_1$	29,5	-0,0317	-0,0304	0,0013	] (-)
		$C_2$	30,6	-0,0332	-0,0301	0,0031	
		$C_3$	47,3	-0,0270	-0,0257	0,0013	
		$C_4$	18,1	-0,0315	-0,0333	-0,0018	
		$C_5$	15,1	-0,0356	-0,0341	0,0015	

[Fortsetzung der Tab. II. - (3)]

	Verbindung	C <sub>x</sub>	<sup>13</sup> C	q <sub>Cx</sub> <sup>ber</sup>	q <sub>Cx</sub> <sup>regr</sup>	$\Delta$ (q <sub>Cx</sub> <sup>regr</sup> - q <sub>Cx</sub> <sup>ber</sup> )	
15.	$\begin{array}{c} \text{C}_4 \\   \\ \text{C}_1 - \text{C}_2 - \text{C}_3 - \text{C} - \text{C} \\   \\ \text{C} \end{array}$	C <sub>1</sub>	7,7	-0,0349	-0,0361	-0,0012	] (+)
		C <sub>2</sub>	33,4	-0,0289	-0,0293	-0,0004	
		C <sub>3</sub>	32,3	-0,0318	-0,0296	0,0022	] (-)
		C <sub>4</sub>	25,6	-0,0313	-0,0314	-0,0001	
16.	$\begin{array}{c} \text{C} \quad \text{C} \\   \quad   \\ \text{C}_1 - \text{C}_2 - \text{C}_3 - \text{C}_4 \\   \\ \text{C} \end{array}$	C <sub>1</sub>	27,0	-0,0314	-0,0310	0,0004	] (-)
		C <sub>2</sub>	32,7	-0,0322	-0,0295	0,0027	
		C <sub>3</sub>	37,9	-0,0292	-0,0282	0,0010	
		C <sub>4</sub>	17,7	-0,0328	-0,0334	-0,0006	
17.	$\begin{array}{c} \text{C}_1 - \text{C}_2 \\ \quad \quad \quad \diagdown \\ \quad \quad \quad \text{C}_3 - \text{C} - \text{C} \\ \quad \quad \quad \diagup \\ \text{C} - \text{C} \end{array}$	C <sub>1</sub>	10,5	-0,0352	-0,0353	-0,0001	
		C <sub>2</sub>	25,2	-0,0299	-0,0315	-0,0016	
		C <sub>3</sub>	42,4	-0,0281	-0,0270	0,0011	
18.	C <sub>1</sub> -C <sub>2</sub> -C <sub>3</sub> -C <sub>4</sub> -C-C-C-C	C <sub>1</sub>	13,6	-0,0358	-0,0345	0,0013	] (-)
		C <sub>2</sub>	22,7	-0,0322	-0,0321	0,0001	
		C <sub>3</sub>	32,1	-0,0297	-0,0297	0,0000	
		C <sub>4</sub>	29,4	-0,0291	-0,0304	-0,0013	
19.	$\begin{array}{c} \text{C} \\   \\ \text{C}_1 - \text{C}_2 - \text{C}_3 - \text{C}_4 - \text{C}_5 - \text{C}_6 - \text{C}_7 \end{array}$	C <sub>1</sub>	22,4	-0,0335	-0,0322	0,0013	] (-)
		C <sub>2</sub>	28,1	-0,0315	-0,0307	0,0008	
		C <sub>3</sub>	39,3	-0,0278	-0,0278	0,0000	
		C <sub>4</sub>	27,2	-0,0288	-0,0310	-0,0022	
		C <sub>5</sub>	32,4	-0,0296	-0,0296	-0,0000	
		C <sub>6</sub>	22,8	-0,0321	-0,0321	-0,0000	
		C <sub>7</sub>	13,8	-0,0358	-0,0345	0,0013	
20.	$\begin{array}{c} \text{C}_8 \\   \\ \text{C}_1 - \text{C}_2 - \text{C}_3 - \text{C}_4 - \text{C}_5 - \text{C}_6 - \text{C}_7 \end{array}$	C <sub>1</sub>	11,3	-0,0353	-0,0351	0,0002	
		C <sub>2</sub>	29,7	-0,0303	-0,0303	-0,0000	
		C <sub>3</sub>	34,7	-0,0295	-0,0290	0,0005	
		C <sub>4</sub>	36,5	-0,0274	-0,0285	-0,0011	
		C <sub>5</sub>	29,7	-0,0293	-0,0303	-0,0010	
		C <sub>6</sub>	23,3	-0,0321	-0,0320	0,0001	
		C <sub>7</sub>	14,1	-0,0358	-0,0344	0,0014	
		C <sub>8</sub>	19,3	-0,0329	-0,0330	-0,0001	
21.	$\begin{array}{c} \text{C}_5 \\   \\ \text{C}_1 - \text{C}_2 - \text{C}_3 - \text{C}_4 - \text{C} - \text{C} - \text{C} \end{array}$	C <sub>1</sub>	14,1	-0,0357	-0,0344	0,0013	
		C <sub>2</sub>	20,2	-0,0317	-0,0328	-0,0011	
		C <sub>3</sub>	39,5	-0,0279	-0,0277	0,0002	
		C <sub>4</sub>	32,3	-0,0291	-0,0296	-0,0005	
		C <sub>5</sub>	19,3	-0,0328	-0,0330	-0,0002	

[Fortsetzung der Tab. II. - (4)]

	Verbindung	C <sub>X</sub>	<sup>13</sup> C	$q_{C_x}^{ber}$	$q_{C_x}^{reg}$	$\Delta$ $(q_{C_x}^{reg} - q_{C_x}^{ber})$
22.	<pre>       C       C7                 C1-C2-C3-C4-C5-C6           </pre>	C <sub>1</sub> C <sub>2</sub> C <sub>3</sub> C <sub>4</sub> C <sub>5</sub> C <sub>6</sub> C <sub>7</sub>	17,8	-0,0331	-0,0334	-0,0003
			20,0	-0,0331	-0,0328	0,0003
			32,8	-0,0300	-0,0295	0,0005
			38,5	-0,0280	-0,0280	-0,0000
			36,7	-0,0276	-0,0285	-0,0009
			20,7	-0,0317	-0,0327	-0,0010
			14,0	-0,0356	-0,0344	0,0012
15,1	-0,0325	-0,0341	-0,0016			
] (-)						
23.	<pre>       C       C7                 C1-C2-C3-C4-C5-C6           </pre>	C <sub>1</sub> C <sub>2</sub> C <sub>3</sub> C <sub>4</sub> C <sub>5</sub> C <sub>6</sub> C <sub>7</sub>	22,2	-0,0334	-0,0323	0,0011
			23,2	-0,0334	-0,0320	0,0014
			25,4	-0,0312	-0,0314	-0,0002
			46,6	-0,0261	-0,0259	0,0002
			32,1	-0,0292	-0,0297	-0,0005
			29,9	-0,0302	-0,0303	-0,0001
			11,0	-0,0352	-0,0352	-0,0000
19,0	-0,0328	-0,0331	-0,0003			
24.	<pre>       C         C                   C1-C2-C3-C-C-C           </pre>	C <sub>1</sub> C <sub>2</sub> C <sub>3</sub>	22,4	-0,0335	-0,0322	0,0013
			28,4	-0,0315	-0,0306	0,0009
			36,9	-0,0275	-0,0284	-0,0009
25.	<pre>           C4     C                   C1-C2-C3-C-C-C           </pre>	C <sub>1</sub> C <sub>2</sub> C <sub>3</sub> C <sub>4</sub>	11,8	-0,0352	-0,0350	0,0002
			25,8	-0,0299	-0,0313	-0,0014
			27,6	-0,0299	-0,0309	-0,0010
			38,5	-0,0281	-0,0280	0,0001
			39,5	-0,0281	-0,0277	0,0004
			13,8	-0,0325	-0,0345	-0,0020
15,8	-0,0325	-0,0339	-0,0014			
26.	<pre>       C         C1-C2-C3-C4-C5-C6               C           </pre>	C <sub>1</sub> C <sub>2</sub> C <sub>3</sub> C <sub>4</sub> C <sub>5</sub> C <sub>6</sub>	29,2	-0,0317	-0,0304	0,0013
			30,1	-0,0331	-0,0302	0,0029
			44,1	-0,0264	-0,0265	-0,0001
			27,0	-0,0290	-0,0310	-0,0020
			23,7	-0,0320	-0,0319	0,0001
			13,9	-0,0357	-0,0344	0,0013
] (-)						
27.	<pre>           C7             C1-C2-C3-C4-C5-C6                       C           </pre>	C <sub>1</sub> C <sub>2</sub> C <sub>3</sub> C <sub>4</sub> C <sub>5</sub> C <sub>6</sub> C <sub>7</sub>	8,1	-0,0348	-0,0360	-0,0012
			34,3	-0,0288	-0,0291	-0,0003
			32,8	-0,0314	-0,0295	0,0019
			44,3	-0,0265	-0,0265	0,0000
			17,3	-0,0314	-0,0336	-0,0022
			14,8	-0,0356	-0,0342	0,0014
			26,5	-0,0312	-0,0311	0,0001
] (+)						
] (-)						

[Fortsetzung der Tab. II. — (5)]

	Verbindung	C <sub>X</sub>	<sup>13</sup> C	q <sub>C<sub>X</sub></sub> <sup>ber</sup>	q <sub>C<sub>X</sub></sub> <sup>reg</sup>	$\Delta$ (q <sub>C<sub>X</sub></sub> <sup>reg</sup> - q <sub>C<sub>X</sub></sub> <sup>ber</sup> )	
28.	$\begin{array}{ccccccc} & & \text{C} & & \text{C}_4 & & \text{C} \\ & &   & &   & &   \\ \text{C}_1 & - & \text{C}_2 & - & \text{C}_3 & - & \text{C}_4 \end{array}$	C <sub>1</sub>	21,4	-0,0330	-0,0325	0,0005	
		C <sub>2</sub>	18,1	-0,0330	-0,0333	-0,0003	
		C <sub>3</sub>	29,8	-0,0298	-0,0303	-0,0005	
		C <sub>4</sub>	45,3	-0,0269	-0,0262	0,0007	
		C <sub>5</sub>	10,4	-0,0322	-0,0354	-0,0032	
29.	$\begin{array}{ccccccc} & & \text{C} & & \text{C}_6 & & \\ & &   & &   & & \\ \text{C}_1 & - & \text{C}_2 & - & \text{C}_3 & - & \text{C}_4 - \text{C}_5 \\ & &   & & & & \\ & & \text{C} & & & & \end{array}$	C <sub>1</sub>	27,1	-0,0313	-0,0310	0,0003	] (-)
		C <sub>2</sub>	33,0	-0,0318	-0,0294	0,0024	
		C <sub>3</sub>	45,4	-0,0272	-0,0262	0,0010	
		C <sub>4</sub>	24,4	-0,0297	-0,0317	-0,0020	
		C <sub>5</sub>	13,0	-0,0351	-0,0347	0,0004	
		C <sub>6</sub>	13,3	-0,0323	-0,0346	-0,0023	
30.	$\begin{array}{ccccccc} & & \text{C} & & \text{C}_6 & & \\ & &   & &   & & \\ \text{C}_1 & - & \text{C}_2 & - & \text{C}_3 & - & \text{C}_4 - \text{C}_5 \\ & &   & & & & \\ & & \text{C} & & & & \end{array}$	C <sub>1</sub>	17,1	-0,0327	-0,0336	-0,0009	] (-) ] (-) ] (+)
		C <sub>2</sub>	35,1	-0,0289	-0,0289	0,0000	
		C <sub>3</sub>	34,9	-0,0305	-0,0289	0,0016	
		C <sub>4</sub>	32,6	-0,0286	-0,0296	-0,0010	
		C <sub>5</sub>	7,9	-0,0348	-0,0360	-0,0012	
		C <sub>6</sub>	23,3	-0,0309	-0,0320	-0,0011	
31.	$\begin{array}{ccccccc} & & \text{C} & & & & \text{C} \\ & &   & & & &   \\ \text{C}_1 & - & \text{C}_2 & - & \text{C}_3 & - & \text{C}_4 - \text{C}_5 \\ & &   & & & & \\ & & \text{C} & & & & \end{array}$	C <sub>1</sub>	29,9	-0,0316	-0,0303	0,0013	] (-)
		C <sub>2</sub>	30,9	-0,0328	-0,0300	0,0028	
		C <sub>3</sub>	53,3	-0,0251	-0,0241	0,0010	
		C <sub>4</sub>	25,3	-0,0310	-0,0315	-0,0005	
		C <sub>5</sub>	24,7	-0,0333	-0,0316	0,0017	
32.	$\begin{array}{ccccccc} & & \text{C} & & & & \text{C} \\ & & / & & & & / \\ & & \text{C}_1 - \text{C}_2 & - & \text{C}_3 & - & \text{C}_4 \\ & & \backslash & & & & \backslash \\ & & \text{C} & & & & \text{C} \end{array}$	C <sub>1</sub>	25,6	-0,0311	-0,0314	-0,0003	] (-)
		C <sub>2</sub>	35,0	-0,0311	-0,0289	0,0022	
33.	$\begin{array}{ccccccc} & & \text{C} & & & & \text{C} \\ & & / & & & & / \\ & & \text{C}_1 - \text{C}_2 & - & \text{C}_3 & - & \text{C}_4 - \text{C}_5 - \text{C}_6 \\ & & \backslash & & & & \backslash \\ & & \text{C} & & & & \text{C} \end{array}$	C <sub>1</sub>	10,6	-0,0351	-0,0353	-0,0002	] (-)
		C <sub>2</sub>	25,6	-0,0298	-0,0314	-0,0016	
		C <sub>3</sub>	40,6	-0,0276	-0,0275	0,0001	
		C <sub>4</sub>	35,4	-0,0275	-0,0288	-0,0013	
		C <sub>5</sub>	20,0	-0,0316	-0,0328	-0,0012	
		C <sub>6</sub>	14,1	-0,0356	-0,0344	0,0012	
34.	$\begin{array}{ccccccc} & & \text{C} & & & & \text{C} - \text{C} \\ & &   & & & & / \\ \text{C}_1 & - & \text{C}_2 & - & \text{C}_3 & - & \text{C}_4 - \text{C}_5 \\ & & & & & & \backslash \\ & & & & & & \text{C} \end{array}$	C <sub>1</sub>	19,0	-0,0330	-0,0331	-0,0001	
		C <sub>2</sub>	29,1	-0,0297	-0,0305	-0,0008	
		C <sub>3</sub>	47,6	-0,0265	-0,0256	0,0009	
		C <sub>4</sub>	22,6	-0,0296	-0,0322	-0,0026	
		C <sub>5</sub>	11,8	-0,0351	-0,0350	0,0001	



[Fortsetzung der Tab. II. — (6)]

	Verbindung	C <sub>x</sub>	<sup>13</sup> C	ber q <sub>Cx</sub>	regr q <sub>Cx</sub>	$\Delta$ (q <sub>Cx</sub> <sup>regr</sup> - q <sub>Cx</sub> <sup>ber</sup> )	
35.	$  \begin{array}{c}  \text{C}-\text{C} \quad \text{C}_4 \\  \quad \quad \quad   \\  \text{C}_1-\text{C}_2-\text{C}_3-\text{C}_4-\text{C}_5  \end{array}  $	C <sub>1</sub>	7,5	-0,0348	-0,0361	-0,0013	$\left. \begin{array}{l} (-) \\ (+) \end{array} \right\}$
		C <sub>2</sub>	30,6	-0,0285	-0,0301	-0,0016	
		C <sub>3</sub>	34,8	-0,0301	-0,0290	0,0011	
		C <sub>4</sub>	23,2	-0,0308	-0,0320	-0,0012	
36.	C <sub>1</sub> -C <sub>2</sub> -C <sub>3</sub> -C <sub>4</sub> -C <sub>5</sub> -C-C-C-C	C <sub>1</sub>	13,8	-0,0358	-0,0345	0,0013	$\left. \begin{array}{l} (-) \\ (-) \end{array} \right\}$
		C <sub>2</sub>	22,7	-0,0321	-0,0321	-0,0000	
		C <sub>3</sub>	32,0	-0,0297	-0,0297	-0,0000	
		C <sub>4</sub>	29,4	-0,0291	-0,0304	-0,0013	
		C <sub>5</sub>	29,6	-0,0290	-0,0303	-0,0013	
37.	$  \begin{array}{c}  \text{C} \\    \\  \text{C}_1-\text{C}_2-\text{C}_5-\text{C}_4-\text{C}_5-\text{C}_6-\text{C}_7-\text{C}_8  \end{array}  $	C <sub>1</sub>	22,3	-0,0335	-0,0322	0,0013	$\left. \begin{array}{l} (-) \\ (-) \end{array} \right\}$
		C <sub>2</sub>	28,0	-0,0315	-0,0308	0,0007	
		C <sub>3</sub>	39,2	-0,0278	-0,0278	-0,0000	
		C <sub>4</sub>	27,4	-0,0287	-0,0309	-0,0022	
		C <sub>5</sub>	29,7	-0,0290	-0,0303	-0,0013	
		C <sub>6</sub>	32,0	-0,0297	-0,0297	-0,0000	
		C <sub>7</sub>	22,7	-0,0321	-0,0321	-0,0000	
		C <sub>8</sub>	13,6	-0,0358	-0,0345	0,0013	
38.	$  \begin{array}{c}  \text{C}_9 \\    \\  \text{C}_1-\text{C}_2-\text{C}_3-\text{C}_4-\text{C}_5-\text{C}_6-\text{C}_7-\text{C}_8  \end{array}  $	C <sub>1</sub>	11,1	-0,0353	-0,0352	0,0001	$\left. \begin{array}{l} (-) \end{array} \right\}$
		C <sub>2</sub>	29,7	-0,0303	-0,0303	-0,0000	
		C <sub>3</sub>	34,6	-0,0295	-0,0290	0,0005	
		C <sub>4</sub>	36,7	-0,0273	-0,0285	-0,0012	
		C <sub>5</sub>	26,9	-0,0287	-0,0310	-0,0023	
		C <sub>6</sub>	32,4	-0,0296	-0,0296	-0,0000	
		C <sub>7</sub>	22,7	-0,0321	-0,0321	-0,0000	
		C <sub>8</sub>	13,8	-0,0358	-0,0345	0,0013	
		C <sub>9</sub>	19,0	-0,0329	-0,0331	-0,0002	
39.	$  \begin{array}{c}  \text{C}_9 \\    \\  \text{C}_1-\text{C}_2-\text{C}_3-\text{C}_4-\text{C}_5-\text{C}_6-\text{C}_7-\text{C}_8  \end{array}  $	C <sub>1</sub>	14,0	-0,0357	-0,0344	0,0013	
		C <sub>2</sub>	19,4	-0,0317	-0,0330	-0,0013	
		C <sub>3</sub>	39,6	-0,0278	-0,0277	0,0001	
		C <sub>4</sub>	32,6	-0,0290	-0,0296	-0,0006	
		C <sub>5</sub>	36,8	-0,0273	-0,0285	-0,0012	
		C <sub>6</sub>	29,3	-0,0293	-0,0304	-0,0011	
		C <sub>7</sub>	23,0	-0,0320	-0,0321	-0,0001	
		C <sub>8</sub>	13,7	-0,0358	-0,0345	0,0013	
		C <sub>9</sub>	20,2	-0,0328	-0,0328	0,0000	

[Fortsetzung der Tab. II. — (7)]

	Verbindung	C <sub>x</sub>	<sup>13</sup> C	ber q <sub>Cx</sub>	reg <sup>r</sup> q <sub>Cx</sub>	$\Delta$ (q <sub>Cx</sub> <sup>reg<sup>r</sup></sup> - q <sub>Cx</sub> <sup>ber</sup> )	
40.	$\begin{array}{cccccccc} & & \text{C} & & \text{C}_8 & & & \\ & &   & &   & & & \\ \text{C}_1 & - & \text{C}_2 & - & \text{C}_3 & - & \text{C}_4 & - & \text{C}_5 & - & \text{C}_6 & - & \text{C}_7 \end{array}$	C <sub>1</sub>	20,1	-0,0331	-0,0328	0,0003	} (-)
			17,9	-0,0331	-0,0334	-0,0003	
		C <sub>2</sub>	32,2	-0,0300	-0,0297	0,0003	
		C <sub>3</sub>	38,8	-0,0279	-0,0279	-0,0000	
		C <sub>4</sub>	34,0	-0,0270	-0,0292	-0,0022	
		C <sub>5</sub>	30,0	-0,0292	-0,0302	-0,0010	
		C <sub>6</sub>	23,1	-0,0320	-0,0320	-0,0000	
		C <sub>7</sub>	13,8	-0,0358	-0,0345	0,0013	
C <sub>8</sub>	15,2	-0,0325	-0,0341	-0,0016			
41.	$\begin{array}{cccccccc} & & \text{C} & & \text{C}_8 & & & \\ & &   & &   & & & \\ \text{C}_1 & - & \text{C}_2 & - & \text{C}_3 & - & \text{C}_4 & - & \text{C}_5 & - & \text{C}_6 & - & \text{C}_7 \end{array}$	C <sub>1</sub>	22,1	-0,0334	-0,0323	0,0011	
			23,1	-0,0334	-0,0320	0,0014	
		C <sub>2</sub>	25,3	-0,0312	-0,0315	-0,0003	
		C <sub>3</sub>	47,0	-0,0260	-0,0258	0,0002	
		C <sub>4</sub>	30,2	-0,0287	-0,0302	-0,0015	
		C <sub>5</sub>	39,9	-0,0278	-0,0276	0,0002	
		C <sub>6</sub>	19,9	-0,0317	-0,0329	-0,0012	
		C <sub>7</sub>	14,0	-0,0357	-0,0344	0,0013	
C <sub>8</sub>	19,4	-0,0327	-0,0330	-0,0003			
42.	$\begin{array}{cccccccc} & & \text{C} & & \text{C}_8 & & & \\ & &   & &   & & & \\ \text{C}_1 & - & \text{C}_2 & - & \text{C}_3 & - & \text{C}_4 & - & \text{C}_5 & - & \text{C}_6 & - & \text{C}_7 \end{array}$	C <sub>1</sub>	22,3	-0,0335	-0,0322	0,0013	} (-)
			22,5	-0,0335	-0,0322	0,0013	
		C <sub>2</sub>	28,4	-0,0315	-0,0306	0,0009	
		C <sub>3</sub>	36,5	-0,0274	-0,0285	-0,0011	
		C <sub>4</sub>	34,4	-0,0270	-0,0291	-0,0021	
		C <sub>5</sub>	34,8	-0,0294	-0,0920	0,0004	
		C <sub>6</sub>	29,5	-0,0303	-0,0304	-0,0001	
		C <sub>7</sub>	11,0	-0,0353	-0,0352	0,0001	
C <sub>8</sub>	19,0	-0,0329	-0,0331	-0,0002			
43.	$\begin{array}{ccccccc} & & \text{C} & & & & \text{C} \\ & &   & & & &   \\ \text{C}_1 & - & \text{C}_2 & - & \text{C}_3 & - & \text{C}_4 & - & \text{C} & - & \text{C} & - & \text{C} \end{array}$	C <sub>1</sub>	22,4	-0,0335	-0,0322	0,0013	
		C <sub>2</sub>	28,1	-0,0315	-0,0307	0,0008	
		C <sub>3</sub>	39,5	-0,0277	-0,0277	-0,0000	
		C <sub>4</sub>	25,2	-0,0284	-0,0315	-0,0031	
44.	$\begin{array}{ccccccc} & & & & \text{C}_8 & & \text{C}_9 \\ & & & &   & &   \\ \text{C}_1 & - & \text{C}_2 & - & \text{C}_3 & - & \text{C}_4 & - & \text{C}_5 & - & \text{C}_6 & - & \text{C}_7 \end{array}$	C <sub>1</sub>	11,9	-0,0352	-0,0350	0,0002	
		C <sub>2</sub>	25,8	-0,0299	-0,0313	-0,0014	
			27,6	-0,0299	-0,0309	-0,0010	
		C <sub>3</sub>	38,9	-0,0280	-0,0279	0,0001	
			39,8	-0,0280	-0,0277	0,0003	
		C <sub>4</sub>	36,3	-0,0276	-0,0286	-0,0010	
	37,2	-0,0276	-0,0283	-0,0007			

[Fortsetzung der Tab. II. — (8)]

	Verbindung	C <sub>X</sub>	<sup>13</sup> C	<sup>ber</sup> q <sub>C<sub>X</sub></sub>	<sup>regr</sup> q <sub>C<sub>X</sub></sub>	$\Delta$ ( <sup>regr</sup> q <sub>C<sub>X</sub> - <sup>ber</sup>q<sub>C<sub>X</sub>)</sub></sub>	
44.	$  \begin{array}{ccccccc}  & & C_8 & C_9 & & & \\  & &   &   & & & \\  C_1 - C_2 - C_3 - C_4 - C_5 - C_6 - C_7  \end{array}  $	C <sub>5</sub>	35,5	-0,0275	-0,0288	-0,0013	
			37,5	-0,0275	-0,0283	-0,0008	
		C <sub>6</sub>	20,8	-0,0316	-0,0326	-0,0010	
			14,2	-0,0356	-0,0344	0,0012	
		C <sub>8</sub>	13,9	-0,0325	-0,0344	-0,0019	
			15,8	-0,0325	-0,0339	-0,0014	
		C <sub>9</sub>	16,3	-0,0324	-0,0338	-0,0014	
			14,2	-0,0324	-0,0344	-0,0020	
		45.	$  \begin{array}{ccccccc}  & & C_5 & & C & & \\  & &   & &   & & \\  C_1 - C_2 - C_3 - C_4 - C - C - C  \end{array}  $	C <sub>1</sub>	10,9	-0,0352	-0,0352
11,1	-0,0352				-0,0352	0,0000	
C <sub>2</sub>	29,5			-0,0302	-0,0304	-0,0002	
	30,5			-0,0302	-0,0301	0,0001	
C <sub>3</sub>	31,9			-0,0291	-0,0297	-0,0006	
	32,0			-0,0291	-0,0297	-0,0006	
C <sub>4</sub>	44,3			-0,0256	-0,0265	-0,0009	
	44,5			-0,0256	-0,0264	-0,0008	
C <sub>5</sub>	18,9			-0,0328	-0,0331	-0,0003	
	19,6			-0,0328	-0,0330	-0,0002	
46.	$  \begin{array}{ccccccc}  & & C & & & & \\  & &   & & & & \\  C_1 - C_2 - C_3 - C_4 - C_5 - C_6 - C_7 \\  & &   & & & & \\  & & C & & & &   \end{array}  $	C <sub>1</sub>	29,2	-0,0317	-0,0304	0,0013	] (-)
		C <sub>2</sub>	30,2	-0,0331	-0,0302	0,0029	
		C <sub>3</sub>	44,4	-0,0263	-0,0265	-0,0002	] (-)
		C <sub>4</sub>	24,4	-0,0285	-0,0317	-0,0032	
		C <sub>5</sub>	33,0	-0,0295	-0,0294	0,0001	
		C <sub>6</sub>	22,8	-0,0321	-0,0321	-0,0000	
		C <sub>7</sub>	13,8	-0,0358	-0,0345	0,0013	
47.	$  \begin{array}{ccccccc}  & & C_8 & & & & \\  & &   & & & & \\  C_1 - C_2 - C_3 - C_4 - C_5 - C_6 - C_7 \\  & &   & & & & \\  & & C & & & &   \end{array}  $	C <sub>1</sub>	8,0	-0,0349	-0,0360	-0,0011	] (+)
		C <sub>2</sub>	34,2	-0,0288	-0,0291	-0,0003	
		C <sub>3</sub>	32,5	-0,0313	-0,0296	0,0017	] (-)
		C <sub>4</sub>	41,3	-0,0259	-0,0273	-0,0014	
		C <sub>5</sub>	26,4	-0,0289	-0,0312	-0,0023	
		C <sub>6</sub>	23,7	-0,0320	-0,0319	0,0001	
		C <sub>7</sub>	13,7	-0,0357	-0,0345	0,0012	
		C <sub>8</sub>	26,4	-0,0312	-0,0312	0,0000	
48.	$  \begin{array}{ccccccc}  & & & C_5 & & & \\  & & &   & & & \\  C_1 - C_2 - C_3 - C_4 - C - C - C \\  & & &   & & & \\  & & & C & & &   \end{array}  $	C <sub>1</sub>	14,9	-0,0357	-0,0342	0,0015	] (+)
		C <sub>2</sub>	17,3	-0,0314	-0,0336	-0,0022	
		C <sub>3</sub>	44,8	-0,0264	-0,0264	0,0000	
		C <sub>4</sub>	32,8	-0,0310	-0,0295	0,0015	
		C <sub>5</sub>	27,0	-0,0311	-0,0310	0,0001	

[Fortsetzung der Tab. II. — (9)]

	Verbindung	C <sub>x</sub>	<sup>13</sup> C	q <sub>Cx</sub> <sup>ber</sup>	q <sub>Cx</sub> <sup>regr</sup>	$\Delta$ (q <sub>Cx</sub> <sup>regr</sup> - q <sub>Cx</sub> <sup>ber</sup> )	
49.	$\begin{array}{ccccccccc} & & \text{C} & & \text{C}_7 & & \text{C} & & \\ & &   & &   & &   & & \\ \text{C}_1 & - & \text{C}_2 & - & \text{C}_3 & - & \text{C}_4 & - & \text{C}_5 & - & \text{C}_6 \end{array}$	C <sub>1</sub>	17,8 20,0	-0,0330 -0,0330	-0,0334 -0,0328	-0,0004 0,0002	] (-)
		C <sub>2</sub>	32,4	-0,0299	-0,0296	0,0003	
		C <sub>3</sub>	36,2	-0,0276	-0,0286	-0,0010	
		C <sub>4</sub>	43,9	-0,0257	-0,0266	-0,0009	
		C <sub>5</sub>	25,7	-0,0311	-0,0314	-0,0003	
		C <sub>6</sub>	21,9 23,5	-0,0334 -0,0334	-0,0323 -0,0319	0,0011 0,0015	
		C <sub>7</sub>	15,3	-0,0324	-0,0341	-0,0017	
50.	$\begin{array}{ccccccccc} & & \text{C} & & & & \text{C}_7 & & \\ & &   & & & &   & & \\ \text{C}_1 & - & \text{C}_2 & - & \text{C}_3 & - & \text{C}_4 & - & \text{C}_5 & - & \text{C}_6 \\ & &   & & & & & & & & \\ & & \text{C} & & & & & & & & \end{array}$	C <sub>1</sub>	29,9	-0,0316	-0,0303	0,0013	] (-)
		C <sub>2</sub>	31,0	-0,0323	-0,0300	0,0028	
		C <sub>3</sub>	51,0	-0,0246	-0,0247	-0,0001	
		C <sub>4</sub>	31,9	-0,0289	-0,0297	-0,0008	
		C <sub>5</sub>	31,0	-0,0302	-0,0300	0,0002	
		C <sub>6</sub>	11,2	-0,0352	-0,0351	0,0001	
		C <sub>7</sub>	21,9	-0,0328	-0,0323	0,0005	
51.	$\begin{array}{ccccccccc} & & \text{C} & & & & \text{C} & & \\ & &   & & & &   & & \\ \text{C}_1 & - & \text{C}_2 & - & \text{C}_3 & - & \text{C}_4 & - & \text{C}_5 & - & \text{C}_6 \\ & &   & & & & & & & & \\ & & \text{C} & & & & & & & & \end{array}$	C <sub>1</sub>	29,3	-0,0317	-0,0304	0,0013	] (-)
		C <sub>2</sub>	30,1	-0,0330	-0,0302	0,0028	
		C <sub>3</sub>	42,0	-0,0259	-0,0271	-0,0012	
		C <sub>4</sub>	33,9	-0,0271	-0,0292	-0,0021	
		C <sub>5</sub>	28,9	-0,0314	-0,0305	0,0009	
		C <sub>6</sub>	22,5	-0,0335	-0,0322	0,0013	
52.	$\begin{array}{ccccccccc} & & \text{C} & & \text{C}_7 & & & & \\ & &   & &   & & & & \\ \text{C}_1 & - & \text{C}_2 & - & \text{C}_3 & - & \text{C}_4 & - & \text{C}_5 & - & \text{C}_6 \\ & &   & &   & & & & & & \\ & & \text{C} & & & & & & & & \end{array}$	C <sub>1</sub>	17,1	-0,0327	-0,0336	-0,0009	] (-)
		C <sub>2</sub>	35,0	-0,0288	-0,0289	-0,0001	
		C <sub>3</sub>	35,5	-0,0301	-0,0288	0,0013	
		C <sub>4</sub>	43,1	-0,0262	-0,0268	-0,0006	
		C <sub>5</sub>	17,0	-0,0313	-0,0336	-0,0023	
		C <sub>6</sub>	14,8	-0,0356	-0,0342	0,0014	
		C <sub>7</sub>	23,8	-0,0308	-0,0319	-0,0011	
53.	$\begin{array}{ccccccccc} & & \text{C} & & \text{C}_6 & & \text{C} & & \\ & &   & &   & &   & & \\ \text{C}_1 & - & \text{C}_2 & - & \text{C}_3 & - & \text{C}_4 & - & \text{C}_5 \\ & &   & & & & & & \\ & & \text{C} & & & & & & \end{array}$	C <sub>1</sub>	28,2	-0,0312	-0,0307	0,0005	] (-)
		C <sub>2</sub>	34,0	-0,0316	-0,0292	0,0024	
		C <sub>3</sub>	47,9	-0,0256	-0,0255	0,0001	
		C <sub>4</sub>	27,4	-0,0295	-0,0309	-0,0014	
		C <sub>5</sub>	17,3	-0,0329	-0,0336	-0,0007	
		C <sub>6</sub>	24,5 11,6	-0,0329 -0,0318	-0,0317 -0,0350	0,0012 -0,0032	

[Fortsetzung der Tab. II. - (10)]

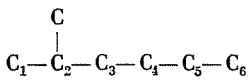
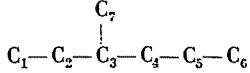
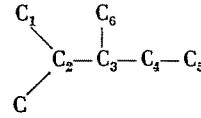
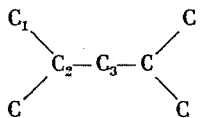
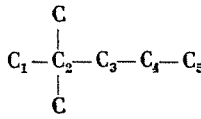
	Verbindung	C <sub>x</sub>	<sup>13</sup> C	q <sub>Cx</sub> <sup>ber</sup>	q <sub>Cx</sub> <sup>regr</sup>	$\frac{\Delta}{(q_{C_x}^{regr} - q_{C_x}^{ber})}$	
54.	$  \begin{array}{c}  C \quad C_3 \quad C \\    \quad   \quad   \\  C_1 - C_2 - C_3 - C - C \\    \\  C  \end{array}  $	C <sub>1</sub>	17,2	-0,0327	-0,0336	-0,0009	] (+)
		C <sub>2</sub>	37,1	-0,0286	-0,0284	0,0002	
		C <sub>3</sub>	33,6	-0,0291	-0,0293	-0,0002	
		C <sub>4</sub>	18,9	-0,0305	-0,0331	-0,0026	
55.	$  \begin{array}{c}  C \quad C_6 \\    \quad   \\  C_1 - C_2 - C_3 - C_4 - C_5 \\    \quad   \\  C \quad C  \end{array}  $	C <sub>1</sub>	25,6	-0,0310	-0,0314	-0,0004	] (+)
		C <sub>2</sub>	36,0	-0,0308	-0,0287	0,0021	
		C <sub>3</sub>	37,3	-0,0294	-0,0283	0,0011	] (-)
		C <sub>4</sub>	28,8	-0,0283	-0,0305	-0,0022	
		C <sub>5</sub>	9,0	-0,0347	-0,0357	-0,0010	] (+)
		C <sub>6</sub>	20,6	-0,0306	-0,0327	-0,0021	
56.	$  \begin{array}{c}  C - C \\  \diagdown \quad / \\  C_1 - C_2 - C_3 - C_4 - C_5 - C_6 - C_7  \end{array}  $	C <sub>1</sub>	10,6	-0,0351	-0,0353	-0,0002	] (-)
		C <sub>2</sub>	25,6	-0,0298	-0,0314	-0,0016	
		C <sub>3</sub>	40,7	-0,0275	-0,0274	0,0001	
		C <sub>4</sub>	32,7	-0,0269	-0,0295	-0,0026	
		C <sub>5</sub>	29,2	-0,0292	-0,0304	-0,0012	
		C <sub>6</sub>	23,1	-0,0320	-0,0320	-0,0000	
		C <sub>7</sub>	13,7	-0,0358	-0,0345	0,0013	
57.	$  \begin{array}{c}  C \quad C_4 - C_5 \\    \quad   \\  C_1 - C_2 - C_3 - C - C \\    \\  C  \end{array}  $	C <sub>1</sub> {	19,0	-0,0329	-0,0331	-0,0002	
			20,0	-0,0329	-0,0328	0,0001	
		C <sub>2</sub>	29,0	-0,0294	-0,0305	-0,0011	
		C <sub>3</sub>	56,8	-0,0249	-0,0232	0,0017	
		C <sub>4</sub>	21,1	-0,0292	-0,0326	-0,0034	
58.	$  \begin{array}{c}  C - C \\  \diagdown \quad / \\  C_1 - C_2 - C_3 - C - C \\  \diagup \quad \diagdown \\  C - C  \end{array}  $	C <sub>1</sub>	7,1	-0,0346	-0,0362	-0,0016	] (-)
		C <sub>2</sub>	27,1	-0,0281	-0,0310	-0,0029	
		C <sub>3</sub>	37,1	-0,0284	-0,0284	0,0000	
59.	$  \begin{array}{c}  C \quad C \\    \quad   \\  C_1 - C_2 - C_3 - C - C \\    \quad   \\  C \quad C  \end{array}  $	C <sub>1</sub>	31,8	-0,0315	-0,0298	0,0017	] (-)
		C <sub>2</sub>	32,4	-0,0326	-0,0296	0,0030	
		C <sub>3</sub>	56,5	-0,0236	-0,0233	0,0003	

Tabelle III

Die berechnete Ladungsverteilung der Alkane bei  $\epsilon_{CC} = 0,75$ 

	Verbindung	C <sub>x</sub>	<sup>13</sup> C	q <sub>Cx</sub> <sup>ber</sup>	q <sub>Cx</sub> <sup>reg</sup>	$\Delta$ (q <sub>Cx</sub> <sup>reg</sup> - q <sub>Cx</sub> <sup>ber</sup> )	
1.	C <sub>1</sub> -C <sub>2</sub> -C <sub>3</sub> -C-C	C <sub>1</sub>	13,5	-0,0350	-0,0336	0,0014	
		C <sub>2</sub>	22,2	-0,0310	-0,0312	-0,0002	
		C <sub>3</sub>	34,1	-0,0290	-0,0279	0,0011	
2.	$\begin{array}{c} \text{C} \\   \\ \text{C}_1-\text{C}_2-\text{C}_3-\text{C}_4 \end{array}$	C <sub>1</sub>	21,9	-0,0328	-0,0313	0,0015	
		C <sub>2</sub>	29,9	-0,0306	-0,0291	0,0015	
		C <sub>3</sub>	31,6	-0,0296	-0,0286	0,0010	
		C <sub>4</sub>	11,5	-0,0346	-0,0342	0,0004	
3.	$\begin{array}{c} \text{C} \\   \\ \text{C}_1-\text{C}_2-\text{C} \\   \\ \text{C} \end{array}$	C <sub>1</sub>	31,6	-0,0314	-0,0286	0,0028	] (+)
		C <sub>2</sub>	28,0	-0,0338	-0,0296	0,0042	
4.	C <sub>1</sub> -C <sub>2</sub> -C <sub>3</sub> -C-C-C	C <sub>1</sub>	13,7	-0,0349	-0,0336	0,0013	
		C <sub>2</sub>	22,7	-0,0309	-0,0311	-0,0002	
		C <sub>3</sub>	31,7	-0,0284	-0,0286	-0,0002	
5.	$\begin{array}{c} \text{C} \\   \\ \text{C}_1-\text{C}_2-\text{C}_3-\text{C}_4-\text{C}_5 \end{array}$	C <sub>1</sub>	22,7	-0,0326	-0,0311	0,0015	
		C <sub>2</sub>	27,9	-0,0301	-0,0296	0,0005	
		C <sub>3</sub>	41,9	-0,0270	-0,0257	0,0013	
		C <sub>4</sub>	20,8	-0,0306	-0,0316	-0,0010	
		C <sub>5</sub>	14,3	-0,0348	-0,0334	0,0014	
6.	$\begin{array}{c} \text{C}_4 \\   \\ \text{C}_1-\text{C}_2-\text{C}_3-\text{C}-\text{C} \end{array}$	C <sub>1</sub>	11,4	-0,0345	-0,0342	0,0003	] (+)
		C <sub>2</sub>	29,4	-0,0291	-0,0292	-0,0001	
		C <sub>3</sub>	36,8	-0,0285	-0,0272	0,0013	
		C <sub>4</sub>	18,7	-0,0322	-0,0322	0,0000	
7.	$\begin{array}{c} \text{C} \\   \\ \text{C}_1-\text{C}_2-\text{C}_3-\text{C}_4 \\   \\ \text{C} \end{array}$	C <sub>1</sub>	28,7	-0,0309	-0,0294	0,0015	] (-)
		C <sub>2</sub>	30,3	-0,0319	-0,0290	0,0029	
		C <sub>3</sub>	36,5	-0,0280	-0,0272	0,0008	
		C <sub>4</sub>	8,5	-0,0342	-0,0350	-0,0008	
8.	$\begin{array}{c} \text{C} \quad \quad \text{C} \\ \diagdown \quad \diagup \\ \text{C}_1-\text{C}_2-\text{C}-\text{C} \end{array}$	C <sub>1</sub>	19,2	-0,0323	-0,0320	0,0003	
		C <sub>2</sub>	34,0	-0,0289	-0,0279	0,0010	

[Fortsetzung der Tab. III. (2)]

	Verbindung	C <sub>x</sub>	<sup>13</sup> C	ber q <sub>Cx</sub>	regt q <sub>Cx</sub>	$\Delta$ (q <sub>Cx</sub> <sup>regt</sup> - q <sub>Cx</sub> <sup>ber</sup> )	
9.	C <sub>1</sub> -C <sub>2</sub> -C <sub>3</sub> -C <sub>4</sub> -C-C-C	C <sub>1</sub>	13,7	-0,0349	-0,0336	0,0013	] (-)
		C <sub>2</sub>	22,6	-0,0308	-0,0311	-0,0003	
		C <sub>3</sub>	32,0	-0,0283	-0,0285	-0,0002	
		C <sub>4</sub>	29,0	-0,0279	-0,0293	-0,0014	
10.		C <sub>1</sub>	22,4	-0,0326	-0,0311	0,0015	
		C <sub>2</sub>	28,1	-0,0300	-0,0296	0,0004	
		C <sub>3</sub>	38,9	-0,0265	-0,0266	-0,0001	
		C <sub>4</sub>	29,7	-0,0280	-0,0291	-0,0011	
		C <sub>5</sub>	23,0	-0,0308	-0,0310	-0,0002	
		C <sub>6</sub>	13,6	-0,0349	-0,0336	0,0013	
11.		C <sub>1</sub>	10,9	-0,0344	-0,0343	0,0001	
		C <sub>2</sub>	29,5	-0,0290	-0,0292	-0,0002	
		C <sub>3</sub>	34,3	-0,0280	-0,0279	0,0001	
		C <sub>4</sub>	39,0	-0,0266	-0,0265	0,0001	
		C <sub>5</sub>	20,2	-0,0305	-0,0318	-0,0013	
		C <sub>6</sub>	13,9	-0,0348	-0,0335	0,0013	
		C <sub>7</sub>	18,8	-0,0321	-0,0321	-0,0000	
12.		C <sub>1</sub>	20,0	-0,0322	-0,0318	0,0004	
		C <sub>2</sub>		17,7	-0,0322	-0,0325	
		C <sub>2</sub>	31,9	-0,0285	-0,0285	-0,0000	
		C <sub>3</sub>	40,6	-0,0268	-0,0261	0,0007	
		C <sub>4</sub>	26,8	-0,0287	-0,0299	-0,0012	
		C <sub>5</sub>	11,6	-0,0344	-0,0341	0,0003	
13.		C <sub>1</sub>	22,7	-0,0325	-0,0311	0,0014	
		C <sub>2</sub>	25,7	-0,0298	-0,0302	-0,0004	
		C <sub>3</sub>	49,0	-0,0251	-0,0238	0,0013	
14.		C <sub>1</sub>	29,5	-0,0308	-0,0292	0,0016	] (-)
		C <sub>2</sub>	30,6	-0,0315	-0,0289	0,0026	
		C <sub>3</sub>	47,3	-0,0255	-0,0242	0,0013	
		C <sub>4</sub>	18,1	-0,0302	-0,0323	-0,0021	
		C <sub>5</sub>	15,1	-0,0348	-0,0332	0,0016	

[Fortsetzung der Tab. III. (3)]

	Verbindung	C <sub>x</sub>	<sup>13</sup> C	ber q <sub>Cx</sub>	reg <sub>Cx</sub>	$\Delta$ ( $q_{C_x}^{reg} - q_{C_x}^{ber}$ )	
15.	$  \begin{array}{c}  C_4 \\    \\  C_1 - C_2 - C_3 - C - C \\    \\  C  \end{array}  $	C <sub>1</sub>	7,7	-0,0341	-0,0352	-0,0011	] (+) ] (+)
		C <sub>2</sub>	33,4	-0,0276	-0,0281	-0,0005	
		C <sub>3</sub>	32,3	-0,0301	-0,0284	0,0017	
		C <sub>4</sub>	25,6	-0,0304	-0,0303	0,0001	
16.	$  \begin{array}{c}  C \quad C \\    \quad   \\  C_1 - C_2 - C_3 - C_4 \\    \\  C  \end{array}  $	C <sub>1</sub>	27,0	-0,0306	-0,0299	0,0007	] (+)
		C <sub>2</sub>	32,7	-0,0305	-0,0283	0,0022	
		C <sub>3</sub>	37,9	-0,0276	-0,0269	0,0007	
		C <sub>4</sub>	17,7	-0,0320	-0,0325	-0,0005	
17.	$  \begin{array}{c}  C_1 - C_2 \\  \quad \quad \quad \diagdown \\  \quad \quad \quad \quad C_3 - C - C \\  \quad \quad \quad \diagup \\  C - C  \end{array}  $	C <sub>1</sub>	10,5	-0,0343	-0,0344	-0,0001	
		C <sub>2</sub>	25,2	-0,0286	-0,0304	-0,0018	
		C <sub>3</sub>	42,4	-0,0264	-0,0256	0,0008	
18.	C <sub>1</sub> -C <sub>2</sub> -C <sub>3</sub> -C <sub>4</sub> -C-C-C-C	C <sub>1</sub>	13,6	-0,0349	-0,0336	0,0013	] (-)
		C <sub>2</sub>	22,7	-0,0308	-0,0311	-0,0003	
		C <sub>3</sub>	32,1	-0,0283	-0,0285	-0,0002	
		C <sub>4</sub>	29,4	-0,0278	-0,0292	-0,0014	
19.	$  \begin{array}{c}  C \\    \\  C_1 - C_2 - C_3 - C_4 - C_5 - C_6 - C_7  \end{array}  $	C <sub>1</sub>	22,4	-0,0326	-0,0311	0,0015	] (-)
		C <sub>2</sub>	28,1	-0,0300	-0,0296	0,0004	
		C <sub>3</sub>	39,3	-0,0264	-0,0265	-0,0001	
		C <sub>4</sub>	27,2	-0,0275	-0,0298	-0,0023	
		C <sub>5</sub>	32,4	-0,0283	-0,0284	-0,0001	
		C <sub>6</sub>	22,8	-0,0308	-0,0310	-0,0002	
		C <sub>7</sub>	13,8	-0,0349	-0,0335	0,0014	
20.	$  \begin{array}{c}  C_8 \\    \\  C_1 - C_2 - C_3 - C_4 - C_5 - C_6 - C_7  \end{array}  $	C <sub>1</sub>	11,3	-0,0344	-0,0342	0,0002	
		C <sub>2</sub>	29,7	-0,0290	-0,0291	-0,0001	
		C <sub>3</sub>	34,7	-0,0279	-0,0277	0,0002	
		C <sub>4</sub>	36,5	-0,0260	-0,0272	-0,0012	
		C <sub>5</sub>	29,7	-0,0279	-0,0291	-0,0012	
		C <sub>6</sub>	23,3	-0,0308	-0,0309	-0,0001	
		C <sub>7</sub>	14,1	-0,0349	-0,0334	0,0015	
		C <sub>8</sub>	19,3	-0,0321	-0,0320	0,0001	
21.	$  \begin{array}{c}  C_5 \\    \\  C_1 - C_2 - C_3 - C_4 - C - C - C  \end{array}  $	C <sub>1</sub>	14,1	-0,0348	-0,0334	0,0014	
		C <sub>2</sub>	20,2	-0,0304	-0,0318	-0,0014	
		C <sub>3</sub>	39,5	-0,0265	-0,0264	0,0001	
		C <sub>4</sub>	32,3	-0,0275	-0,0284	-0,0009	
		C <sub>5</sub>	19,3	-0,0320	-0,0320	-0,0000	



[Fortsetzung der Tab. III. (4)]

	Verbindung	C <sub>x</sub>	<sup>13</sup> C	ber q <sub>Cx</sub>	reg <sup>r</sup> q <sub>Cx</sub>	$\Delta$ (q <sub>Cx</sub> <sup>reg<sup>r</sup></sup> - q <sub>Cx</sub> <sup>ber</sup> )	
22.	$  \begin{array}{ccccccc}  & & \text{C} & & \text{C}_7 & & \\  & &   & &   & & \\  \text{C}_1 - & \text{C}_2 - & \text{C}_3 - & \text{C}_4 - & \text{C}_5 - & \text{C}_6 & \\  & & & & & &   \end{array}  $	$\left. \begin{array}{l} \text{C}_1 \\ \text{C}_2 \\ \text{C}_3 \\ \text{C}_4 \\ \text{C}_5 \\ \text{C}_6 \\ \text{C}_7 \end{array} \right\}$	$\left. \begin{array}{l} 17,8 \\ 20,0 \\ 32,8 \\ 38,5 \\ 36,7 \\ 20,7 \\ 14,0 \\ 15,1 \end{array} \right\}$	$\left. \begin{array}{l} -0,0322 \\ -0,0322 \\ -0,0284 \\ -0,0263 \\ -0,0262 \\ -0,0304 \\ -0,0348 \\ -0,0316 \end{array} \right\}$	$\left. \begin{array}{l} -0,0324 \\ -0,0318 \\ -0,0283 \\ -0,0267 \\ -0,0272 \\ -0,0316 \\ -0,0335 \\ -0,0332 \end{array} \right\}$	$\left. \begin{array}{l} -0,0002 \\ 0,0004 \\ 0,0001 \\ -0,0004 \\ -0,0010 \\ -0,0012 \\ 0,0013 \\ -0,0016 \end{array} \right\}$	(-)
23.	$  \begin{array}{ccccccc}  & & \text{C} & & \text{C}_7 & & \\  & &   & &   & & \\  \text{C}_1 - & \text{C}_2 - & \text{C}_3 - & \text{C}_4 - & \text{C}_5 - & \text{C}_6 & \\  & & & & & &   \end{array}  $	$\left. \begin{array}{l} \text{C}_1 \\ \text{C}_2 \\ \text{C}_3 \\ \text{C}_4 \\ \text{C}_5 \\ \text{C}_6 \\ \text{C}_7 \end{array} \right\}$	$\left. \begin{array}{l} 22,2 \\ 23,2 \\ 25,4 \\ 46,6 \\ 32,1 \\ 29,9 \\ 11,0 \\ 19,0 \end{array} \right\}$	$\left. \begin{array}{l} -0,0325 \\ -0,0325 \\ -0,0297 \\ -0,0246 \\ -0,0276 \\ -0,0289 \\ -0,0344 \\ -0,0320 \end{array} \right\}$	$\left. \begin{array}{l} -0,0312 \\ -0,0309 \\ -0,0303 \\ -0,0244 \\ -0,0285 \\ -0,0291 \\ -0,0343 \\ -0,0321 \end{array} \right\}$	$\left. \begin{array}{l} 0,0013 \\ 0,0016 \\ -0,0006 \\ 0,0002 \\ -0,0009 \\ -0,0002 \\ 0,0001 \\ -0,0001 \end{array} \right\}$	
24.	$  \begin{array}{ccccccc}  & & \text{C} & & & & \text{C} \\  & &   & & & &   \\  \text{C}_1 - & \text{C}_2 - & \text{C}_3 - & \text{C} - & \text{C} - & \text{C} & \\  & & & & & &   \end{array}  $	$\left. \begin{array}{l} \text{C}_1 \\ \text{C}_2 \\ \text{C}_3 \end{array} \right\}$	$\left. \begin{array}{l} 22,4 \\ 28,4 \\ 36,9 \end{array} \right\}$	$\left. \begin{array}{l} -0,0326 \\ -0,0299 \\ -0,0261 \end{array} \right\}$	$\left. \begin{array}{l} -0,0311 \\ -0,0295 \\ -0,0271 \end{array} \right\}$	$\left. \begin{array}{l} 0,0015 \\ 0,0004 \\ -0,0010 \end{array} \right\}$	
25.	$  \begin{array}{ccccccc}  & & & & \text{C}_4 & & \text{C} \\  & & & &   & &   \\  \text{C}_1 - & \text{C}_2 - & \text{C}_3 - & \text{C} - & \text{C} - & \text{C} & \\  & & & & & &   \end{array}  $	$\left. \begin{array}{l} \text{C}_1 \\ \text{C}_2 \\ \text{C}_3 \\ \text{C}_4 \end{array} \right\}$	$\left. \begin{array}{l} 11,8 \\ 25,8 \\ 27,6 \\ 38,5 \\ 39,5 \\ 13,8 \\ 15,8 \end{array} \right\}$	$\left. \begin{array}{l} -0,0343 \\ -0,0286 \\ -0,0286 \\ -0,0264 \\ -0,0264 \\ -0,0317 \\ -0,0317 \end{array} \right\}$	$\left. \begin{array}{l} -0,0341 \\ -0,0302 \\ -0,0297 \\ -0,0267 \\ -0,0264 \\ -0,0335 \\ -0,0330 \end{array} \right\}$	$\left. \begin{array}{l} 0,0002 \\ -0,0016 \\ -0,0011 \\ -0,0003 \\ -0,0000 \\ -0,0018 \\ -0,0013 \end{array} \right\}$	
26.	$  \begin{array}{ccccccc}  & & \text{C} & & & & \\  & &   & & & & \\  \text{C}_1 - & \text{C}_2 - & \text{C}_3 - & \text{C}_4 - & \text{C}_5 - & \text{C}_6 & \\  & &   & & & & \\  & & \text{C} & & & &   \end{array}  $	$\left. \begin{array}{l} \text{C}_1 \\ \text{C}_2 \\ \text{C}_3 \\ \text{C}_4 \\ \text{C}_5 \\ \text{C}_6 \end{array} \right\}$	$\left. \begin{array}{l} 29,2 \\ 30,1 \\ 44,1 \\ 27,0 \\ 23,7 \\ 13,9 \end{array} \right\}$	$\left. \begin{array}{l} -0,0308 \\ -0,0314 \\ -0,0250 \\ -0,0277 \\ -0,0307 \\ -0,0349 \end{array} \right\}$	$\left. \begin{array}{l} -0,0293 \\ -0,0290 \\ -0,0251 \\ -0,0299 \\ -0,0308 \\ -0,0335 \end{array} \right\}$	$\left. \begin{array}{l} 0,0015 \\ 0,0024 \\ -0,0001 \\ -0,0022 \\ -0,0001 \\ 0,0014 \end{array} \right\}$	(-)
27.	$  \begin{array}{ccccccc}  & & & & \text{C}_7 & & \\  & & & &   & & \\  \text{C}_1 - & \text{C}_2 - & \text{C}_3 - & \text{C}_4 - & \text{C}_5 - & \text{C}_6 & \\  & & & &   & & \\  & & & & \text{C} & &   \end{array}  $	$\left. \begin{array}{l} \text{C}_1 \\ \text{C}_2 \\ \text{C}_3 \\ \text{C}_4 \\ \text{C}_5 \\ \text{C}_6 \\ \text{C}_7 \end{array} \right\}$	$\left. \begin{array}{l} 8,1 \\ 34,3 \\ 32,8 \\ 44,3 \\ 17,3 \\ 14,8 \\ 26,5 \end{array} \right\}$	$\left. \begin{array}{l} -0,0340 \\ -0,0275 \\ -0,0297 \\ -0,0251 \\ -0,0301 \\ -0,0347 \\ -0,0303 \end{array} \right\}$	$\left. \begin{array}{l} -0,0351 \\ -0,0279 \\ -0,0283 \\ -0,0251 \\ -0,0326 \\ -0,0333 \\ -0,0300 \end{array} \right\}$	$\left. \begin{array}{l} -0,0011 \\ -0,0004 \\ 0,0014 \\ 0,0000 \\ -0,0025 \\ 0,0014 \\ 0,0003 \end{array} \right\}$	(+)

[Fortsetzung der Tab. III. (5)]

	Verbindung	C <sub>x</sub>	<sup>13</sup> C	$\overset{\text{ber}}{q_{\text{Cx}}}$	$\overset{\text{regr}}{q_{\text{Cx}}}$	$\overset{\Delta}{(q_{\text{Cx}}^{\text{regr}} - q_{\text{Cx}}^{\text{ber}})}$	
28.	$\begin{array}{c} \text{C} \quad \text{C}_4 \quad \text{C} \\   \quad   \quad   \\ \text{C}_1 - \text{C}_2 - \text{C}_3 - \text{C} - \text{C} \end{array}$	$\left\{ \begin{array}{l} \text{C}_1 \\ \text{C}_2 \\ \text{C}_3 \\ \text{C}_4 \end{array} \right.$	21,4	-0,0321	-0,0314	0,0007	
			18,1	-0,0321	-0,0323	-0,0002	
			29,8	-0,0282	-0,0291	-0,0009	
			45,3	-0,0252	-0,0248	0,0004	
			10,4	-0,0313	-0,0345	-0,0032	
29.	$\begin{array}{c} \text{C} \quad \text{C}_6 \\   \quad   \\ \text{C}_1 - \text{C}_2 - \text{C}_3 - \text{C}_4 - \text{C}_5 \\   \\ \text{C} \end{array}$		27,1	-0,0305	-0,0298	0,0007	] (+)
			33,0	-0,0301	-0,0282	0,0019	
			45,4	-0,0255	-0,0248	0,0007	
			24,4	-0,0284	-0,0306	-0,0022	
			13,0	-0,0343	-0,0338	0,0005	
			13,3	-0,0314	-0,0337	-0,0023	
30.	$\begin{array}{c} \text{C} \quad \text{C}_6 \\   \quad   \\ \text{C}_1 - \text{C}_2 - \text{C}_3 - \text{C}_4 - \text{C}_5 \\   \\ \text{C} \end{array}$		17,1	-0,0319	-0,0326	-0,0007	] (+)
			35,1	-0,0273	-0,0276	-0,0003	
			34,9	-0,0287	-0,0277	0,0010	
			32,6	-0,0273	-0,0283	-0,0010	
			7,9	-0,0340	-0,0352	-0,0012	
			23,3	-0,0301	-0,0309	-0,0008	
31.	$\begin{array}{c} \text{C} \quad \text{C} \\   \quad   \\ \text{C}_1 - \text{C}_2 - \text{C}_3 - \text{C}_4 - \text{C}_5 \\   \\ \text{C} \end{array}$		29,9	-0,0307	-0,0291	0,0016	] (-)
			30,9	-0,0312	-0,0288	0,0024	
			53,3	-0,0236	-0,0226	0,0010	
			25,3	-0,0295	-0,0303	-0,0008	
			24,7	-0,0325	-0,0305	0,0020	
32.	$\begin{array}{c} \text{C} \quad \text{C} \\ / \quad \backslash \\ \text{C}_1 - \text{C}_2 - \text{C} - \text{C} \\ \backslash \quad / \\ \text{C} \quad \text{C} \end{array}$		25,6	-0,0302	-0,0303	-0,0001	] (+)
			35,0	-0,0294	-0,0277	0,0017	
33.	$\begin{array}{c} \text{C} - \text{C} \\   \quad / \\ \text{C}_1 - \text{C}_2 - \text{C}_3 - \text{C}_4 - \text{C}_5 - \text{C}_6 \end{array}$		10,6	-0,0343	-0,0344	-0,0001	] (+)
			25,6	-0,0285	-0,0303	-0,0018	
			40,6	-0,0259	-0,0261	-0,0002	
			35,4	-0,0261	-0,0275	-0,0014	
			20,0	-0,0304	-0,0318	-0,0014	
			14,1	-0,0348	-0,0334	0,0014	
34.	$\begin{array}{c} \text{C} \quad \text{C} - \text{C} \\   \quad / \\ \text{C}_1 - \text{C}_2 - \text{C}_3 - \text{C}_4 - \text{C}_5 \end{array}$		19,0	-0,0321	-0,0321	0,0000	
			29,1	-0,0281	-0,0293	-0,0012	
			47,6	-0,0247	-0,0242	0,0005	
			22,6	-0,0282	-0,0311	-0,0029	
			11,8	-0,0342	-0,0341	0,0001	

[Fortsetzung der Tab. III. (6)]

	Verbindung	C <sub>x</sub>	<sup>13</sup> C	q <sub>C<sub>x</sub></sub> <sup>ber</sup>	q <sub>C<sub>x</sub></sub> <sup>reg</sup>	$\Delta$ (q <sub>C<sub>x</sub></sub> <sup>reg</sup> - q <sub>C<sub>x</sub></sub> <sup>ber</sup> )	
35.	$  \begin{array}{c}  \text{C}-\text{C} \quad \text{C}_4 \\  \quad \quad \quad \diagdown \\  \text{C}_1-\text{C}_2-\text{C}_3-\text{C}-\text{C}  \end{array}  $	C <sub>1</sub>	7,5	-0,0340	-0,0353	-0,0013	] (-) ] (+)
		C <sub>2</sub>	30,6	-0,0272	-0,0289	-0,0017	
		C <sub>3</sub>	34,8	-0,0283	-0,0277	0,0006	
		C <sub>4</sub>	23,2	-0,0299	-0,0309	-0,0010	
36.	C <sub>1</sub> -C <sub>2</sub> -C <sub>3</sub> -C <sub>4</sub> -C <sub>5</sub> -C-C-C-C	C <sub>1</sub>	13,8	-0,0349	-0,0335	0,0014	] (-)
		C <sub>2</sub>	22,7	-0,0308	-0,0311	-0,0003	
		C <sub>3</sub>	32,0	-0,0283	-0,0285	-0,0002	
		C <sub>4</sub>	29,4	-0,0277	-0,0292	-0,0015	
		C <sub>5</sub>	29,6	-0,0276	-0,0292	-0,0016	
37.	$  \begin{array}{c}  \text{C} \\    \\  \text{C}_1-\text{C}_2-\text{C}_3-\text{C}_4-\text{C}_5-\text{C}_6-\text{C}_7-\text{C}_8  \end{array}  $	C <sub>1</sub>	22,3	-0,0326	-0,0312	0,0014	] (-) ] (-)
		C <sub>2</sub>	28,0	-0,0300	-0,0296	0,0004	
		C <sub>3</sub>	39,2	-0,0264	-0,0265	-0,0001	
		C <sub>4</sub>	27,4	-0,0273	-0,0298	-0,0025	
		C <sub>5</sub>	29,7	-0,0277	-0,0291	-0,0014	
		C <sub>6</sub>	32,0	-0,0283	-0,0285	-0,0002	
		C <sub>7</sub>	22,7	-0,0308	-0,0311	-0,0003	
		C <sub>8</sub>	13,6	-0,0349	-0,0336	0,0013	
38.	$  \begin{array}{c}  \text{C}_9 \\    \\  \text{C}_1-\text{C}_2-\text{C}_3-\text{C}_4-\text{C}_5-\text{C}_6-\text{C}_7-\text{C}_8  \end{array}  $	C <sub>1</sub>	11,1	-0,0344	-0,0343	0,0001	] (-)
		C <sub>2</sub>	29,7	-0,0290	-0,0291	-0,0001	
		C <sub>3</sub>	34,6	-0,0279	-0,0278	0,0001	
		C <sub>4</sub>	36,7	-0,0259	-0,0272	-0,0013	
		C <sub>5</sub>	26,9	-0,0274	-0,0299	-0,0025	
		C <sub>6</sub>	32,4	-0,0282	-0,0284	-0,0002	
		C <sub>7</sub>	22,7	-0,0308	-0,0311	-0,0003	
		C <sub>8</sub>	13,8	-0,0349	-0,0335	0,0014	
		C <sub>9</sub>	19,0	-0,0320	-0,0321	-0,0001	
39.	$  \begin{array}{c}  \text{C}_9 \\    \\  \text{C}_1-\text{C}_2-\text{C}_3-\text{C}_4-\text{C}_5-\text{C}_6-\text{C}_7-\text{C}_8  \end{array}  $	C <sub>1</sub>	14,0	-0,0348	-0,0335	0,0013	
		C <sub>2</sub>	19,4	-0,0304	-0,0320	-0,0016	
		C <sub>3</sub>	39,6	-0,0264	-0,0264	0,0000	
		C <sub>4</sub>	32,6	-0,0274	-0,0283	-0,0009	
		C <sub>5</sub>	36,8	-0,0259	-0,0272	-0,0013	
		C <sub>6</sub>	29,3	-0,0279	-0,0292	-0,0013	
		C <sub>7</sub>	23,0	-0,0307	-0,0310	-0,0003	
		C <sub>8</sub>	13,7	-0,0349	-0,0336	0,0013	
		C <sub>9</sub>	20,2	-0,0319	-0,0318	0,0001	

[Fortsetzung der Tab. III. (7)]

	Verbindung	C <sub>x</sub>	<sup>13</sup> C	ber q <sub>Cx</sub>	reg <sup>r</sup> q <sub>Cx</sub>	$\Delta$ (q <sub>Cx</sub> <sup>reg<sup>r</sup></sup> - q <sub>Cx</sub> <sup>ber</sup> )	
40.	$\begin{array}{cccccccc} & \text{C} & & \text{C}_8 & & & & \\ &   & &   & & & & \\ \text{C}_1 & - \text{C}_2 & - & \text{C}_3 & - & \text{C}_4 & - & \text{C}_5 & - & \text{C}_6 & - & \text{C}_7 \end{array}$	C <sub>1</sub>	20,1	-0,0322	-0,0318	0,0004	] (-)
			17,9	-0,0322	-0,0324	-0,0002	
		C <sub>2</sub>	32,2	-0,0284	-0,0284	-0,0000	
		C <sub>3</sub>	38,8	-0,0262	-0,0266	-0,0004	
		C <sub>4</sub>	34,0	-0,0257	-0,0279	-0,0022	
		C <sub>5</sub>	30,0	-0,0278	-0,0290	-0,0012	
		C <sub>6</sub>	23,1	-0,0307	-0,0310	-0,0003	
		C <sub>7</sub>	13,8	-0,0349	-0,0335	0,0014	
		C <sub>8</sub>	15,2	-0,0316	-0,0331	-0,0015	
41.	$\begin{array}{cccccccc} & \text{C} & & & & \text{C}_8 & & & \\ &   & & & &   & & & \\ \text{C}_1 & - \text{C}_2 & - & \text{C}_3 & - & \text{C}_4 & - & \text{C}_5 & - & \text{C}_6 & - & \text{C}_7 \end{array}$	C <sub>1</sub>	22,1	-0,0325	-0,0312	0,0013	] (-)
			23,1	-0,0325	-0,0310	0,0015	
		C <sub>2</sub>	25,3	-0,0296	-0,0303	-0,0007	
		C <sub>3</sub>	47,0	-0,0245	-0,0243	0,0002	
		C <sub>4</sub>	30,2	-0,0272	-0,0290	-0,0018	
		C <sub>5</sub>	39,9	-0,0264	-0,0263	0,0001	
		C <sub>6</sub>	19,9	-0,0304	-0,0318	-0,0014	
		C <sub>7</sub>	14,0	-0,0348	-0,0335	0,0013	
		C <sub>8</sub>	19,4	-0,0319	-0,0320	-0,0001	
42.	$\begin{array}{cccccccc} & \text{C} & & & & \text{C}_8 & & & \\ &   & & & &   & & & \\ \text{C}_1 & - \text{C}_2 & - & \text{C}_3 & - & \text{C}_4 & - & \text{C}_5 & - & \text{C}_6 & - & \text{C}_7 \end{array}$	C <sub>1</sub>	22,3	-0,0326	-0,0312	0,0014	] (-)
			22,5	-0,0326	-0,0311	0,0015	
		C <sub>2</sub>	28,4	-0,0299	-0,0295	0,0004	
		C <sub>3</sub>	36,5	-0,0260	-0,0272	-0,0012	
		C <sub>4</sub>	34,4	-0,0256	-0,0278	-0,0022	
		C <sub>5</sub>	34,8	-0,0278	-0,0277	0,0001	
		C <sub>6</sub>	29,5	-0,0289	-0,0292	-0,0003	
		C <sub>7</sub>	11,0	-0,0344	-0,0343	0,0001	
		C <sub>8</sub>	19,0	-0,0320	-0,0321	-0,0001	
43.	$\begin{array}{ccccccc} & \text{C} & & & & \text{C} & \\ &   & & & &   & \\ \text{C}_1 & - \text{C}_2 & - & \text{C}_3 & - & \text{C}_4 & - & \text{C} & - & \text{C} \end{array}$	C <sub>1</sub>	22,4	-0,0326	-0,0311	0,0015	] (-)
		C <sub>2</sub>	28,1	-0,0300	-0,0296	0,0004	
		C <sub>3</sub>	39,5	-0,0263	-0,0264	-0,0001	
		C <sub>4</sub>	25,2	-0,0270	-0,0304	-0,0034	
44.	$\begin{array}{ccccccc} & & & \text{C}_8 & & \text{C}_9 & \\ & & &   & &   & \\ \text{C}_1 & - & \text{C}_2 & - & \text{C}_3 & - & \text{C}_4 & - & \text{C}_5 & - & \text{C}_6 & - & \text{C}_7 \end{array}$	C <sub>1</sub>	11,9	-0,0343	-0,0341	0,0002	] (-)
		C <sub>2</sub>	25,8	-0,0286	-0,0302	-0,0016	
			27,6	-0,0286	-0,0297	-0,0011	
		C <sub>3</sub>	38,9	-0,0263	-0,0266	-0,0003	
			39,8	-0,0263	-0,0263	-0,0000	
			36,3	-0,0259	-0,0273	-0,0014	
		C <sub>4</sub>	37,2	-0,0259	-0,0270	-0,0011	

[Fortsetzung der Tab. III. (8)]

	Verbindung	C <sub>x</sub>	<sup>13</sup> C	ber q <sub>Cx</sub>	reg <sup>r</sup> q <sub>Cx</sub>	$\Delta$ (q <sub>Cx</sub> <sup>reg<sup>r</sup></sup> - q <sub>Cx</sub> <sup>ber</sup> )
44.	$  \begin{array}{cccccccc}  & & C_8 & C_9 & & & & \\  & &   &   & & & & \\  C_1 & - & C_2 & - & C_3 & - & C_4 & - & C_5 & - & C_6 & - & C_7  \end{array}  $	C <sub>5</sub>	35,5	-0,0261	-0,0275	-0,0014
			37,5	-0,0261	-0,0270	-0,0009
		C <sub>6</sub>	20,8	-0,0304	-0,0316	-0,0012
			14,2	-0,0348	-0,0334	0,0014
		C <sub>7</sub>	13,9	-0,0316	-0,0335	-0,0019
			15,8	-0,0316	-0,0330	-0,0014
		C <sub>8</sub>	16,3	-0,0315	-0,0328	-0,0013
			14,2	-0,0315	-0,0334	-0,0019
		45.	$  \begin{array}{ccccccc}  & & C_5 & & C & & \\  & &   & &   & & \\  C_1 & - & C_2 & - & C_3 & - & C_4 & - & C & - & C & - & C  \end{array}  $	C <sub>1</sub>	10,9	-0,0344
11,1	-0,0344				-0,0343	0,0001
C <sub>2</sub>	29,5			-0,0289	-0,0292	-0,0003
	30,5			-0,0289	-0,0289	-0,0000
C <sub>3</sub>	31,9			-0,0275	-0,0285	-0,0010
	32,0			-0,0275	-0,0285	-0,0010
C <sub>4</sub>	44,3			-0,0242	-0,0251	-0,0009
	44,5			-0,0242	-0,0250	-0,0008
C <sub>5</sub>	18,9			-0,0320	-0,0321	-0,0001
	19,6			-0,0320	-0,0319	0,0001
46.	$  \begin{array}{ccccccc}  & & C & & & & \\  & &   & & & & \\  C_1 & - & C_2 & - & C_3 & - & C_4 & - & C_5 & - & C_6 & - & C_7 \\  & &   & & & & & & & & & & \\  & & C & & & & & & & & & &   \end{array}  $	C <sub>1</sub>	29,2	-0,0308	-0,0293	0,0015
		C <sub>2</sub>	30,2	-0,0314	-0,0290	0,0024
		C <sub>3</sub>	44,4	-0,0248	-0,0251	-0,0003
		C <sub>4</sub>	24,4	-0,0271	-0,0306	-0,0035
		C <sub>5</sub>	33,0	-0,0282	-0,0282	-0,0000
		C <sub>6</sub>	22,8	-0,0308	-0,0310	-0,0002
		C <sub>7</sub>	13,8	-0,0349	-0,0335	0,0014
47.	$  \begin{array}{ccccccc}  & & C_8 & & & & \\  & &   & & & & \\  C_1 & - & C_2 & - & C_3 & - & C_4 & - & C_5 & - & C_6 & - & C_7 \\  & &   & & & & & & & & & & \\  & & C & & & & & & & & & &   \end{array}  $	C <sub>1</sub>	8,0	-0,0340	-0,0351	-0,0011
		C <sub>2</sub>	34,2	-0,0275	-0,0279	-0,0004
		C <sub>3</sub>	32,5	-0,0296	-0,0283	0,0013
		C <sub>4</sub>	41,3	-0,0245	-0,0259	-0,0014
		C <sub>5</sub>	26,4	-0,0276	-0,0300	-0,0024
		C <sub>6</sub>	23,7	-0,0307	-0,0308	-0,0001
		C <sub>7</sub>	13,7	-0,0349	-0,0336	0,0013
		C <sub>8</sub>	26,4	-0,0303	-0,0300	0,0003
48.	$  \begin{array}{ccccccc}  & & C_5 & & & & \\  & &   & & & & \\  C_1 & - & C_2 & - & C_3 & - & C_4 & - & C & - & C & - & C \\  & & & & & &   & & & & & & \\  & & & & & & C & & & & & &   \end{array}  $	C <sub>1</sub>	14,9	-0,0347	-0,0332	0,0015
		C <sub>2</sub>	17,3	-0,0301	-0,0326	-0,0025
		C <sub>3</sub>	44,8	-0,0250	-0,0249	0,0001
		C <sub>4</sub>	32,8	-0,0292	-0,0283	0,0009
		C <sub>5</sub>	27,0	-0,0302	-0,0299	0,0003

(-)

(-)

(+)

(+)

(+)

## [Fortsetzung der Tab. III. (9)]

	Verbindung	C <sub>x</sub>	<sup>13</sup> C	q <sub>Cx</sub> <sup>ber</sup>	q <sub>Cx</sub> <sup>regr</sup>	$\Delta$ (q <sub>Cx</sub> <sup>regr</sup> - q <sub>Cx</sub> <sup>ber</sup> )	
49.	$  \begin{array}{ccccccc}  & \text{C} & & \text{C}_7 & & \text{C} & \\  &   & &   & &   & \\  \text{C}_1 - & \text{C}_2 - & \text{C}_3 - & \text{C}_4 - & \text{C}_5 - & \text{C}_6 & \\  & & & & & &   \end{array}  $	C <sub>1</sub>	17,8	-0,0322	-0,0324	-0,0002	] (-)
			20,0	-0,0322	-0,0318	0,0004	
		C <sub>2</sub>	32,4	-0,0284	-0,0284	0,0000	
		C <sub>3</sub>	36,2	-0,0260	-0,0273	-0,0013	
		C <sub>4</sub>	43,9	-0,0243	-0,0252	-0,0009	
		C <sub>5</sub>	25,7	-0,0296	-0,0302	-0,0006	
		C <sub>6</sub>	21,9	-0,0325	-0,0313	0,0012	
		C <sub>7</sub>	15,3	-0,0316	-0,0331	-0,0015	
50.	$  \begin{array}{ccccccc}  & \text{C} & & & & \text{C}_7 & \\  &   & & & &   & \\  \text{C}_1 - & \text{C}_2 - & \text{C}_3 - & \text{C}_4 - & \text{C}_5 - & \text{C}_6 & \\  &   & & & & & \\  & \text{C} & & & & &   \end{array}  $	C <sub>1</sub>	29,9	-0,0307	-0,0291	0,0016	] (-)
		C <sub>2</sub>	31,0	-0,0311	-0,0288	0,0023	
		C <sub>3</sub>	51,0	-0,0231	-0,0232	-0,0001	
		C <sub>4</sub>	31,9	-0,0273	-0,0285	-0,0012	
		C <sub>5</sub>	31,0	-0,0288	-0,0288	0,0000	
		C <sub>6</sub>	11,2	-0,0344	-0,0343	0,0001	
		C <sub>7</sub>	21,9	-0,0319	-0,0313	0,0006	
		51.	$  \begin{array}{ccccccc}  & \text{C} & & & & \text{C} & \\  &   & & & &   & \\  \text{C}_1 - & \text{C}_2 - & \text{C}_3 - & \text{C}_4 - & \text{C}_5 - & \text{C}_6 & \\  &   & & & & & \\  & \text{C} & & & & &   \end{array}  $	C <sub>1</sub>	29,3	-0,0308	
C <sub>2</sub>	30,1			-0,0313	-0,0290	0,0023	
C <sub>3</sub>	42,0			-0,0245	-0,0257	-0,0012	
C <sub>4</sub>	33,9			-0,0257	-0,0280	-0,0023	
C <sub>5</sub>	28,9			-0,0299	-0,0293	0,0006	
C <sub>6</sub>	22,5			-0,0326	-0,0311	0,0015	
52.	$  \begin{array}{ccccccc}  & \text{C} & & \text{C}_7 & & & \\  &   & &   & & & \\  \text{C}_1 - & \text{C}_2 - & \text{C}_3 - & \text{C}_4 - & \text{C}_5 - & \text{C}_6 & \\  & & &   & & & \\  & & & \text{C} & & &   \end{array}  $			C <sub>1</sub>	17,1	-0,0319	-0,0326
		C <sub>2</sub>	35,0	-0,0272	-0,0277	-0,0005	
		C <sub>3</sub>	35,5	-0,0283	-0,0275	0,0008	
		C <sub>4</sub>	43,1	-0,0248	-0,0254	-0,0006	
		C <sub>5</sub>	17,0	-0,0301	-0,0326	-0,0025	
		C <sub>6</sub>	14,8	-0,0347	-0,0333	0,0014	
		C <sub>7</sub>	23,8	-0,0299	-0,0308	-0,0009	
53.	$  \begin{array}{ccccccc}  & \text{C} & & \text{C}_6 & & \text{C} & \\  &   & &   & &   & \\  \text{C}_1 - & \text{C}_2 - & \text{C}_3 - & \text{C}_4 - & \text{C}_5 & & \\  &   & & & & & \\  & \text{C} & & & & &   \end{array}  $	C <sub>1</sub>	28,2	-0,0304	-0,0295	0,0009	] (+)
		C <sub>2</sub>	34,0	-0,0298	-0,0279	0,0019	
		C <sub>3</sub>	47,9	-0,0239	-0,0241	-0,0002	
		C <sub>4</sub>	27,4	-0,0280	-0,0298	-0,0018	
		C <sub>5</sub>	17,3	-0,0321	-0,0326	-0,0005	
			24,5	-0,0321	-0,0306	0,0015	
		C <sub>6</sub>	11,6	-0,0310	-0,0341	-0,0031	

[Fortsetzung der Tab. III. (10)]

	Verbindung	C <sub>x</sub>	<sup>13</sup> C	q <sub>Cx</sub> <sup>ber</sup>	q <sub>Cx</sub> <sup>regr</sup>	$\Delta$ (q <sub>Cx</sub> <sup>regr</sup> - q <sub>Cx</sub> <sup>ber</sup> )	
54.	$  \begin{array}{ccccccc}  & & \text{C} & & \text{C}_4 & & \text{C} \\  & &   & &   & &   \\  \text{C}_1 & - & \text{C}_2 & - & \text{C}_3 & - & \text{C} - \text{C} \\  & & & &   & & \\  & & & & \text{C} & &   \end{array}  $	C <sub>1</sub>	17,2	-0,0318	-0,0326	-0,0008	] (+)
		C <sub>2</sub>	37,1	-0,0270	-0,0271	-0,0001	
		C <sub>3</sub>	33,6	-0,0273	-0,0280	-0,0007	
		C <sub>4</sub>	18,9	-0,0297	-0,0321	-0,0024	
55.	$  \begin{array}{ccccccc}  & & \text{C} & & \text{C}_6 & & \\  & &   & &   & & \\  \text{C}_1 & - & \text{C}_2 & - & \text{C}_3 & - & \text{C}_4 - \text{C}_5 \\  & &   & &   & & \\  & & \text{C} & & \text{C} & &   \end{array}  $	C <sub>1</sub>	25,6	-0,0302	-0,0303	-0,0001	] (+)
		C <sub>2</sub>	36,0	-0,0290	-0,0274	0,0016	
		C <sub>3</sub>	37,3	-0,0276	-0,0270	0,0006	] (-)
		C <sub>4</sub>	28,8	-0,0270	-0,0294	-0,0024	
		C <sub>5</sub>	9,0	-0,0339	-0,0349	-0,0010	] (+)
		C <sub>6</sub>	20,6	-0,0298	-0,0316	-0,0018	
56.	$  \begin{array}{ccccccc}  & & \text{C} - \text{C} & & & & \\  & & / & & & & \\  \text{C}_1 & - & \text{C}_2 & - & \text{C}_3 & - & \text{C}_4 - \text{C}_5 - \text{C}_6 - \text{C}_7  \end{array}  $	C <sub>1</sub>	10,6	-0,0343	-0,0344	-0,0001	] (-)
		C <sub>2</sub>	25,6	-0,0285	-0,0303	-0,0018	
		C <sub>3</sub>	40,7	-0,0258	-0,0261	-0,0003	
		C <sub>4</sub>	32,7	-0,0255	-0,0283	-0,0028	
		C <sub>5</sub>	29,2	-0,0278	-0,0293	-0,0015	
		C <sub>6</sub>	23,1	-0,0307	-0,0310	-0,0003	
		C <sub>7</sub>	13,7	-0,0349	-0,0336	0,0013	
57.	$  \begin{array}{ccccccc}  & & \text{C} & & \text{C}_4 - \text{C}_5 & & \\  & &   & &   & & \\  \text{C}_1 & - & \text{C}_2 & - & \text{C}_3 & - & \text{C} - \text{C} \\  & & & &   & & \\  & & & & \text{C} & &   \end{array}  $	C <sub>1</sub> {	19,0	-0,0320	-0,0321	-0,0001	] (+)
			20,0	-0,0320	-0,0318	0,0002	
		C <sub>2</sub>	29,0	-0,0278	-0,0293	-0,0015	
		C <sub>3</sub>	56,8	-0,0231	-0,0216	0,0015	
		C <sub>4</sub>	21,1	-0,0279	-0,0315	-0,0036	
		C <sub>5</sub>	14,5	-0,0342	-0,0333	0,0009	
58.	$  \begin{array}{ccccccc}  & & \text{C} - \text{C} & & & & \\  & & / & & & & \\  \text{C}_1 & - & \text{C}_2 & - & \text{C}_3 & - & \text{C} - \text{C} \\  & &   & & / & & \\  & & \text{C} - \text{C} & & & &   \end{array}  $	C <sub>1</sub>	7,1	-0,0339	-0,0354	-0,0015	] (+)
		C <sub>2</sub>	27,1	-0,0267	-0,0298	-0,0031	
		C <sub>3</sub>	37,1	-0,0265	-0,0271	-0,0006	
59.	$  \begin{array}{ccccccc}  & & \text{C} & & & & \text{C} \\  & &   & & & &   \\  \text{C}_1 & - & \text{C}_2 & - & \text{C}_3 & - & \text{C} - \text{C} \\  & &   & & & &   \\  & & \text{C} & & & & \text{C}  \end{array}  $	C <sub>1</sub>	31,8	-0,0307	-0,0285	0,0022	] (-)
		C <sub>2</sub>	32,4	-0,0309	-0,0284	0,0025	
		C <sub>3</sub>	56,5	-0,0221	-0,0217	0,0004	

### Diskussion der Ergebnisse

Die prozentuelle Streuung der berechneten Ladungen um der regressierten Gerade enthält Tabelle IV. Aus den Werten der Tabelle ist ersichtlich,

Tabelle IV

Die Streuung der berechneten qc-Ladungen um der regressierten Geraden

$\Delta$	$\epsilon_{CC} = 1,00$		$\epsilon_{CC} = 0,75$	
	Wertzahl	%	Wertzahl	%
0 - $\pm 0,0005$	135	39,3	132	38,4
$\pm 0,0006$ - $\pm 0,0010$	49	14,2	49	14,2
$\pm 0,0011$ - $\pm 0,0015$	99	28,8	99	28,8
$\pm 0,0016$ - $\pm 0,0020$	22	6,4	28	8,1
$\pm 0,0021$ - $\pm 0,0025$	19	5,5	24	7,0
$\pm 0,0026$ - $\pm 0,0030$	12	3,5	5	1,5
$\pm 0,0031$ -	8	2,3	7	2,0

daß die berechneten und regressierten Werte einander gut entsprechen, eine wesentlichere Abweichung (über  $\Delta = \pm 0,0030$  qc-Wert) ist nur in einigen Fällen ( $\sim 2\%$ ) beobachtbar. Die Abweichungen sind bei den Rechnungen mit dem  $\epsilon_{CC} = 0,75$  Parametersystem kleiner.

In den Tabellen II und III wurde in der letzten Kolumne mit (+) und (-) Zeichen die Tendenz der Ladungsänderung angezeigt. Bei den (+) Zeichen ist die Änderungstendenz der berechneten Ladungswerte und der experimentellen NMR-Signale einander entsprechend, bei den (-) Zeichen ist sie entgegengesetzt. Aus den 344 Ladungswerten ist die Tendenz bei den Rechnungen mit dem  $\epsilon_{CC} = 1,00$  Parametersystem in 39 Fällen, bei den Rechnungen mit dem  $\epsilon_{CC} = 0,75$  Parametersystem in 28 Fällen entgegengesetzt. Bei den Rechnungen mit dem  $\epsilon_{CC} = 0,75$  Parametersystem war die Tendenz bei den meisten symmetrischen Molekülen (6, 15, 32, 33, 58 Verbindungen) der Tendenz der Versuchswerte entsprechend.

Auch bei den Ergebnissen des  $\epsilon_{CC} = 0,75$  Parametersystems ist die Tendenz entgegengesetzt in vielen solchen Fällen, wo das Kohlenstoffatom sich in der Mitte der Kette befindet (9, 18, 19, 22, 36, 37, 38, 39, 40, 42, 46, 56 Verbindungen) diese Erscheinung ist mit dem Einfluß des Abschirmungseffektes der fernen Atome bzw. Atomgruppen erklärbar. Bei den Ladungsberechnungen mit der Methode von Del Re wird nur der Einfluß der benachbarten Atome berücksichtigt, mit dem Einfluß der anderen fernerer Gruppen wird nicht gerechnet.

Mit ähnlichen Abschirmungseffekten kann die entgegengesetzte Tendenz zwischen den Kohlenstoffladungen der Methylgruppen und den quater-



nären Kohlenstoffatomen in den 7, 14, 26, 31, 46, 50, 51, 59 Verbindungen erklärt werden. Jede dieser Moleküle ist eine asymmetrische Verbindung. Die Tendenz der Ladungen zwischen den sich symmetrisch befindlichen quaternären Kohlenstoffatomen und den Kohlenstoffatomen der Methylgruppen ist der experimentellen Tendenz der Versuchswerte (3, 15, 16, 27, 29, 30, 32, 35, 48, 54, 55, 58 Verbindungen) entsprechend.

### Zusammenfassung

Es wurde die Ladungsverteilung von 59 Alkanmolekülen mit der quantenchemischen Methode von Del Re berechnet. Es wurde festgesetzt, daß die berechneten Ergebnisse mit dem  $\epsilon_{CC} = 0,75$  Parametersystem wesentlich besser sind als die Ergebnisse mit dem  $\epsilon_{CC} = 1,00$  Parametersystem. Der Abschirmungseffekt der fernen Atome bzw. Atomgruppen auf die NMR  $^{13}\text{C}$ -Signale kann mit den Rechnungen bestätigt werden. Die Änderungstendenz der Ladungen mit der Del Re Methode berechnet, die den Einfluß der fernerer Gruppen nicht berücksichtigt, ist der Tendenz der Versuchs-NMR Signale entgegengesetzt.

### Literatur

1. VÁNDORFFY, M. T.—NAGY, J.: Periodica Polytechn. Chem. Eng. **18**, 263 (1974)
2. VÁNDORFFY, M. T.: Periodica Polytechn. Chem. Eng.
3. LINDEMAN, L. P.—ADAMS, J. O.: Anal. Chem. **43**, 1245 (1971)

dr. M. T. VÁNDORFFY }  
Doz. dr. J. NAGY } H-1521 Budapest