

Table 1.4 (Continued)

No.	Substituent	Pi	MR	L	B1	B5	S-P	S-M
55	P(CF <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	-0.59	1.99	4.96	1.40	3.86	0.69	0.60
56	CH <sub>2</sub> CN	-0.57	1.01	3.99	1.52	4.12	0.18	0.16
57	CN	-0.57	0.63	4.23	1.60	1.60	0.66	0.56
58	COCH <sub>3</sub>	-0.55	1.12	4.06	1.60	3.13	0.50	0.38
59	CH <sub>2</sub> P=O(OEt) <sub>2</sub>	-0.54	3.58	7.10	1.52	5.73	0.06	0.12
60	P=O(OEt) <sub>2</sub>	-0.52	3.12	6.26	2.52	5.58	0.60	0.55
61	NHCOOMe	-0.52	1.57	5.84	1.45	3.99	-0.17	-0.02
62	NHC=O(NHC <sub>2</sub> H <sub>5</sub> )	-0.50	2.32	7.29	1.45	3.98	-0.26	0.04
63	NHC=O(CH <sub>2</sub> Cl)	-0.50	1.98	6.26	1.55	4.26	-0.03	0.17
64	NHCH <sub>3</sub>	-0.47	1.03	3.53	1.35	3.08	-0.70	-0.21
65	N(CH <sub>3</sub> )COCF <sub>3</sub>	-0.46	1.95	5.20	1.56	3.96	0.39	0.41
66	C=S(NHCH <sub>3</sub> )	-0.46	2.23	5.00	1.88	3.18	0.34	0.30
67	NHC=S(CH <sub>3</sub> )	-0.42	2.34	5.09	1.45	4.38	0.12	0.24
68	C(Et)(NO <sub>2</sub> ) <sub>2</sub>	-0.35	3.66	4.92	2.55	3.72	0.64	0.56
69	CO <sub>2</sub> H	-0.32	0.69	3.91	1.60	2.66	0.45	0.37
70	C(OH)(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	-0.32	1.64	4.11	2.40	3.17	0.60	0.47
71	EtCO <sub>2</sub> H	-0.29	1.65	5.97	1.52	3.31	-0.07	-0.03
72	NO <sub>2</sub>	-0.28	0.74	3.44	1.70	2.44	0.78	0.71
73	CH=NNHCSNH <sub>2</sub>	-0.27	2.96	7.16	1.60	5.41	0.40	0.45
74	NHCN	-0.26	1.01	3.90	1.35	4.05	0.06	0.21
75	CH <sub>2</sub> C(OH)(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	-0.24	2.11	4.92	1.52	4.19	-0.17	-0.16
76	CH=CHCHO	-0.23	1.69	5.76	1.60	3.46	0.13	0.24
77	NHCH <sub>2</sub> CO <sub>2</sub> Et	-0.21	2.69	7.91	1.35	5.77	-0.68	-0.10
78	CH <sub>2</sub> OCH <sub>3</sub>	-0.21	1.21	4.78	1.52	3.40	0.01	0.08
79	NHC=OCH(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	-0.18	2.43	5.53	1.35	4.09	-0.10	0.11
80	CH <sub>2</sub> OC=O(CH <sub>3</sub> )	-0.17	1.65	5.46	1.52	4.46	0.05	0.04
81	CH <sub>2</sub> N(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	-0.15	1.87	4.83	1.52	4.08	0.01	0.00
82	CH <sub>2</sub> SCN	-0.14	1.81	6.63	1.52	3.41	0.14	0.12
83	1-AziridinyI	-0.12	1.35	4.14	1.35	3.24	-0.22	-0.07
84	NO	-0.12	0.52	3.44	1.70	2.44	0.91	0.62
85	ONO <sub>2</sub>	-0.12	0.85	4.46	1.35	3.62	0.70	0.55
86	S=O(C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> )	-0.07	3.34	4.62	1.40	6.02	0.44	0.50
87	CH <sub>2</sub> SO <sub>2</sub> C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	-0.06	3.79	8.33	1.52	3.78	0.16	0.15
88	OCH <sub>3</sub>	-0.02	0.79	3.98	1.35	3.07	-0.27	0.12
89	C=O(OCH <sub>3</sub> )	-0.01	1.29	4.73	1.64	3.36	0.45	0.36
90	H	0.00	0.10	2.06	1.00	1.00	0.00	0.00
91	C=O(CF <sub>3</sub> )	0.02	1.12	4.65	1.70	3.67	0.80	0.63
92	CH=C(CN) <sub>2</sub>	0.05	1.97	6.46	1.60	5.17	0.84	0.66
93	SO <sub>2</sub> (F)	0.05	0.87	3.33	2.01	2.70	0.91	0.80
94	COEt	0.06	1.58	4.87	1.63	3.45	0.48	0.38
95	C(CF <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	0.07	2.08	4.11	3.13	3.64	0.55	0.55
96	NH—Et	0.08	1.50	4.83	1.35	3.42	-0.61	-0.24
97	NHC=O(CF <sub>3</sub> )	0.08	1.43	5.62	1.79	3.61	0.12	0.30
98	SC=O(CH <sub>3</sub> )	0.10	1.84	5.11	1.70	4.01	0.44	0.39
99	CF <sub>3</sub>	0.10	0.50	3.30	1.99	2.61	0.54	0.43
100	OCH <sub>2</sub> F	0.10	0.72	4.57	1.35	3.07	0.02	0.20
101	CH=CHNO <sub>2</sub> (TR)	0.11	1.64	4.29	1.60	4.78	0.26	0.32
102	CH <sub>2</sub> F	0.13	0.54	3.30	1.52	2.61	0.11	0.12
103	F	0.14	0.09	2.65	1.35	1.35	0.06	0.34
104	C(OMe) <sub>3</sub>	0.14	2.48	4.78	2.56	4.29	-0.04	-0.03
105	SECF <sub>3</sub>	0.15	1.63	4.50	1.85	4.09	0.45	0.44
106	NHC=O(OEt)	0.17	2.12	7.25	1.35	3.92	-0.15	0.11
107	CH <sub>2</sub> Cl	0.17	1.05	3.89	1.52	3.46	0.12	0.11
108	N(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	0.18	1.56	3.53	1.35	3.08	-0.83	-0.16