

TABLE I. Hammett and Modified Swain-Lupton Constants<sup>a,d</sup>

	substituent	$\sigma_m$	$\sigma_p$	$F^b$	$R^c$	ref(s)
1.	BF <sub>2</sub>	0.32	0.48	0.26	0.22	109
2.	Br	0.39	0.23	0.45	-0.22	183
3.	GeBr <sub>3</sub>	0.66	0.73	0.61	0.12	139
4.	SiBr <sub>3</sub>	0.48	0.57	0.44	0.13	139
5.	Cl	0.37	0.23	0.42	-0.19	183
6.	HgCl	0.33	0.35	0.33	0.02	74
7.	SO <sub>2</sub> Cl	1.20	1.11	1.16	(-0.05)	134
8.	SCl	0.44	0.48	0.42	0.06	74
9.	ICl <sub>2</sub>	1.10	1.11	1.03	0.08	110
10.	P(O)Cl <sub>2</sub>	0.78	0.90	0.70	0.20	74
11.	PCl <sub>2</sub>	0.54	0.61	0.50	0.11	164
12.	P(S)Cl <sub>2</sub>	0.70	0.80	0.63	0.17	74
13.	GeCl <sub>3</sub>	0.71	0.79	0.65	0.14	139
14.	SiCl <sub>3</sub>	0.48	0.56	0.44	0.12	139
15.	F	0.34	0.06	0.45	-0.39	183
16.	HgF	0.34	0.33	0.35	-0.02	74
17.	SOF	0.74	0.83	0.67	0.16	74
18.	SO <sub>2</sub> F	0.80	0.91	0.72	0.19	142
19.	IF <sub>2</sub>	0.85	0.83	0.82	0.01	110
20.	POF <sub>2</sub>	0.81	0.89	0.74	0.15	164
21.	PF <sub>2</sub>	0.49	0.59	0.44	0.15	109
22.	GeF <sub>3</sub>	0.85	0.97	0.76	0.21	139
23.	SF <sub>3</sub>	0.70	0.80	0.63	0.17	110
24.	SiF <sub>3</sub>	0.54	0.69	0.47	0.22	164
25.	IF <sub>4</sub>	1.07	1.15	0.98	0.17	110
26.	PF <sub>4</sub>	0.63	0.80	0.54	0.26	110
27.	SF <sub>5</sub>	0.61	0.68	0.56	0.12	179
28.	I	0.35	0.18	0.42	-0.24	183
29.	IO	0.58	0.62	0.55	0.07	63
30.	IO <sub>2</sub>	0.68	0.78	0.61	0.17	170
31.	NO	0.62	0.91	0.49	0.42	107
32.	NO <sub>2</sub>	0.71	0.78	0.65	0.13	183
33.	ONO <sub>2</sub>	0.55	0.70	0.48	0.22	74
34.	N≡N <sup>+</sup>	1.76	1.91	1.58	0.33	182
35.	N≡N <sup>+</sup> (BF <sub>4</sub> ) <sup>-</sup>	1.65	1.79	1.48	0.31	88
36.	NNO <sub>2</sub> <sup>-</sup>	0.00	-0.43	0.20	-0.63	112
37.	N <sub>3</sub>	0.37	0.08	0.48	-0.40	130
38.	O <sup>-</sup>	-0.47	(-0.81)	-0.26	(-0.55)	181
39.	SO <sub>2</sub> <sup>-</sup>	-0.02	-0.05	0.03	-0.08	135
40.	SO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	0.30	0.35	0.29	0.06	81
41.	S <sup>-</sup>	-0.36	-1.21	0.03	-1.24	74, 97
42.	AsO <sub>3</sub> H <sup>-</sup>	0.00	-0.02	0.04	-0.06	74, 87
43.	H	0.00	0.00	0.03	0.00	-
44.	NHNO <sub>2</sub>	0.91	0.57	0.99	-0.42	112
45.	OH	0.12	-0.37	0.33	-0.70	183
46.	S(O)OH	-0.04	-0.07	0.01	-0.08	74
47.	PO <sub>3</sub> H <sup>-</sup>	0.20	0.26	0.19	0.07	183
48.	OPO <sub>3</sub> H <sup>-</sup>	0.29	0.00	0.41	-0.41	74
49.	SH	0.25	0.15	0.30	-0.15	183
50.	B(OH) <sub>2</sub>	-0.01	0.12	-0.03	0.15	170
51.	NH <sub>2</sub>	-0.16	-0.66	0.08	-0.74	183
52.	NHOH	-0.04	-0.34	0.11	-0.45	87
53.	SO <sub>2</sub> NH <sub>2</sub>	0.53	0.60	0.49	0.11	170
54.	PO(OH) <sub>2</sub>	0.36	0.42	0.34	0.08	74
55.	PH <sub>2</sub>	0.06	0.05	0.09	-0.04	74
56.	B(OH) <sub>3</sub> <sup>-</sup>	-0.48	-0.44	-0.42	-0.02	90
57.	GeH <sub>3</sub>	0.00	0.01	0.03	-0.02	74, 280
58.	NH <sub>3</sub> <sup>+</sup>	0.86	0.60	0.92	-0.32	181
59.	NHNH <sub>2</sub>	-0.02	-0.55	0.22	-0.77	87
60.	SiH <sub>3</sub>	0.05	0.10	0.06	0.04	110
61.	CBr <sub>3</sub>	0.28	0.29	0.28	0.01	165
62.	CClF <sub>2</sub>	0.42	0.46	0.40	0.06	74
63.	5-chloro-1-tetrazolyl	0.60	0.61	0.58	0.03	165
64.	COCl	0.51	0.61	0.46	0.15	164
65.	N=CCl <sub>2</sub>	0.21	0.13	0.26	-0.13	165
66.	CCl <sub>3</sub>	0.40	0.46	0.38	0.09	170
67.	OCCL <sub>3</sub>	0.43	0.35	0.46	-0.11	74
68.	COF	0.55	0.70	0.48	0.22	110
69.	OCF <sub>2</sub> O	0.36	0.36	0.36	0.00	153
70.	CF <sub>3</sub>	0.43	0.54	0.38	0.16	183
71.	HgCF <sub>3</sub>	0.29	0.32	0.29	0.03	74
72.	HgSCF <sub>3</sub>	0.39	0.42	0.38	0.04	74
73.	I=NSO <sub>2</sub> CF <sub>3</sub>	1.30	1.35	1.20	0.15	63
74.	N=NCF <sub>3</sub>	0.56	0.68	0.50	0.18	74
75.	OCF <sub>3</sub>	0.38	0.35	0.39	-0.04	145
76.	SOCF <sub>3</sub>	0.63	0.69	0.58	0.11	163
77.	SeOCF <sub>3</sub>	0.81	0.83	0.76	0.07	74

TABLE I (Continued)

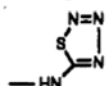
	substituent	$\sigma_m$	$\sigma_p$	$F^b$	$R^c$	ref(s)
78.	SO <sub>2</sub> CF <sub>3</sub>	0.83	0.96	0.74	0.22	70
79.	SeO <sub>2</sub> CF <sub>3</sub>	1.08	1.21	0.97	0.24	74
80.	OSO <sub>2</sub> CF <sub>3</sub>	0.56	0.53	0.56	-0.03	118
81.	SCF <sub>3</sub>	0.40	0.50	0.36	0.14	178
82.	SeCF <sub>3</sub>	0.44	0.45	0.43	0.02	167
83.	HgCN	0.28	0.34	0.27	0.08	74
84.	CN	0.56	0.66	0.51	0.15	183
85.	NC	0.48	0.49	0.47	0.02	74
86.	CN(BBr <sub>3</sub> )	0.61	0.48	0.64	-0.16	164
87.	CN(BCl <sub>3</sub> )	0.95	0.86	(0.93)	(-0.05)	164
88.	CN(BF <sub>3</sub> )	0.72	0.66	(0.71)	(-0.05)	164
89.	N=C=O	0.27	0.19	0.31	-0.12	165
90.	OCN	0.67	0.54	0.69	-0.15	74
91.	SO <sub>2</sub> CN	1.10	1.26	0.97	0.29	74
92.	N=C=S	0.48	0.38	0.51	-0.13	156
93.	SCN	0.51	0.52	0.49	0.03	85, 183
94.	SeCN	0.61	0.66	0.57	0.09	173, 87
95.	N=NCN	0.71	1.03	0.56	0.47	72
96.	N(O)=NCN	0.78	0.89	0.70	0.19	281
97.	C(NO <sub>2</sub> ) <sub>3</sub>	0.72	0.82	0.65	0.17	74, 190
98.	5-azido-1-tetrazolyl	0.54	0.54	0.53	0.01	165
99.	CO <sub>2</sub> <sup>-</sup>	-0.10	0.00	-0.10	0.10	183
100.	CHBr <sub>2</sub>	0.31	0.32	0.31	0.01	74
101.	CHCl <sub>2</sub>	0.31	0.32	0.31	0.01	74
102.	OCHCl <sub>2</sub>	0.38	0.26	0.43	-0.17	74
103.	CHF <sub>2</sub>	0.29	0.32	0.29	0.03	110
104.	OCHF <sub>2</sub>	0.31	0.18	0.37	-0.19	146
105.	SOCHF <sub>2</sub>	0.54	0.58	0.51	0.07	140
106.	SO <sub>2</sub> CHF <sub>2</sub>	0.75	0.86	0.67	0.19	146
107.	SCHF <sub>2</sub>	0.33	0.37	0.32	0.05	170
108.	S(O)(=NH)CF <sub>3</sub>	0.72	0.84	0.64	0.20	62
109.	NHSO <sub>2</sub> CF <sub>3</sub>	0.44	0.39	0.45	-0.06	74
110.	CHI <sub>2</sub>	0.26	0.26	0.27	-0.01	74
111.	NHCN	0.21	0.06	0.28	-0.22	158
112.	1-(1H)-tetrazolyl	0.52	0.50	0.52	-0.02	165
113.	5-(1H)-tetrazolyl	0.64	0.56	0.65	-0.09	166
114.	5-hydroxy-1-tetrazolyl	0.39	0.33	0.41	-0.08	165
115.	5-mercapto-1-tetrazolyl	0.45	0.45	0.44	-0.01	165
116.		0.30	0.19	0.35	-0.16	158
117.	CHO	0.35	0.42	0.33	0.09	87, 174
118.	COOH	0.37	0.45	0.34	0.11	183
119.	CH <sub>2</sub> Br	0.12	0.14	0.14	0.00	170
120.	CH <sub>2</sub> Cl	0.11	0.12	0.13	-0.01	170
121.	OCH <sub>2</sub> Cl	0.25	0.08	0.33	-0.25	74
122.	CH <sub>2</sub> F	0.12	0.11	0.15	-0.04	110
123.	OCH <sub>2</sub> F	0.20	0.02	0.29	-0.27	74
124.	SCH <sub>2</sub> F	0.23	0.20	0.25	-0.05	74
125.	CH <sub>2</sub> I	0.10	0.11	0.12	-0.01	170
126.	NHCHO	0.19	0.00	0.28	-0.28	156
127.	CONH <sub>2</sub>	0.28	0.36	0.26	0.10	87, 187
128.	CSNH <sub>2</sub>	0.25	0.30	0.24	0.06	283
129.	CH=NOH- <i>t</i>	0.22	0.10	0.28	-0.18	129
130.	3,4-N=CHNH-	-0.15	-0.15	-0.10	-0.05	116
131.	N(O)=NCONH <sub>2</sub>	0.59	0.63	0.56	0.07	281
132.	OCH <sub>2</sub> O-	-0.16	-0.16	-0.11	-0.05	188
133.	Me	-0.07	-0.17	0.01	-0.18	183
134.	CH <sub>2</sub> SO <sub>2</sub> R	0.15	0.17	0.16	0.01	170
135.	SiMeCl <sub>2</sub>	0.31	0.39	0.29	0.10	74
136.	SiMeF <sub>2</sub>	0.29	0.23	0.32	-0.09	74
137.	HgMe	0.43	0.10	(0.55)	(-0.45)	164
138.	NHCH <sub>2</sub> SO <sub>3</sub>	-0.10	-0.57	0.12	-0.69	89
139.	NHCONH <sub>2</sub>	-0.03	-0.24	0.09	-0.33	156
140.	N(Me)NO <sub>2</sub>	0.49	0.61	0.43	0.18	112
141.	NHCSNH <sub>2</sub>	0.22	0.16	0.26	-0.10	158
142.	OMe	0.12	-0.27	0.29	-0.56	183
143.	CH <sub>2</sub> OH	0.00	0.00	0.03	-0.03	133
144.	SOMe	0.52	0.49	0.52	-0.03	183
145.	S(OMe)	0.21	0.17	0.24	-0.07	74
146.	OS(=O)CH <sub>3</sub>	0.44	0.45	0.43	0.02	74
147.	S(O)OMe	0.50	0.54	0.47	0.07	74
148.	SO <sub>2</sub> Me	0.60	0.72	0.53	0.19	183
149.	SSO <sub>2</sub> Me	0.43	0.54	0.38	0.16	74

TABLE I (Continued)

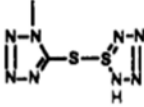
	substituent	$\sigma_m$	$\sigma_p$	$F^b$	$R^c$	ref(s)
150.	OSO <sub>2</sub> Me	0.39	0.36	0.40	-0.04	156
151.	SMe	0.15	0.00	0.23	-0.23	183
152.	SSMe	0.22	0.13	0.27	-0.14	74
153.	SeMe	0.10	0.00	0.16	-0.16	183
154.	NHMe	-0.21	-0.70	0.03	-0.73	164
155.	CH <sub>2</sub> NH <sub>2</sub>	-0.03	-0.11	0.04	-0.15	74
156.	NHSO <sub>2</sub> Me	0.20	0.03	0.28	-0.25	156
157.	CH <sub>2</sub> NH <sub>3</sub> <sup>+</sup>	0.59	0.53	0.59	-0.06	88
158.	N(COF) <sub>2</sub>	0.58	0.57	0.57	0.00	109
159.	HgOCOCF <sub>3</sub>	0.50	0.52	0.48	0.04	74
160.	COCF <sub>3</sub>	0.63	0.80	0.54	0.26	110
161.	SCOCF <sub>3</sub>	0.48	0.46	0.48	-0.02	74
162.	OCOCF <sub>3</sub>	0.56	0.46	0.58	-0.12	74
163.	N(CF <sub>3</sub> )C=O(F)	0.50	0.50	0.49	0.01	109
164.	CF <sub>2</sub> OCF <sub>2</sub> <sup>-</sup>	0.81	0.81	0.77	0.04	153
165.	CF <sub>2</sub> CF <sub>3</sub>	0.47	0.52	0.44	0.08	172
166.	OCF <sub>2</sub> CF <sub>3</sub>	0.48	0.28	0.55	-0.27	74
167.	SO <sub>2</sub> CF <sub>2</sub> CF <sub>3</sub>	0.92	1.08	0.81	0.27	76
168.	SCF <sub>2</sub> CF <sub>3</sub>	0.44	0.48	0.42	0.06	76
169.	N(CF <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	0.40	0.53	(0.35)	0.18	145
170.	S(CF <sub>3</sub> )=NSO <sub>2</sub> CF <sub>3</sub>	1.18	1.28	1.07	0.21	62
171.	SO(CF <sub>3</sub> )=NSO <sub>2</sub> CF <sub>3</sub>	1.23	1.40	1.09	0.31	62
172.	N(SO <sub>2</sub> CF <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	0.61	0.83	0.50	0.33	103
173.	P(CF <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	0.60	0.69	0.55	0.14	109
174.	P(CN) <sub>2</sub>	0.82	0.90	0.75	0.15	74
175.	C≡CH	0.21	0.23	0.22	0.01	171
176.	OCF <sub>2</sub> CHFCI	0.35	0.28	0.38	-0.10	146
177.	NHCOCF <sub>3</sub>	0.30	0.12	0.38	-0.26	156
178.	CH=NSO <sub>2</sub> CF <sub>3</sub>	0.76	1.00	0.63	0.37	63
179.	OCF <sub>2</sub> CHF <sub>2</sub>	0.34	0.25	0.38	-0.13	178
180.	SCF <sub>2</sub> CHF <sub>2</sub>	0.38	0.47	0.35	0.12	178
181.		0.63	0.64	0.60	0.04	165
182.	SC≡CH	0.26	0.19	0.30	-0.11	74
183.	SCH=CHCl	0.31	0.24	0.34	-0.10	105
184.	SeCH=CHCl	0.28	0.26	0.30	-0.04	105
185.	CH <sub>2</sub> CF <sub>3</sub>	0.12	0.09	0.15	-0.06	109
186.	CH <sub>2</sub> SOCF <sub>3</sub>	0.25	0.24	0.27	-0.03	162
187.	CH <sub>2</sub> SO <sub>2</sub> CF <sub>3</sub>	0.29	0.31	0.29	0.02	162
188.	CH <sub>2</sub> SCF <sub>3</sub>	0.12	0.15	0.13	0.02	162
189.	CH <sub>2</sub> CN	0.16	0.18	0.17	0.01	170
190.	CH=CHNO <sub>2</sub> - <i>t</i>	0.32	0.26	0.35	(-0.09)	184
191.	CH <sub>2</sub> CO <sub>2</sub> <sup>-</sup>	0.07	-0.16	0.19	-0.35	88
192.	CH <sub>2</sub> SCN	0.12	0.14	0.14	0.00	74
193.	CH=CH <sub>2</sub>	0.06	-0.04	0.13	-0.17	85
194.	NHCOCH <sub>2</sub> Cl	0.17	-0.03	0.27	-0.30	156
195.	N(Me)SO <sub>2</sub> CF <sub>3</sub>	0.46	0.44	0.46	-0.02	74
196.	HgOCOCH <sub>3</sub>	0.39	0.40	0.39	0.01	74
197.	C(Me)(NO <sub>2</sub> ) <sub>2</sub>	0.54	0.61	0.50	0.11	74
198.	oxiranyl	0.05	0.03	0.09	-0.06	74
199.	OCH=CH <sub>2</sub>	0.21	-0.09	0.34	-0.43	96
200.	COMe	0.38	0.50	0.33	0.17	183
201.	SCOMe	0.39	0.44	0.37	0.07	183
202.	OCOMe	0.39	0.31	0.42	-0.11	183
203.	COOMe	0.37	0.45	0.34	0.11	175
204.	2-thiacyclopropyl	0.04	0.01	0.08	-0.07	74
205.	SCH=CH <sub>2</sub>	0.26	0.20	0.29	-0.09	99, 105
206.	SeCH=CH <sub>2</sub>	0.26	0.21	0.29	-0.08	105
207.	1-aziridinyl	-0.07	-0.22	0.03	-0.25	74
208.	2-aziridinyl	-0.06	-0.10	-0.01	-0.09	74
209.	<i>N</i> -methyl-3-oxaziridinyl	0.09	0.12	0.10	0.02	74
210.	NHCOOMe	-0.02	-0.17	0.07	-0.24	68
211.	NHCOMe	0.21	0.00	0.31	-0.31	183
212.	CONHMe	0.35	0.36	0.35	-0.01	154
213.	CH=NOMe	0.37	0.30	0.40	0.10	93
214.	CH <sub>2</sub> CONH <sub>2</sub>	0.06	0.07	0.08	-0.01	74
215.	NHCSMe	0.24	0.12	0.30	-0.18	154
216.	CSNHMe	0.30	0.34	0.29	0.05	154
217.	CH=NNHCSNH <sub>2</sub>	0.45	0.40	0.46	-0.06	93
218.	OCH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> O <sup>-</sup>	-0.12	-0.12	-0.08	-0.04	74
219.	Et	-0.07	-0.15	0.00	-0.15	183
220.	CH=NNHCONHNH <sub>2</sub>	0.22	0.16	0.26	-0.10	93
221.	OCH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	0.10	-0.24	0.26	-0.50	183

TABLE I (Continued)

	substituent	$\sigma_m$	$\sigma_p$	$F^b$	$R^c$	ref(s)
222.	CH(OH)Me	0.08	-0.07	0.16	-0.23	74
223.	CH <sub>2</sub> OMe	0.08	0.01	0.13	-0.12	85
224.	SO <sub>2</sub> Et	0.66	0.77	0.59	0.18	74
225.	SEt	0.18	0.03	0.26	-0.23	174, 183
226.	P(Cl)NMe <sub>2</sub>	0.38	0.56	0.31	0.25	164
227.	CH <sub>2</sub> SC(NH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> <sup>+</sup>	0.13	0.15	0.14	0.01	128
228.	SiClMe <sub>2</sub>	0.16	0.21	0.16	0.05	74
229.	SiFMe <sub>2</sub>	0.12	0.17	0.12	0.04	74
230.	NHEt	-0.24	-0.61	-0.04	-0.57	87, 187
231.	N(Me) <sub>2</sub>	-0.16	-0.83	0.15	-0.98	185, 183
232.	N(Me)SO <sub>2</sub> Me	0.21	0.24	0.21	0.03	81, 74
233.	SO <sub>2</sub> NMe <sub>2</sub>	0.51	0.65	0.44	0.21	74
234.	N(SO <sub>2</sub> Me) <sub>2</sub>	0.47	0.49	0.45	0.04	74
235.	SN(Me) <sub>2</sub>	0.12	0.09	0.15	-0.06	74
236.	N=NNMe <sub>2</sub>	-0.05	-0.03	-0.02	-0.01	72
237.	N(Me)N <sup>+</sup> =(Me)N <sup>-</sup>	1.17	1.17	1.10	0.07	116
238.	P(O)Me <sub>2</sub>	0.43	0.50	0.40	0.10	74
239.	PO(OMe) <sub>2</sub>	0.42	0.53	0.37	0.16	152
240.	PMe <sub>2</sub>	0.03	0.06	0.05	0.01	69
241.	S <sup>+</sup> Me <sub>2</sub>	1.00	0.90	0.98	-0.08	183
242.	S <sup>+</sup> (Me) <sub>2</sub> tosyl	1.06	0.96	1.04	-0.08	88
243.	CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> NH <sub>3</sub> <sup>+</sup>	0.23	0.17	0.27	-0.10	74
244.	SiH(Me) <sub>2</sub>	0.01	0.04	0.03	0.01	74
245.	1-(1,7(BH) <sub>10</sub> -C <sub>2</sub> H)	0.25	0.33	0.23	0.10	147
246.	2-(1,7(BH) <sub>10</sub> -C <sub>2</sub> H)	0.14	0.15	0.16	-0.01	117
247.	4-(1,7(BH) <sub>10</sub> -C <sub>2</sub> H)	-0.02	0.02	0.00	0.02	80
248.	1-(1,2(BH) <sub>10</sub> -C <sub>2</sub> H)	0.49	0.43	0.50	-0.07	147
249.	3-(1,2(BH) <sub>10</sub> -C <sub>2</sub> H)	0.20	0.19	0.22	-0.03	147
250.	C≡CCF <sub>3</sub>	0.41	0.51	0.37	0.14	163
251.	CF=CFCF <sub>3</sub> -t	0.39	0.46	0.36	0.10	109
252.	N=C(CF <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	0.29	0.23	0.32	-0.09	109
253.	CF <sub>2</sub> CF <sub>2</sub> CF <sub>3</sub>	0.44	0.48	0.42	0.06	85
254.	CF(CF <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	0.37	0.53	(0.31)	0.22	172
255.	SO <sub>2</sub> CF <sub>2</sub> CF <sub>2</sub> CF <sub>3</sub>	0.92	1.09	0.81	0.28	76
256.	SO <sub>2</sub> CF(CF <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	0.92	1.10	0.80	0.30	76
257.	SCF <sub>2</sub> CF <sub>2</sub> CF <sub>3</sub>	0.45	0.48	0.43	0.05	76
258.	SCF(CF <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	0.48	0.51	0.46	0.03	76
259.	TeCF <sub>2</sub> CF <sub>2</sub> CF <sub>3</sub>	0.46	0.48	0.45	0.03	76
260.	C(OH)(CF <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	0.29	0.30	0.29	0.01	172
261.	CH(SCF <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	0.44	0.44	0.43	0.01	74
262.	CH(CN) <sub>2</sub>	0.53	0.52	0.52	0.00	74
263.	CH=CHCF <sub>3</sub> -c	0.16	0.17	0.18	0.01	165
264.	CH=CHCF <sub>3</sub> -t	0.24	0.27	0.24	0.03	165
265.	CH=CHSO <sub>2</sub> CF <sub>3</sub>	0.31	0.55	0.22	0.33	74
266.	CH=CHCN	0.24	0.17	0.28	-0.11	155
267.	C=Me	0.21	0.03	0.29	-0.26	85
268.	N(Me)COCF <sub>3</sub>	0.41	0.39	0.41	-0.02	74
269.	CH=CHCHO	0.24	0.13	0.29	-0.16	155
270.	cyclopropyl	-0.07	-0.21	0.02	-0.23	177
271.	C(Me)=CH <sub>2</sub>	0.09	0.05	0.13	-0.08	85
272.	CH=CHMe-t	0.02	-0.09	0.09	-0.18	85
273.	CH <sub>2</sub> CH=CH <sub>2</sub>	-0.11	-0.14	-0.06	-0.08	74
274.	C(Et)(NO <sub>2</sub> ) <sub>2</sub>	0.56	0.64	0.51	0.13	74
275.	OCH <sub>2</sub> CH=CH <sub>2</sub>	0.09	-0.25	0.25	-0.50	105
276.	COEt	0.38	0.48	0.34	0.14	74
277.	COOEt	0.37	0.45	0.34	0.11	183
278.	CH <sub>2</sub> OCOMe	0.04	0.05	0.07	-0.02	74
279.	CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> COOH	-0.03	-0.07	0.02	-0.09	188
280.	SCH <sub>2</sub> CH=CH <sub>2</sub>	0.19	0.12	0.23	-0.11	105
281.	SeCH <sub>2</sub> CH=CH <sub>2</sub>	0.21	0.12	0.26	-0.14	105
282.	CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> -	-0.26	-0.26	-0.20	-0.06	87
283.	N(Me)COMe	0.31	0.26	0.34	-0.08	74
284.	CH <sub>2</sub> NHCOMe	0.05	-0.05	0.12	-0.17	85
285.	NHCOEt	0.11	-0.15	0.23	-0.38	157, 156
286.	C(NO <sub>2</sub> )Me <sub>2</sub>	0.18	0.20	0.19	0.01	74, 190
287.	OCH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> O-	0.00	0.00	0.03	-0.03	74
288.	isopropyl	-0.04	-0.15	0.04	-0.19	85, 183
289.	CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	-0.06	-0.13	0.01	-0.14	85, 87
290.	N <sup>+</sup> (Me)=CHN(Me)-	1.11	1.11	1.05	0.06	116
291.	NHCONHEt	0.04	-0.26	0.19	-0.45	154
292.	NHCSNHEt	0.30	0.07	0.40	-0.33	154
293.	OCHMe <sub>2</sub>	0.10	(-0.45)	0.34	(-0.79)	183
294.	OCH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	0.10	-0.25	0.26	-0.51	183
295.	CH <sub>2</sub> CH(OH)Me	-0.12	-0.17	-0.06	-0.11	74, 102
296.	C(OOH)Me <sub>2</sub>	0.06	-0.14	0.17	-0.31	92
297.	SCHMe <sub>2</sub>	0.23	0.07	0.30	-0.23	74
298.	CH <sub>2</sub> NMe <sub>2</sub>	0.00	0.01	0.03	-0.02	74

TABLE I (Continued)

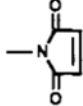
	substituent	$\sigma_m$	$\sigma_p$	$F^b$	$R^c$	ref(s)
299.	GeMe <sub>3</sub>	0.00	0.00	0.03	-0.03	74
300.	N <sup>+</sup> (Me) <sub>3</sub>	0.88	0.82	0.86	-0.04	183
301.	CH <sub>2</sub> NH <sup>+</sup> (Me) <sub>2</sub>	0.40	0.43	0.39	0.04	74
302.	Si(Me) <sub>2</sub> OMe	0.04	-0.02	0.09	-0.11	74
303.	OSiMe <sub>3</sub>	0.13	-0.27	0.31	-0.58	74
304.	SiMe(OMe) <sub>2</sub>	0.04	0.10	0.05	0.05	74
305.	Si(OMe) <sub>3</sub>	0.09	0.13	0.10	0.03	74
306.	P <sup>+</sup> Me <sub>3</sub>	0.74	0.73	0.71	0.02	123, 122
307.	SiMe <sub>3</sub>	-0.04	-0.07	0.01	-0.08	183
308.	SnMe <sub>3</sub>	0.00	0.00	0.03	-0.03	74, 183
309.	1-(1,2-(BH) <sub>10</sub> -C <sub>2</sub> Me)	0.50	0.65	0.43	0.22	111
310.	CH <sub>2</sub> -1-(1,7-(BH) <sub>10</sub> -C <sub>2</sub> H)	0.00	0.01	0.03	-0.02	67
311.	CH <sub>2</sub> -1-(1,2-(BH) <sub>10</sub> -C <sub>2</sub> H)	0.12	0.12	0.14	-0.02	67
312.	1-(1,2-(BH) <sub>10</sub> -C <sub>3</sub> H <sub>3</sub> HgCH <sub>3</sub> )	0.86	0.85	0.82	0.03	111
313.	2-(hydroxymethyl)carboran-1-yl	0.38	0.49	0.34	0.15	111
314.	I(OCOCF <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	1.28	1.34	1.18	0.16	110
315.	cyclo-C <sub>4</sub> F <sub>7</sub>	0.48	0.53	0.45	0.08	109
316.	COCF <sub>2</sub> CF <sub>2</sub> CF <sub>3</sub>	0.63	0.79	0.55	0.24	110
317.	C(CF <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	0.55	0.55	0.53	0.02	76
318.	(CF <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> CF <sub>3</sub>	0.47	0.52	0.44	0.08	172
319.	SO <sub>2</sub> C(CF <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	0.96	1.13	0.84	0.29	76
320.	SC(CF <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	0.51	0.58	0.47	0.11	76
321.	C(SCF <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	0.51	0.53	0.49	0.04	74
322.	SeC(CF <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	0.49	0.54	0.46	0.08	76
323.	C(CN) <sub>3</sub>	0.97	0.96	0.92	0.04	165
324.	cyclo-1-(OH)C <sub>4</sub> F <sub>6</sub>	0.36	0.37	0.36	0.01	109
325.	CH=C(CN) <sub>2</sub>	0.66	0.84	0.57	0.27	93
326.	2-(5-bromofuryl)	0.15	0.00	0.23	-0.23	94, 95
327.		0.33	0.27	0.36	-0.09	108
328.	3-chloro-1-pyrroline-2,5-dione	0.47	0.46	0.47	-0.01	108
329.	3-pyridazinyl	0.28	0.48	0.21	0.27	61
330.	3,4-CH=CHCH=CH-	0.04	0.04	0.07	-0.03	183
331.	C(Me)(CN) <sub>2</sub>	0.60	0.57	0.59	-0.02	74
332.	4-pyrimidinyl	0.30	0.63	0.18	0.45	277
333.	2-pyrimidinyl	0.23	0.53	0.13	0.40	277
334.	5-pyrimidinyl	0.28	0.39	0.25	0.14	277
335.	2-furyl	0.06	0.02	0.10	-0.08	114
336.	2-thienyl	0.09	0.05	0.13	-0.08	159
337.	3-thienyl	0.03	-0.02	0.08	-0.10	159
338.	2-selenienyl	0.06	0.04	0.10	-0.06	84
339.	2-tellurienyl	0.06	0.03	0.10	-0.07	84
340.	1-pyrryl	0.47	0.37	0.50	-0.13	93
341.	1-pyrroline-2,5-dione	0.34	0.31	0.36	-0.05	108
342.	CH=CHCOMe	0.21	-0.01	0.31	-0.32	155
343.	I(OCOMe) <sub>2</sub>	0.85	0.88	0.80	0.08	110
344.	N(COMe) <sub>2</sub>	0.35	0.33	0.36	-0.03	74
345.	cyclobutyl	-0.05	-0.14	0.02	-0.16	85
346.	COCHMe <sub>2</sub>	0.38	0.47	0.35	0.12	74, 119
347.	(CH <sub>2</sub> ) <sub>4</sub>	-0.48	-0.48	-0.40	-0.08	87
348.	NHCOCH(Me) <sub>2</sub>	0.11	-0.10	0.21	-0.31	156
349.	C(Me) <sub>3</sub>	-0.10	-0.20	-0.02	-0.18	183
350.	CH(Me)Et	-0.08	-0.12	-0.02	-0.10	74, 87
351.	CH <sub>2</sub> CH(Me) <sub>2</sub>	-0.07	-0.12	-0.01	-0.11	176, 87
352.	(CH <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> CH <sub>3</sub>	-0.08	-0.16	-0.01	-0.15	174, 87
353.	O(CH <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> CH <sub>3</sub>	0.10	-0.32	0.29	-0.61	183
354.	CH <sub>2</sub> C(OH)Me <sub>2</sub>	-0.16	-0.17	-0.11	-0.06	74, 102
355.	C(OMe) <sub>3</sub>	-0.03	-0.04	0.01	-0.05	74
356.	AsEt <sub>2</sub>	0.22	0.00	0.32	-0.32	77
357.	As(O)Et <sub>2</sub>	0.57	0.44	0.60	-0.16	77
358.	As(S)Et <sub>2</sub>	0.52	0.44	0.54	-0.10	77
359.	NH(CH <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> CH <sub>3</sub>	-0.34	-0.51	-0.21	-0.30	87, 85
360.	N(Et) <sub>2</sub>	-0.23	-0.72	0.01	-0.73	113, 82
361.	PO(Et) <sub>2</sub>	0.37	0.47	0.33	0.14	79
362.	N=NPO(OEt) <sub>2</sub>	(0.16)	0.74	(-0.05)	(0.79)	72
363.	PO(OEt) <sub>2</sub>	0.55	0.60	0.52	0.08	143
364.	P(Et) <sub>2</sub>	0.10	0.13	0.11	0.02	124
365.	P(S)Et <sub>2</sub>	0.39	0.46	0.36	0.10	79
366.	CH <sub>2</sub> N(Me) <sub>3</sub> <sup>+</sup>	0.40	0.44	0.38	0.06	74
367.	CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> NH(Me) <sub>2</sub> <sup>+</sup>	0.24	0.14	0.29	-0.15	74
368.	CH <sub>2</sub> OSi(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	-0.04	-0.05	0.00	-0.05	74
369.	CH <sub>2</sub> Si(Me) <sub>3</sub>	-0.16	-0.21	-0.09	-0.12	183
370.	PO(N(Me) <sub>2</sub> ) <sub>2</sub>	0.30	0.40	0.27	0.13	78

TABLE I (Continued)

	substituent	$\sigma_m$	$\sigma_p$	$F^b$	$R^c$	ref(s)
371.	P(N(Me) <sub>2</sub> ) <sub>2</sub>	0.18	0.25	0.17	0.08	164
372.	2-(methylcarbonyl)carboran-1-yl	0.40	0.63	0.31	0.32	111
373.	2-[(carbonyloxy)methyl]carboran-1-yl	0.70	0.74	0.66	0.08	111
374.	CH <sub>2</sub> -1-(1,2-(BH) <sub>10</sub> -C <sub>2</sub> Me)	0.10	0.11	0.12	-0.01	67
375.	C(CN)=C(CN) <sub>2</sub>	0.77	0.98	0.65	0.33	74, 166
376.	2-(5-cyanofuryl)	0.25	0.10	0.32	-0.22	94, 95
377.	2-(5-formylfuryl)	0.22	-0.05	0.34	-0.39	94, 95
378.	2-pyridyl	0.33	0.17	0.40	-0.23	93
379.	3-pyridyl	0.23	0.25	0.24	0.01	71
380.	4-pyridyl	0.27	0.44	0.21	0.23	71
381.	2-(4,6-dimethyl-s-triazinyl)	0.25	0.39	0.21	0.18	121
382.	1-cyclopentenyl	-0.06	-0.05	-0.03	-0.02	127
383.	CH=CHCOEt	0.19	0.03	0.27	-0.24	155
384.	cyclopentyl	-0.05	-0.14	0.02	-0.16	85
385.	COC(Me) <sub>3</sub>	0.27	0.32	0.26	0.06	74, 119
386.	NHCO <sub>2</sub> (CH <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> CH <sub>3</sub>	0.06	-0.05	0.13	-0.18	126
387.	C(Et)(Me) <sub>2</sub>	-0.06	-0.18	0.03	-0.21	85
388.	CH <sub>2</sub> C(Me) <sub>3</sub>	-0.05	-0.17	0.03	-0.14	85
389.	(CH <sub>2</sub> ) <sub>4</sub> CH <sub>3</sub>	-0.08	-0.15	-0.01	-0.14	174
390.	O(CH <sub>2</sub> ) <sub>4</sub> CH <sub>3</sub>	0.10	(-0.34)	0.29	(-0.63)	183
391.	CH <sub>2</sub> PO(OEt) <sub>2</sub>	0.12	0.06	0.17	-0.11	85
392.	CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> N(Me) <sub>3</sub> <sup>+</sup>	0.16	0.13	0.19	-0.06	74, 189
393.	CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> Si(Me) <sub>3</sub>	-0.16	-0.17	-0.11	-0.06	74, 132
394.	Si(Me) <sub>2</sub> OSi(Me) <sub>3</sub>	0.00	-0.01	0.04	-0.05	160
395.	C <sub>6</sub> Cl <sub>5</sub>	0.25	0.24	0.27	-0.03	151
396.	C <sub>6</sub> F <sub>5</sub>	0.26	0.27	0.27	0.00	151
397.	P(O)(C <sub>3</sub> F <sub>7</sub> ) <sub>2</sub>	0.95	1.10	0.84	0.26	64
398.	OP(O)(C <sub>3</sub> F <sub>7</sub> ) <sub>2</sub>	0.66	0.56	0.67	-0.11	64
399.	NHP(O)(C <sub>3</sub> F <sub>7</sub> ) <sub>2</sub>	0.28	0.18	0.33	-0.15	64
400.	CH <sub>2</sub> Co(CN) <sub>5</sub> <sup>3-</sup>	-0.53	-0.68	-0.39	-0.29	150
401.	CH <sub>2</sub> Mn(CO) <sub>5</sub>	-0.14	-0.44	0.02	-0.46	150
402.	C <sub>6</sub> H <sub>2</sub> -2,4,6-(NO <sub>2</sub> ) <sub>3</sub>	0.26	0.30	0.26	0.04	170
403.	C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> -3-Br	0.09	0.08	0.12	-0.04	161
404.	C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> -4-Br	0.15	0.12	0.18	-0.06	85
405.	C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> -3-Cl	0.15	0.10	0.19	-0.09	85
406.	C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> -4-Cl	0.15	0.12	0.18	-0.06	85
407.	C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> -3-F	0.15	0.10	0.19	-0.09	85
408.	C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> -4-F	0.12	0.06	0.17	-0.11	85
409.	OC <sub>6</sub> H <sub>4</sub> -4-F	-0.08	-0.10	-0.03	-0.07	106
410.	C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> -3-I	0.13	0.06	0.18	-0.12	85
411.	C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> -4-I	0.14	0.10	0.18	-0.08	85
412.	C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> -3-NO <sub>2</sub>	0.21	0.20	0.23	-0.03	85
413.	C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> -4-NO <sub>2</sub>	0.25	0.26	0.26	0.00	85
414.	SC <sub>6</sub> H <sub>4</sub> -4-NO <sub>2</sub>	0.32	0.24	0.36	-0.12	85
415.	SOC <sub>6</sub> H <sub>4</sub> -4-NO <sub>2</sub>	0.58	0.60	0.55	0.05	85
416.	2-benzotriazolyl	0.49	0.51	0.47	0.04	74
417.	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	0.06	-0.01	0.12	-0.13	183
418.	N(O)=NSO <sub>2</sub> C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	0.69	0.79	0.62	0.17	281
419.	N=NC <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	0.32	0.39	0.30	0.09	175
420.	OC <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	0.25	-0.03	0.37	-0.40	183, 87
421.	SOC <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	0.50	0.44	0.51	-0.07	85
422.	2-(5-acetylfuryl)	0.24	0.08	0.31	-0.23	94, 95
423.	2-(6-methylpyronyl)	0.38	0.43	0.36	0.07	115
424.	SO <sub>2</sub> C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	0.62	0.68	0.58	0.10	85
425.	OSO <sub>2</sub> C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	0.36	0.33	0.37	-0.04	156
426.	SC <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	0.23	0.07	0.30	-0.23	85
427.	NHC <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	-0.02	-0.56	0.22	-0.78	173, 85
428.	HNSO <sub>2</sub> C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	0.16	0.01	0.24	-0.23	156
429.	SO <sub>2</sub> NHC <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	0.56	0.65	0.51	0.14	74
430.	2-(5-ethylfuryl)	0.09	-0.13	0.20	-0.33	94, 95
431.	1-(2,5-dimethylpyrryl)	0.49	0.38	0.52	-0.14	93
432.	1-cyclohexenyl	-0.10	-0.08	-0.07	-0.01	127
433.	cyclohexyl	-0.05	-0.15	0.03	-0.18	85
434.	N(C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> ) <sub>2</sub>	-0.26	-0.93	0.06	-0.99	113
435.	(CH <sub>2</sub> ) <sub>4</sub> NMe <sub>2</sub>	-0.08	-0.16	-0.01	-0.15	74
436.	PO(isopropyl) <sub>2</sub>	0.37	0.41	0.36	0.05	79
437.	P(isopropyl) <sub>2</sub>	0.02	0.06	0.04	0.02	69
438.	P(O)(OPr) <sub>2</sub>	0.38	0.50	0.33	0.17	152
439.	Ge(Et) <sub>3</sub>	0.00	0.00	0.03	-0.03	74, 183
440.	(CH <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> N(Me) <sub>3</sub> <sup>+</sup>	0.06	-0.01	0.12	-0.13	74
441.	Si(OEt) <sub>3</sub>	0.02	0.08	0.03	0.05	74
442.	P(Et) <sub>3</sub> <sup>+</sup>	0.99	0.98	0.94	0.04	78
443.	Sn(Et) <sub>3</sub>	0.00	0.00	0.03	-0.03	74, 183
444.	P(=NSO <sub>2</sub> CF <sub>3</sub> )(C <sub>3</sub> F <sub>7</sub> ) <sub>2</sub>	1.24	1.37	1.11	0.26	63
445.	Si(NMe <sub>2</sub> ) <sub>3</sub>	-0.04	-0.04	0.00	-0.04	74
446.	2-benzoxazolyl	0.30	0.33	0.30	0.04	138
447.	2-benzthiazolyl	0.27	0.29	0.27	0.02	138

TABLE I (Continued)

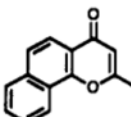
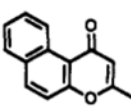
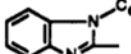
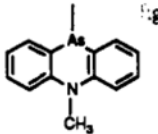
	substituent	$\sigma_m$	$\sigma_p$	$F^b$	$R^c$	ref(s)
448.	COC <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	0.34	0.43	0.31	0.12	180
449.	OCOC <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	0.21	0.13	0.26	-0.13	156
450.	COOC <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	0.37	0.44	0.34	0.10	128
451.	N=CHC <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	-0.08	-0.55	0.14	-0.69	156
452.	CH=NC <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	0.35	0.42	0.33	0.09	136, 137
453.	NHCOC <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	0.02	-0.19	0.13	-0.32	156
454.	CONHC <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	0.23	0.41	0.17	0.24	74, 175
455.	C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> -4-Me	0.06	-0.03	0.12	-0.15	85
456.	CH <sub>2</sub> C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	-0.08	-0.09	-0.04	-0.05	170
457.	N=NC <sub>6</sub> H <sub>3</sub> -5-Me-2-OH	0.27	0.31	0.26	0.05	156
458.	C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> -4-OMe	0.05	-0.08	0.13	-0.21	85
459.	CH(OH)C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	0.00	-0.03	0.05	-0.08	74, 175
460.	CH <sub>2</sub> OC <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	0.06	0.07	0.08	-0.01	128, 282
461.	CH <sub>2</sub> SO <sub>2</sub> C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	0.15	0.16	0.17	-0.01	128, 282
462.	C(Et) <sub>3</sub>	-0.07	-0.20	0.02	-0.22	85
463.	(CH <sub>2</sub> ) <sub>6</sub> CH <sub>3</sub>	-0.07	-0.16	0.00	-0.16	85
464.	SiMe(OSi(Me) <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	-0.02	-0.01	0.01	-0.02	160
465.	CF <sub>2</sub> CF <sub>2</sub> C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> -4-F	0.34	0.39	0.32	0.07	109
466.	C=CC <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	0.14	0.16	0.15	0.01	170
467.	CH=NCOC <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	0.39	0.51	0.34	0.17	74
468.	CH=CHC <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	0.03	-0.07	0.10	-0.17	186
469.	CH <sub>2</sub> Fe(CO) <sub>2</sub> ( $\pi$ -C <sub>5</sub> H <sub>5</sub> )	-0.26	-0.49	-0.11	-0.38	150
470.	CH=NNHCOC <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	0.39	0.51	0.34	0.17	93
471.	N=CHC <sub>6</sub> H <sub>4</sub> -4-OMe	-0.07	-0.54	0.15	-0.69	156
472.	NHCOC <sub>6</sub> H <sub>4</sub> -4-OMe	0.09	-0.06	0.17	-0.23	156
473.	SCH=NSO <sub>2</sub> C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> -4-Me	0.65	0.70	0.61	0.09	74
474.	C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> -4-Et	0.07	-0.02	0.13	-0.15	85
475.	CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	-0.07	-0.12	-0.01	-0.11	74
476.	N=C(Me)NHC <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	0.29	0.08	0.38	-0.30	133
477.	Si(C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> ) <sub>2</sub> (Me) <sub>2</sub>	0.04	0.07	0.06	0.01	74
478.	S(Me)=NSO <sub>2</sub> C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> -4-Me	0.65	0.70	0.61	0.09	205
479.	2,4,6-trimethylpyridinium	0.62	0.58	0.61	-0.03	73
480.	PO(CMe <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	0.31	0.41	0.28	0.13	79
481.	PO(C <sub>4</sub> H <sub>9</sub> ) <sub>2</sub>	0.35	0.49	0.30	0.19	152
482.	PO(OC <sub>4</sub> H <sub>9</sub> ) <sub>2</sub>	0.41	0.57	0.35	0.22	85
483.	P(CMe <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	0.01	0.15	-0.01	0.16	69
484.	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> Cr(CO) <sub>3</sub>	0.29	0.14	0.36	-0.22	104
485.	2-benzo-4-thiopyronyl	0.34	0.35	0.34	0.01	115
486.	2-(benzothiopyronyl)	0.48	0.45	0.48	-0.03	115
487.	2-(benzo-1,4-pyronyl)	0.41	0.40	0.41	-0.01	115
488.	CH=CHCOC <sub>6</sub> H <sub>4</sub> -4-NO <sub>2</sub>	0.15	0.05	0.21	-0.16	155
489.	CH <sub>2</sub> Mo(CO) <sub>3</sub> (C <sub>5</sub> H <sub>5</sub> )	-0.21	-0.45	-0.07	-0.38	150
490.	CH=CHCOC <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	0.18	0.05	0.25	-0.20	155
491.	C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> -4-CHMe <sub>2</sub>	0.08	0.01	0.13	-0.12	85
492.	Si(OSiMe <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	-0.09	-0.01	-0.08	0.07	160
493.	ferrocenyl	-0.15	-0.18	-0.09	-0.09	141
494.	ferricenium <sup>+</sup>	0.29	0.29	0.30	-0.01	100
495.	ferrocenonium <sup>+</sup>	0.05	0.29	-0.01	0.30	101
496.	C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> -4-CMe <sub>3</sub>	0.07	0.01	0.12	-0.11	85
497.	1-adamantyl	-0.12	-0.13	-0.07	-0.06	149
498.	1-dibenzarsenyl	0.19	0.13	0.23	-0.10	65
499.	1-dibenzoarsoxyl	0.17	0.09	0.22	-0.13	65
500.	1-dibenzoarsazinyll	0.14	0.09	0.18	-0.09	66
501.	As(C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> ) <sub>2</sub>	0.03	0.09	0.04	0.05	125
502.	AsO(C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> ) <sub>2</sub>	0.54	0.64	0.49	0.15	81
503.	P(C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> ) <sub>2</sub> (BCl <sub>3</sub> )	0.67	0.72	0.62	0.10	164
504.	N(C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> ) <sub>2</sub>	0.00	-0.22	0.12	-0.34	168, 169
505.	PO(C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> ) <sub>2</sub>	0.38	0.53	0.32	0.21	144
506.	P(C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> ) <sub>2</sub>	0.11	0.19	0.10	0.09	144
507.	PS(C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> ) <sub>2</sub>	0.29	0.47	0.23	0.24	144
508.	P(N(C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> ) <sub>2</sub> )C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> -3-F	0.20	0.24	0.20	0.04	122, 123
509.		0.37	0.38	0.37	0.01	61
510.		0.38	0.38	0.38	0.00	61
511.		0.17	0.21	0.17	0.04	138

TABLE I (Continued)

	substituent	$\sigma_m$	$\sigma_p$	$F^b$	$R^c$	ref(s)
512.	$\text{CH}(\text{C}_6\text{H}_5)_2$	-0.03	-0.05	0.01	-0.06	74, 102
513.		0.12	0.07	0.16	-0.09	66
514.	$\text{PO}(\text{C}_6\text{H}_5)\text{C}_6\text{H}_4\text{-4-Me}$	0.13	0.30	0.09	0.21	91
515.	$\text{CH}_2\text{PO}(\text{C}_6\text{H}_5)_2$	0.14	0.01	0.21	-0.20	85
516.	$\text{PS}(\text{C}_6\text{H}_5)\text{C}_6\text{H}_4\text{-4-Me}$	0.09	0.30	0.03	0.27	91
517.	$\text{P}^+(\text{Me})(\text{C}_6\text{H}_5)_2$	1.13	1.18	1.04	0.14	91
518.	$\text{Si}(\text{Me})(\text{C}_6\text{H}_5)_2$	0.10	0.13	0.11	0.02	74
519.	$\text{COOCH}(\text{C}_6\text{H}_5)_2$	0.36	0.56	0.28	0.28	175
520.	$\text{PO}(\text{C}_6\text{H}_4\text{-4-Me})_2$	0.17	0.30	0.14	0.16	91
521.	$\text{PS}(\text{C}_6\text{H}_4\text{-4-Me})_2$	0.20	0.23	0.20	0.03	91
522.	$\text{P}^+(\text{Me})(\text{C}_6\text{H}_5)(\text{C}_6\text{H}_4\text{-4-Me})$	1.09	1.11	1.02	0.09	91
523.	$\text{P}^+(\text{Me})(\text{C}_6\text{H}_4\text{-4-Me})_2$	1.13	1.18	1.04	1.14	91
524.	$\text{Ge}(\text{C}_6\text{H}_5)_3$	0.05	0.08	0.07	0.01	98
525.	2-methyl-4,6-diphenylpyridinium	0.65	0.70	0.61	0.09	61
526.	$\text{N}=\text{P}(\text{C}_6\text{H}_5)_3$	-0.33	-0.77	-0.10	-0.67	83
527.	$\text{Si}(\text{C}_6\text{H}_5)_3$	-0.03	0.10	-0.04	0.14	132
528.	$\text{Sn}(\text{C}_6\text{H}_5)_3$	(0.53)	(0.27)	(0.62)	(-0.35)	164
529.	$\text{C}(\text{C}_6\text{H}_5)_3$	-0.01	0.02	0.01	0.01	131
530.	2,4,6-triphenylpyridinium	0.34	0.33	0.35	-0.02	73

<sup>a</sup> Values in parentheses are suspected of being inaccurate. <sup>b</sup> Calculated from eq 8. <sup>c</sup> Calculated from eq 2. <sup>d</sup> Substituents are arranged by molecular formula,  $\text{C}_2\text{H}_5$ ; other elements in alphabetical order.

TABLE II. Substituent Field/Inductive Parameters for Primary Dipolar Substituents Obtained from Various Sources

substituent X	$\sigma_1 = 0.45\sigma^*$		$\sigma_1$				$F^e$	$\sigma_1$ (F NMR) Taft <sup>h</sup>
	$\text{CH}_2\text{X}$ Taft <sup>a</sup>	$\sigma_F$ Taft <sup>b</sup>	Stock <sup>c</sup>	Grobb <sup>d</sup>	Charton <sup>e</sup>	Taylor <sup>f</sup>		
$\text{NO}_2$	0.63	0.65	0.68	0.63	0.67	0.64	0.65	0.64
H	0.00	0.00	0.00 <sup>b,c</sup>	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
$\text{CH}_3$	-0.05	0.00	-0.01	-0.02	-0.01	0.01	0.01	-0.01
$\text{C}_2\text{H}_5$	-0.05	0.00	-0.01		-0.01	-0.03	0.00	0.06
$\text{CH}_2\text{OH}$			0.05	0.09	0.11		0.03	0.13
OH			0.26 <sup>b,c</sup>		0.24		0.33	
$\text{OCH}_3$	0.27	0.30						
$\text{OC}_6\text{H}_5$	0.23	0.25 (0.28)	0.30 <sup>b</sup>	0.31	0.30	0.29	0.29	0.30
$\text{OC}_6\text{H}_4$	0.38				0.40		0.37	0.42
$\text{CO}_2\text{C}_2\text{H}_5$	0.31	0.24 (0.31)	0.29 <sup>b,c</sup>	0.29	0.30	0.31	0.34	0.19
Cl	0.47	0.45	0.47 <sup>b</sup>	0.44	0.47		0.42	0.43
Br	0.45	0.45	0.45 <sup>b,c</sup>	0.47	0.47		0.45	0.49
CN	0.59	0.60	0.54 <sup>c</sup>	0.55	0.57	0.63	0.51	(0.53)
$\text{CH}(\text{CH}_3)_2$		0.00		-0.05	0.01		0.04	
$\text{C}(\text{CH}_3)_3$	-0.07	0.00		-0.07	-0.01		-0.02	0.09
$\text{CH}_2\text{OCH}_3$		0.14		0.09	0.11		0.13	0.09
$\text{CH}_2\text{OCOCH}_3$				0.13	0.15		0.07	
tosylmethyl				0.21	0.23			
$\text{CH}_2\text{Cl}$	0.17	0.23		0.15	0.17		0.13	0.23
$\text{CH}_2\text{Br}$				0.16	0.20		0.14	0.23
$\text{CH}_2\text{I}$				0.16	0.17		0.12	0.26
$\text{CH}(\text{OH})_2$				0.20	0.22			
$\text{CH}=\text{CH}_2$		0.06		0.07	0.11		0.13	0.07
$\text{C}(\text{CH}_3)=\text{CH}_2$				0.08	0.10		0.13	
$\text{C}=\text{CH}$		0.23		0.28	0.29		0.22	(0.15)
$\text{C}_6\text{H}_5$	0.10	0.10		0.15	0.12		0.12	0.14
$\text{COCH}_3$	0.27	0.26 (0.30)	0.26	0.29	0.30	0.26	0.33	0.25
$\text{COC}_6\text{H}_5$		0.28				0.30	0.31	0.29
$\text{CONH}_2$				0.30	0.28	0.26	0.26	0.23
$\text{NH}_2$	0.10	0.14 (0.19)		0.15	0.17	0.14	0.08	0.09
$\text{NHCH}_3$		0.12		0.12	0.13		-0.03	
$\text{N}(\text{CH}_3)_2$	0.10	0.10 (0.19)		0.15	0.17		0.15	(0.17)
$\text{NHCOCH}_3$	0.28			0.27	0.28	0.27	0.31	0.34
$\text{NHCO}_2\text{C}_2\text{H}_5$				0.26			0.23	
$\text{OCOCH}_3$				0.37	0.38		0.42	0.34
$\text{SCH}_3$	0.25	0.25		0.28	0.30		0.23	0.24
$\text{SO}_2\text{CH}_3$	0.59	0.59 (0.65)		0.58	0.59		0.53	0.61
$\text{SO}_2\text{CF}_3$		0.84			0.71		0.74	0.83
F	0.50	0.44		0.46	0.54		0.45	(0.57)
I	0.38			0.41	0.40		0.42	(0.47)

<sup>a</sup> Reference 32. <sup>b</sup> Reference 30. <sup>c</sup> Calculated as  $\Delta pK_a/1.56$ .  $\Delta pK_a$  values from refs 35 and 36. <sup>d</sup> Calculated from eq 8. <sup>e</sup> Reference 45. <sup>f</sup> Calculated as  $0.0415 \Delta pK_a$  for  $\text{XHN}=\text{C}(\text{NH}_2)_2^+$ . Reference 41. <sup>g</sup> From Table I. <sup>h</sup> Calculated from the meta-substituted fluorobenzene F NMR shift (relative to fluorobenzene). Reference 43 using eq 10. Values in parentheses are thought to involve magnetic or other complications.