

Table 1.4 Substituent Constants for QSAR Analysis

No.	Substituent	Pi	MR	L	B1	B5	S-P	S-M
1	+N(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	-5.96	1.94	4.02	2.57	3.11	0.82	0.88
2	EtN(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> +	-5.44	2.87	5.58	1.52	4.53	0.13	0.16
3	CH <sub>2</sub> N(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> +	-4.57	2.40	4.83	1.52	4.08	0.44	0.40
4	CO <sub>2</sub> -	-4.36	0.61	3.53	1.60	2.66	0.00	-0.10
5	+NH <sub>3</sub>	-4.19	0.55	2.78	1.49	1.97	0.60	0.86
6	PR-N(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> +	-4.15	3.33	6.88	1.52	5.49	-0.01	0.06
7	CH <sub>2</sub> NH <sub>3</sub> +	-4.09	1.01	4.02	1.52	3.05	0.29	0.32
8	IO <sub>2</sub>	-3.46	6.35	4.25	2.15	3.66	0.78	0.68
9	C(CN) <sub>3</sub>	-2.33	1.86	3.99	2.87	4.12	0.96	0.97
10	NHNO,	-2.27	1.07	4.50	1.35	3.66	0.57	0.91
11	C(NO <sub>2</sub> ) <sub>3</sub>	-2.01	2.27	4.59	2.55	3.72	0.82	0.72
12	SO <sub>2</sub> (NH <sub>2</sub> )	-1.82	1.23	4.02	2.04	3.05	0.60	0.53
13	C(CN)=C(CN) <sub>2</sub>	-1.77	2.58	6.46	1.61	5.17	0.98	0.77
14	CH <sub>2</sub> C=O(NH <sub>2</sub> )	-1.68	1.44	4.58	1.52	4.37	0.07	0.06
15	N(COCH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	-1.68	2.48	4.45	1.35	4.33	0.33	0.35
16	SO <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	-1.63	1.35	4.11	2.03	3.17	0.72	0.60
17	P(O)(OH) <sub>2</sub>	-1.59	1.26	4.22	2.12	2.88	0.42	0.36
18	S=O(CH <sub>3</sub> )	-1.58	1.37	4.11	1.40	3.17	0.49	0.52
19	N(SO <sub>2</sub> CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	-1.51	3.12	4.83	1.36	3.72	0.49	0.47
20	C=O(NH <sub>2</sub> )	-1.49	0.98	4.06	1.50	3.07	0.36	0.28
21	CH(CN) <sub>2</sub>	-1.45	1.43	3.99	1.85	4.12	0.52	0.53
22	CH <sub>2</sub> NHCOCH <sub>3</sub>	-1.43	1.96	5.67	1.52	4.75	-0.05	0.05
23	NHC=S(NH <sub>2</sub> )	-1.40	2.22	5.06	1.35	4.18	0.16	0.22
24	NH(OH)	-1.34	0.72	3.87	1.35	2.63	-0.34	-0.04
25	CH=NNHCONHNH <sub>2</sub>	-1.32	2.42	7.57	1.60	4.55	0.16	0.22
26	NHC=O(NH <sub>2</sub> )	-1.30	1.37	5.06	1.35	3.61	-0.24	-0.03
27	C=O(NHCH <sub>3</sub> )	-1.27	1.46	5.00	1.54	3.16	0.36	0.35
28	2-Aziridinyl	-1.23	1.19	4.14	1.55	3.24	-0.10	-0.06
29	NH <sub>2</sub>	-1.23	0.54	2.78	1.35	1.97	-0.66	-0.16
30	NHSO <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	-1.18	1.82	4.70	1.35	4.13	0.03	0.20
31	P(O)(OCH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	-1.18	2.19	5.04	2.42	3.25	0.53	0.42
32	C(CH <sub>3</sub> )(CN) <sub>2</sub>	-1.14	1.90	4.11	2.81	4.12	0.57	0.60
33	N(CH <sub>3</sub> )SO <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	-1.11	2.34	4.83	1.35	3.72	0.24	0.21
34	SO <sub>2</sub> Et	-1.10	1.81	4.92	2.03	3.49	0.77	0.66
35	CH <sub>2</sub> NH <sub>2</sub>	-1.04	0.91	4.02	1.52	3.05	-0.11	-0.03
36	1-Tetrazolyl	-1.04	1.83	5.28	1.71	3.12	0.50	0.52
37	CH <sub>2</sub> OH	-1.03	0.72	3.97	1.52	2.70	0.00	0.00
38	N(CH <sub>3</sub> )COCH <sub>3</sub>	-1.02	1.96	4.77	1.35	3.71	0.26	0.31
39	NHCHO	-0.98	1.03	4.22	1.35	3.61	0.00	0.19
40	NHC(=O)CH <sub>3</sub>	-0.97	1.49	5.09	1.35	3.61	0.00	0.21
41	C(CH <sub>3</sub> )(NO <sub>2</sub> ) <sub>2</sub>	-0.88	2.17	4.59	2.55	3.72	0.61	0.54
42	NHNH,	-0.88	0.84	3.47	1.35	2.97	-0.55	-0.02
43	OSO <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	-0.88	1.70	4.66	1.35	4.10	0.36	0.39
44	SO <sub>2</sub> N(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	-0.78	2.19	4.83	2.03	4.08	0.65	0.51
45	NHC=S(NHC <sub>2</sub> H <sub>5</sub> )	-0.71	3.17	7.22	1.45	4.38	0.07	0.30
46	SO <sub>2</sub> (CHF <sub>2</sub> )	-0.68	1.31	4.11	2.03	3.70	0.86	0.75
47	OH	-0.67	0.29	2.74	1.35	1.93	-0.37	0.12
48	CHO	-0.65	0.69	3.53	1.60	2.36	0.42	0.35
49	CH <sub>2</sub> CHOHCH <sub>3</sub>	-0.64	1.64	4.92	1.52	3.78	-0.17	-0.12
50	CS(NH <sub>2</sub> )	-0.64	1.81	4.10	1.64	3.18	0.30	0.25
51	OC=O(CH <sub>3</sub> )	-0.64	1.25	4.74	1.35	3.67	0.31	0.39
52	SOCHF,	-0.63	1.33	4.70	1.40	3.70	0.58	0.54
53	4-Pyrimidinyl	-0.61	2.18	5.29	1.71	3.11	0.63	0.30
54	2-Pyrimidinyl	-0.61	2.18	6.28	1.71	3.11	0.53	0.23