

The use of the ^{19}F NMR spectra of fluoropyridines and related compounds to verify the ‘statistical’ substituent chemical shift values of fluoroarenes

J.R. Nanney^a and C.A.L. Mahaffy^{*.b}

^aDepartment of Mathematics and ^bDepartment of Chemistry, Auburn University at Montgomery, Montgomery, AL 36117-3596 (USA)

(Received July 5, 1993; accepted August 27, 1993)

Abstract

^{19}F NMR data for fluorosubstituted-pyridines, -pyridazines, -pyrimidines, -pyrazines and -1,3,5-triazines has been used to verify previously published statistical substituent chemical shift (SSCS) values for fluoroarenes. The data also allowed generation of a set of structure factors for aromatic nitrogen heterocycles which allows the signals for these compounds to be predicted from the same set of SSCS values as fluoroarenes. When these values are used to predict the ^{19}F NMR signal positions of the nitrogen heterocycles, they give a correlation coefficient of predicted versus observed values of 0.987 with a standard deviation of 4.5 compared with 0.995 and 2.46, respectively, for the fluoroarenes.

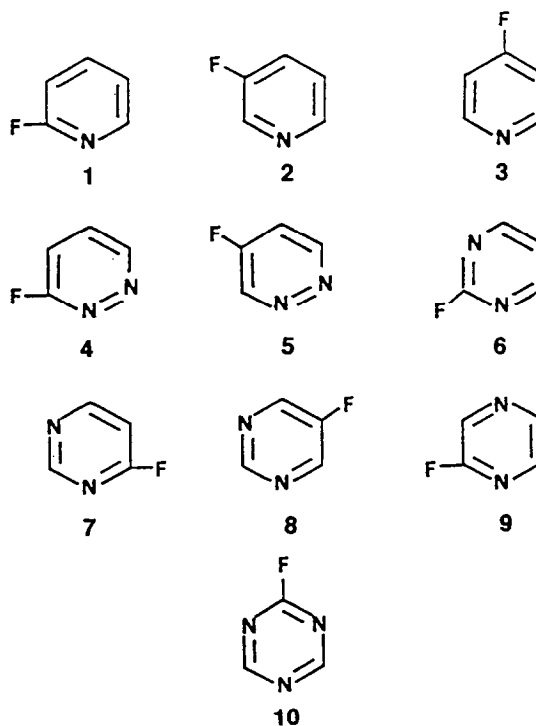
Introduction

The prediction of the ^{19}F NMR spectra of fluoroarenes has been reported using substituent chemical shift (SCS) values [1], mathematical modeling methods [2] and, most recently, by the use of statistical substituent chemical shift (SSCS) values [3]. SSCS values have also recently been reported for fluoro-substituted arenetricarbonylchromium complexes [4]. In this study, it was found that the SSCS values for the *ortho* and *meta* signals were very similar to those of the free arenes, but the values for the *para* position differed substantially for the two groups of compounds.

We now report the use of the ^{19}F NMR spectra of fluoropyridines together with fluoro-substituted pyridazines, pyrimidines, pyrazines and 1,3,5-triazines to verify the previously deduced SSCS values for fluoroarenes. We also report a set of ‘structure factors’ which allow the ^{19}F NMR spectra of this group of nitrogen heterocycles to be predicted using the same set of SSCS values as for the fluoroarenes themselves.

The ‘statistical’ SCS method

The 10 types of aromatic nitrogen heterocycles used in this study are shown in Scheme 1. The mathematical details of the SSCS method have been described pre-



Scheme 1.

viously in ref. 3. However, a straightforward application of this method as appears in ref. 3 to the 10 types of structure in Scheme 1 would result in 10 different sets of SSCS values, one for each type. In addition, each one of the sets would be abbreviated, as the data set

*Author to whom correspondence should be addressed.

for each type is rather small, and not all substituents occur in each of the 10 types.

We therefore sought to modify the basic SSCS method in such a way that all 10 types could be included in the same study. We also believed that the SSCS values already known [3] for fluoroarenes should also be usable for the nitrogen heterocycles. If this were true, it would not only be a further confirmation of the correctness of the SSCS values for fluoroarenes, but would show them to have a broader application.

We therefore settled on a model based on the following reasoning. The ¹⁹F NMR chemical shift is due to a change in the shielding of the fluorine atom. Adding a substituent to the ring alters this shielding because the new group perturbs the electronic structure. The effect of this group depends on its position relative to the fluorine atom, but in most cases the effect is relatively independent of the other substituents on the ring. If this were not so, SSCS and SSCS values would not be useful in the prediction of the line positions. The SSCS value is a measure of the electron donating or withdrawing capabilities of the group, and we did not believe that this ought to depend (at least not heavily) on what structure the group was attached to as long as this structure was an aromatic six-membered ring.

As for the structure itself, it is reasonable to assume that a change from, for example, fluorobenzene to a fluoropyridine would change the shielding of the fluorine atom in such a way that the effect of the change would be independent of the substituents on the ring. To measure the effects of a change in structure, we introduced a *structure factor*.

The assumptions of the model are therefore:

(1) The effect of a substituent depends on its position relative to the fluorine atom for which the signal is being predicted. Thus each group has an *ortho*, *meta* and *para* SSCS value.

(2) The effect of a substituent is independent of other substituents on the ring.

(3) The effect of a substituent is independent of the structure or type of ring being considered and thus the fluorobenzene SSCS values may be used for any of the 10 types.

(4) The effect of a change of structure from fluorobenzene to one of the 10 types is measurable and yields the structure factor for that type.

The resulting equation for the chemical shift Δ^F in this model is given by:

$$\Delta^F = -113.9 + \sum_{i=2}^6 SSCS_i + \sum_{j=1}^{10} t_j y_j$$

where the -113.9 term is the signal position for fluorobenzene and $SSCS_i$ is the fluorobenzene SSCS value of the substituent in position i (from Table 2). This

part of the equation is already known for a given compound and is treated as a constant with respect to the multiple regression procedure. The variable part of the multiple regression consists of the 10 variables y_j , whose coefficients t_j are to be determined by the regression procedure and which constitute the 10 structure factors. The variable y_j is defined by:

$$y_j = \begin{cases} 0 & \text{if the compound is not type } j \\ 1 & \text{if the compound is type } j \end{cases}$$

Results and discussion

The data base

The literature from 1951 to 1989 was surveyed [5–16] for the ¹⁹F NMR spectra of fluoro-substituted pyridines, 1,2- 1,3- and 1,4-diazines together with 1,3,5-triazines. From this search a data base was extracted in which:

(a) The compound contained only one aromatic ring. We did not consider any highly sterically hindered systems, analogues of biphenyl or fused ring systems, or complexes containing π -bonded metal fragments.

(b) We included data where the solvent was not reported, as the SSCS system produces values for an 'average' solvent.

The data base consists of 674 signals some of which are for different fluorine atoms in the same molecule and some of which are the same signal observed in different solvents or under different conditions.

The sort code

In order that compounds could be sorted logically and so that a particular structure could be found quickly and easily, a sort code was established in which a compound is identified in the computer programs by its 12 letter sort code, the key to which is given in Table 2. The letters of the sort code tell the program which group is in each position. The fluorine atom which is being studied is always in position 1. Compounds with more than one signal are encoded separately for each signal.

Table 1 is sorted alphabetically according to the sort code. Note that lower case letters are treated as different from capital letters. The computer treats all capital letters as coming before all lower case letters. Common groups are given sort codes which seemed logical, e.g. the sort code for methyl is Me, ethyl is Et and so on, but with a large number of groups it is not possible to do this in most cases. However, generally, groups that have a carbon attached directly to the ring begin with C or D, groups attached through the nitrogen begin with N, oxygen O, phosphorus and lead P, sulphur S, silicon and selenium s and tin T.

Many compounds have two sort codes, one clockwise and one counterclockwise. For those compounds with two sort codes, Table 1 lists the sort code which comes first in alphabetical order.

Statistical computations

The above model was tested with the above data base of 674 signals which included all 10 types in Scheme 1. The correlation coefficient was 0.987 with a standard deviation of 4.5. The average error of prediction was approximately 3 ppm. The compounds, observed and predicted signal positions together with residuals and references are given in Table 1. A scatter plot of the observed versus predicted signal positions is given in Fig. 1.

Because there were a few (53) compounds which had substituents which are not listed in Table 1, it was possible in an additional study to determine the SSCS

values for these substituents. This was done by the method outlined in [3], by using the structure factor (Table 3), the spectrum of fluorobenzene and known SSCS values (Table 4) as constants and the unknown SSCS values as variables. This resulted in a 20 variable multiple regression which generated the 20 new SSCS values listed in Table 5. For this procedure $r=0.952$. A scatter plot of the observed versus the predicted values is given in Fig. 2. From the assumptions of the model, the SSCS values given in Table 5 may be used for either fluorobenzenes or the aromatic nitrogen heterocycles used in this study.

To predict the ¹⁹F NMR signal position of a fluoroarene or aromatic nitrogen heterocycle, simply add the SSCS values of the substituents from either Table 2 or Table 5 to -113.9 ppm (fluorobenzene itself) and then add the structure factor (0.0 ppm for type 0/fluoroarenes) from Table 3.

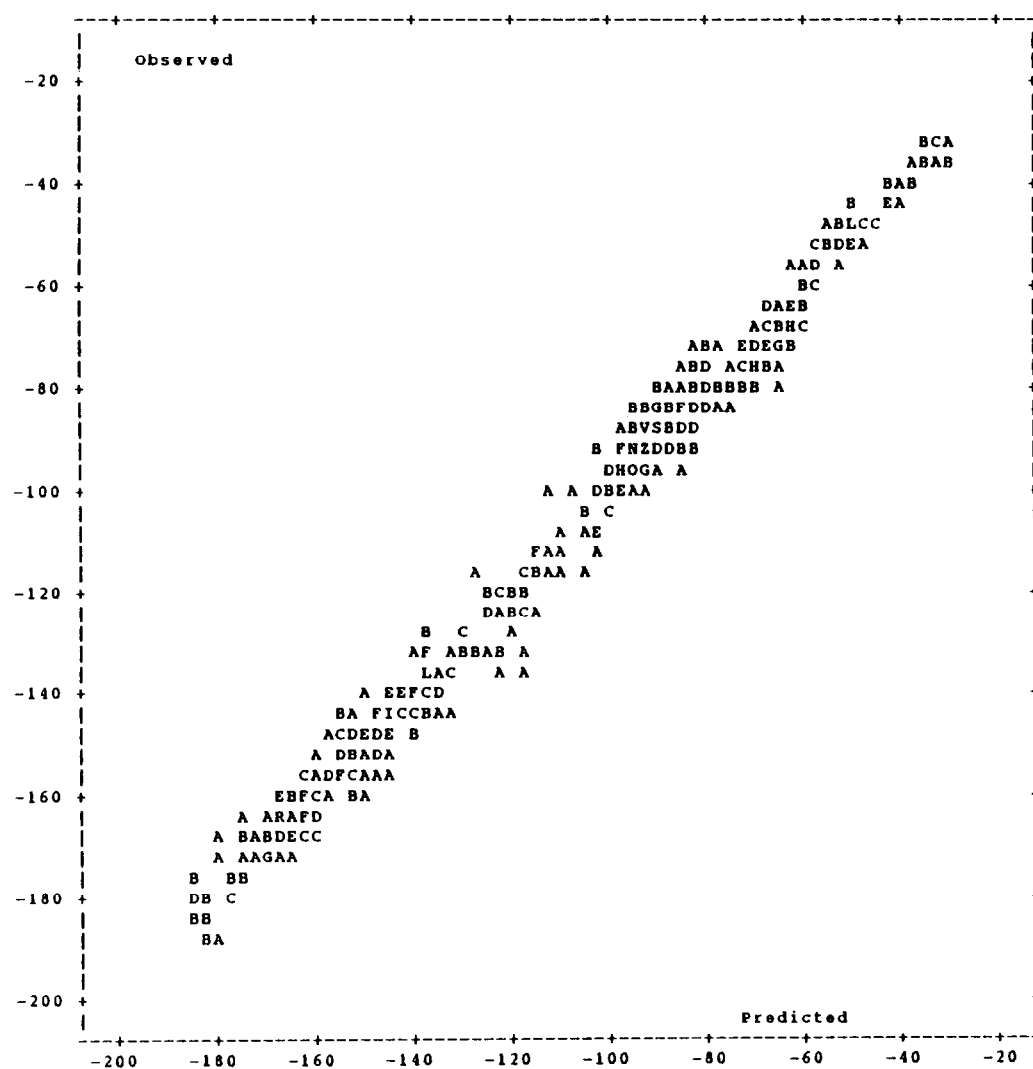


Fig. 1. Correlation of ¹⁹F NMR signal position observed versus predicted for compounds listed in Table 1. Note: symbol 'B' means two coincident data points, 'C' means three coincident data points, etc.

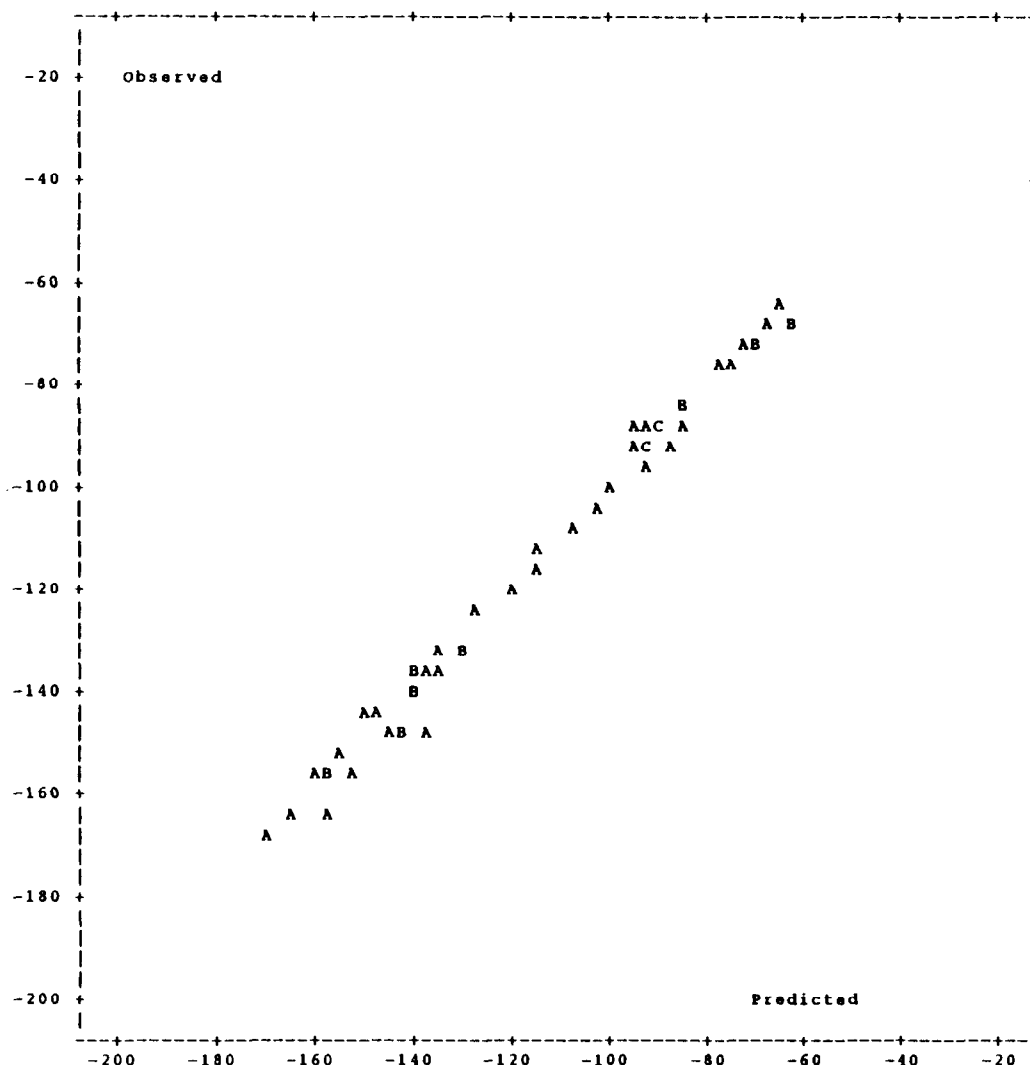


Fig. 2. Correlation of ^{19}F NMR signal position observed versus predicted for compounds listed in Table 4.

Sources of error

(1) The model does not take steric restrictions into account and thus highly sterically hindered compounds may not be well predicted. This is why derivatives of biphenyl and related compounds were not included in the data base. These compounds would require a separate study.

(2) The model computes the SSCS value for an 'average' solvent. Solvent effects, which are not usually very large [2], may therefore be present.

(3) The SSCS values in Tables 2 and 5 are not exact. Standard errors are given for each value and are fairly large for some substituents which occur infrequently in the data base.

(4) Random errors, which include different standards, conversion between different standards, different instruments, different concentrations or tube sizes and (probably) typographical errors.

(5) Failure of the model itself. The assumptions of the model must be very close to true to have resulted in such a high correlation coefficient. Nonetheless, it is unlikely that they are exactly true.

Experimental

Statistical computations were undertaken using programs written in FORTRAN and SAS (Statistical Analysis System) running on a Digital Equipment Corporation Microvax model 3900.

Conclusions

(1) The ^{19}F NMR spectra of the 10 types of fluoro-substituted nitrogen heterocycles given in Scheme 1 can be predicted using SSCS values and a structure

factor in a similar way as for fluoroarenes, except that the fluoroarenes require no structure term.

(2) Structures which are similar may not need different sets of SSCS values. The 10 structure types in this study needed only one common set, not 10.

(3) The assumptions made at the beginning of this paper would appear to be essentially correct.

Acknowledgements

We thank the Auburn University at Montgomery Grant-in-Aid program, and the Chemistry and Mathematics Departments for support. Thanks are also due to Debra West and Caroline Johnson (AUM Library) for their assistance in the literature search.

References

- 1 M.J. Fivolt, S.A. Sojka, R.A. Wolfe, D.A. Hohnicki, J.F. Bieron and F.J. Dinan, *J. Org. Chem.*, 54 (1989) 301.

- 2 J.R. Nanney, A.K. Traylor and C.A.L. Mahaffy, *J. Fluorine Chem.*, 64 (1993) 217.
- 3 C.A.L. Mahaffy and J.R. Nanney, *J. Fluorine Chem.*, 67 (1994) 67.
- 4 C.A.L. Mahaffy and J.R. Nanney, *J. Fluorine Chem.*, 68 (1994) 165.
- 5 *Annu. Rep. NMR Spectrosc.*, 1 (1968).
- 6 Ref. 5, 3 (1970).
- 7 Ref. 5, 4 (1970).
- 8 Ref. 5, 5A (1972).
- 9 Ref. 5, 6B (1976).
- 10 Ref. 5, 10B (1980).
- 11 Ref. 5, 14 (1983).
- 12 C.H. Duncan and J.R. Van Wazer, *Compilation of Reported ¹⁹F NMR Chemical Shifts*, Wiley-Interscience, New York, 1970.
- 13 J.W. Emsley, J. Feeney and L.H. Sutcliffe (eds.), *Progress in Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy*, Vol. 7, Pergamon, Oxford, 1971.
- 14 R.G. Plevey, R.W. Rendell and J.C. Tatlow, *J. Fluorine Chem.*, 21 (1982) 159.
- 15 R.G. Plevey, R.W. Rendell and J.C. Tatlow, *J. Fluorine Chem.*, 21 (1982) 265.
- 16 R.E. Banks, M.S. Falou, R. Fields, N.O. Olawore and A.E. Tipping, *J. Fluorine Chem.*, 38 (1988) 217.

TABLE 1. Type, sort code, ¹⁹F NMR position observed and predicted, residual and original reference

No.	Type	Sort Code/Position						¹⁹ F nmr		Residual	Ref
		1	2	3	4	5	6	Obs	Pred		
1	0	F1	AA	AA	AA	AA	AA	-113.9	-113.9	0.0	a
2	1	F1	=N-	AA	AA	AA	AA	-70.4	-66.1	-4.3	12
3	1	F1	=N-	AA	AA	AA	AA	-79.4	-66.1	-13.3	8
4	1	F1	=N-	AA	AA	AA	F1	-87.2	-89.3	2.1	14
5	1	F1	=N-	AA	AA	CI	AA	-65.0	-62.3	-2.7	15
6	1	F1	=N-	AA	AA	DE	F1	-88.0	-86.9	-1.1	15
7	1	F1	=N-	AA	AA	F1	F1	-83.3	-87.3	4.0	14
8	1	F1	=N-	AA	CI	F1	F1	-78.4	-80.6	2.2	15
9	1	F1	=N-	AA	C1	AA	AA	-67.4	-66.8	-0.6	8
10	1	F1	=N-	AA	C1	AA	AA	-71.3	-66.8	-4.5	8
11	1	F1	=N-	AA	F1	AA	AA	-72.8	-72.7	-0.1	14
12	1	F1	=N-	AA	F1	CI	F1	-87.2	-92.1	4.9	15
13	1	F1	=N-	AA	F1	F1	F1	-83.9	-93.9	10.0	12
14	1	F1	=N-	Br	F1	F1	F1	-80.3	-90.4	10.1	7
15	1	F1	=N-	CF	F1	F1	F1	-80.9	-90.8	9.9	7
16	1	F1	=N-	CF	F1	F1	F1	-82.2	-90.8	8.6	12
17	1	F1	=N-	CF	F1	F1	F1	-83.0	-90.8	7.8	13
18	1	F1	=N-	CI	F1	F1	F1	-82.4	-90.1	7.7	15
19	1	F1	=N-	Cj	F1	Cj	F1	-82.0	-88.6	6.6	6
20	1	F1	=N-	C1	AA	AA	AA	-66.9	-62.7	-4.2	8
21	1	F1	=N-	C1	AA	AA	AA	-71.1	-62.7	-8.4	8
22	1	F1	=N-	C1	C1	C1	C1	-66.3	-60.2	-6.1	13
23	1	F1	=N-	C1	C1	C1	C1	-68.0	-60.2	-7.8	13
24	1	F1	=N-	C1	C1	F1	C1	-66.8	-61.7	-5.1	13
25	1	F1	=N-	C1	F1	C1	F1	-85.8	-89.0	3.2	11
26	1	F1	=N-	C1	F1	F1	F1	-86.2	-90.4	4.2	10
27	1	F1	=N-	Cm	F1	Me	F1	-89.0	-94.1	5.1	13
28	1	F1	=N-	DE	F1	F1	F1	-83.1	-91.5	8.4	15
29	1	F1	=N-	F1	AA	AA	AA	-62.1	-64.1	2.0	8
30	1	F1	=N-	F1	AA	AA	AA	-68.0	-64.1	-3.9	13
31	1	F1	=N-	F1	AA	AA	F1	-88.7	-87.3	-1.4	12
32	1	F1	=N-	F1	AA	CF	F1	-83.1	-84.3	1.2	15
33	1	F1	=N-	F1	AA	CL	F1	-85.2	-82.8	-2.4	15
34	1	F1	=N-	F1	AA	F1	AA	-65.0	-62.2	-2.8	13

(continued)

TABLE 1 (continued)

No.	Type	Sort Code/Position						¹⁹ F nmr		Residual	Ref
		1	2	3	4	5	6	Obs	Pred		
35	1	F1	=N-	F1	AA	F1	AA	-65.5	-62.2	-3.3	12
36	1	F1	=N-	F1	AA	F1	C1	-66.5	-62.5	-4.0	13
37	1	F1	=N-	F1	AA	F1	F1	-83.3	-85.4	2.1	12
38	1	F1	=N-	F1	CF	F1	F1	-77.9	-79.5	1.6	12
39	1	F1	=N-	F1	CF	F1	F1	-78.0	-79.5	1.5	13
40	1	F1	=N-	F1	CI	AA	F1	-82.3	-80.6	-1.7	15
41	1	F1	=N-	F1	CI	F1	F1	-78.7	-78.6	-0.1	15
42	1	F1	=N-	F1	C1	AA	C1	-72.4	-65.2	-7.2	13
43	1	F1	=N-	F1	C1	AA	F1	-85.3	-88.0	2.7	12
44	1	F1	=N-	F1	C1	C1	C1	-67.6	-61.7	-5.9	13
45	1	F1	=N-	F1	C1	C1	F1	-87.0	-84.6	-2.4	11
46	1	F1	=N-	F1	C1	F1	AA	-68.5	-62.9	-5.6	13
47	1	F1	=N-	F1	C1	F1	C1	-68.3	-63.2	-5.1	16
48	1	F1	=N-	F1	C1	F1	C1	-68.7	-63.2	-5.5	12
49	1	F1	=N-	F1	C1	F1	C1	-69.9	-63.2	-6.7	11
50	1	F1	=N-	F1	C1	F1	F1	-82.8	-86.1	3.3	12
51	1	F1	=N-	F1	C1	F1	F1	-85.2	-86.1	0.9	11
52	1	F1	=N-	F1	C1	F1	F1	-85.7	-86.1	0.4	8
53	1	F1	=N-	F1	C1	F1	F1	-85.9	-86.1	0.2	16
54	1	F1	=N-	F1	C1	F1	Rj	-73.6	-71.6	-2.0	11
55	1	F1	=N-	F1	C1	Io	F1	-91.0	-84.5	-6.5	13
56	1	F1	=N-	F1	C1	Io	F1	-92.2	-84.5	-7.7	6
57	1	F1	=N-	F1	C1	NH	C1	-75.6	-66.4	-9.2	13
58	1	F1	=N-	F1	C1	NH	F1	-94.0	-89.3	-4.7	16
59	1	F1	=N-	F1	C1	NH	F1	-95.6	-89.3	-6.3	13
60	1	F1	=N-	F1	C1	NM	C1	-72.4	-64.0	-8.4	7
61	1	F1	=N-	F1	C1	NM	F1	-92.8	-86.8	-6.0	7
62	1	F1	=N-	F1	C1	OH	C1	-74.1	-65.2	-8.9	12
63	1	F1	=N-	F1	C1	OH	F1	-92.5	-88.1	-4.4	12
64	1	F1	=N-	F1	C1	OX	C1	-69.7	-64.4	-5.3	16
65	1	F1	=N-	F1	C1	OX	C1	-71.9	-64.4	-7.5	13
66	1	F1	=N-	F1	C1	VI	F1	-92.0	-90.2	-1.8	7
67	1	F1	=N-	F1	Co	Co	F1	-79.1	-79.8	0.7	13
68	1	F1	=N-	F1	Co	F1	F1	-80.9	-78.9	-2.0	13
69	1	F1	=N-	F1	DE	F1	F1	-81.3	-72.6	-8.7	14
70	1	F1	=N-	F1	F1	AA	AA	-74.4	-70.7	-3.7	12
71	1	F1	=N-	F1	F1	AA	CI	-77.1	-74.2	-2.9	15
72	1	F1	=N-	F1	F1	AA	C1	-72.3	-71.0	-1.3	12
73	1	F1	=N-	F1	F1	AA	F1	-92.3	-93.9	1.6	12
74	1	F1	=N-	F1	F1	Br	F1	-89.0	-90.4	1.4	13
75	1	F1	=N-	F1	F1	CB	F1	-89.7	-91.6	1.9	13
76	1	F1	=N-	F1	F1	CB	F1	-89.8	-91.6	1.8	6
77	1	F1	=N-	F1	F1	CF	AA	-69.4	-67.6	-1.8	15
78	1	F1	=N-	F1	F1	CF	F1	-88.4	-90.8	2.4	12
79	1	F1	=N-	F1	F1	CF	F1	-89.0	-90.8	1.8	13
80	1	F1	=N-	F1	F1	CG	F1	-87.0	-89.7	2.7	6
81	1	F1	=N-	F1	F1	CI	F1	-88.1	-90.1	2.0	15
82	1	F1	=N-	F1	F1	CL	AA	-70.1	-66.2	-3.9	15
83	1	F1	=N-	F1	F1	CR	F1	-87.8	-91.7	3.9	6
84	1	F1	=N-	F1	F1	CT	F1	-89.7	-98.3	8.6	6
85	1	F1	=N-	F1	F1	Cf	F1	-86.4	-90.9	4.5	6
86	1	F1	=N-	F1	F1	Cj	F1	-87.3	-90.3	3.0	6
87	1	F1	=N-	F1	F1	Cj	F1	-88.3	-90.3	2.0	16
88	1	F1	=N-	F1	F1	C1	C1	-70.9	-67.6	-3.3	11
89	1	F1	=N-	F1	F1	C1	F1	-87.5	-90.4	2.9	10
90	1	F1	=N-	F1	F1	C1	F1	-88.6	-90.4	1.8	9
91	1	F1	=N-	F1	F1	C1	F1	-89.2	-90.4	1.2	11
92	1	F1	=N-	F1	F1	Cm	F1	-90.0	-91.8	1.8	13
93	1	F1	=N-	F1	F1	Cm	F1	-90.4	-91.8	1.4	6
94	1	F1	=N-	F1	F1	Cm	F1	-91.7	-91.8	0.1	6
95	1	F1	=N-	F1	F1	Cn	F1	-89.7	-94.7	5.0	6
96	1	F1	=N-	F1	F1	Co	Co	-65.2	-67.3	2.1	13
97	1	F1	=N-	F1	F1	Co	F1	-89.2	-92.8	3.6	13

(continued)

TABLE 1 (continued)

No.	Type	Sort Code/Position						¹⁹ F nmr		Residual	Ref
		1	2	3	4	5	6	Obs	Pred		
98	1	F1	=N-	F1	F1	Co	F1	-89.6	-92.8	3.2	12
99	1	F1	=N-	F1	F1	Cv	F1	-88.1	-92.6	4.5	6
100	1	F1	=N-	F1	F1	DB	F1	-87.1	-92.0	4.9	6
101	1	F1	=N-	F1	F1	DB	F1	-97.1	-92.0	-5.1	13
102	1	F1	=N-	F1	F1	F1	AA	-67.6	-68.7	1.1	12
103	1	F1	=N-	F1	F1	F1	CF	-65.7	-68.3	2.6	12
104	1	F1	=N-	F1	F1	F1	CF	-66.0	-68.3	2.3	13
105	1	F1	=N-	F1	F1	F1	CI	-71.3	-72.2	0.9	15
106	1	F1	=N-	F1	F1	F1	C1	-71.7	-69.1	-2.6	11
107	1	F1	=N-	F1	F1	F1	C1	-72.1	-69.1	-3.0	12
108	1	F1	=N-	F1	F1	F1	C1	-77.1	-69.1	-8.0	8
109	1	F1	=N-	F1	F1	F1	Co	-65.8	-66.4	0.6	13
110	1	F1	=N-	F1	F1	F1	DE	-72.5	-81.3	8.8	14
111	1	F1	=N-	F1	F1	F1	F1	-86.0	-91.9	5.9	13
112	1	F1	=N-	F1	F1	F1	F1	-86.3	-91.9	5.6	9
113	1	F1	=N-	F1	F1	F1	F1	-86.7	-91.9	5.2	11
114	1	F1	=N-	F1	F1	F1	F1	-87.6	-91.9	4.3	12
115	1	F1	=N-	F1	F1	F1	F1	-87.7	-91.9	4.2	15
116	1	F1	=N-	F1	F1	F1	F1	-88.3	-91.9	3.6	12
117	1	F1	=N-	F1	F1	F1	F1	-88.9	-91.9	3.0	12
118	1	F1	=N-	F1	F1	F1	F1	-89.0	-91.9	2.9	13
119	1	F1	=N-	F1	F1	F1	F1	-89.8	-91.9	2.1	12
120	1	F1	=N-	F1	F1	F1	Me	-73.5	-72.6	-0.9	15
121	1	F1	=N-	F1	F1	F1	OH	-88.0	-92.2	4.2	13
122	1	F1	=N-	F1	F1	F1	Rj	-72.1	-77.5	5.4	11
123	1	F1	=N-	F1	F1	Io	C1	-72.0	-67.5	-4.5	13
124	1	F1	=N-	F1	F1	Io	C1	-73.6	-67.5	-6.1	6
125	1	F1	=N-	F1	F1	Io	F1	-88.0	-90.3	2.3	13
126	1	F1	=N-	F1	F1	Io	F1	-89.6	-90.3	0.7	6
127	1	F1	=N-	F1	F1	Me	F1	-92.5	-94.3	1.8	13
128	1	F1	=N-	F1	F1	Me	F1	-96.0	-94.3	-1.7	6
129	1	F1	=N-	F1	F1	NF	F1	-84.0	-90.1	6.1	13
130	1	F1	=N-	F1	F1	NF	F1	-85.7	-90.1	4.4	12
131	1	F1	=N-	F1	F1	NF	F1	-87.4	-90.1	2.7	12
132	1	F1	=N-	F1	F1	NF	F1	-89.4	-90.1	0.7	12
133	1	F1	=N-	F1	F1	NF	NH	-82.1	-89.8	7.7	12
134	1	F1	=N-	F1	F1	NF	OX	-78.0	-85.9	7.9	13
135	1	F1	=N-	F1	F1	NF	OX	-80.1	-85.9	5.8	12
136	1	F1	=N-	F1	F1	NH	C1	-76.4	-72.3	-4.1	16
137	1	F1	=N-	F1	F1	NH	C1	-78.0	-72.3	-5.7	13
138	1	F1	=N-	F1	F1	NH	F1	-95.0	-95.2	0.2	6
139	1	F1	=N-	F1	F1	NH	F1	-95.7	-95.2	-0.5	12
140	1	F1	=N-	F1	F1	NH	F1	-95.9	-95.2	-0.7	6
141	1	F1	=N-	F1	F1	NH	F1	-96.7	-95.2	-1.5	12
142	1	F1	=N-	F1	F1	NH	NH	-94.0	-94.8	0.8	13
143	1	F1	=N-	F1	F1	NH	NH	-96.1	-94.8	-1.3	12
144	1	F1	=N-	F1	F1	NM	C1	-75.0	-69.8	-5.2	7
145	1	F1	=N-	F1	F1	NM	F1	-95.0	-92.7	-2.3	12
146	1	F1	=N-	F1	F1	NN	F1	-95.5	-95.2	-0.3	12
147	1	F1	=N-	F1	F1	NW	F1	-88.8	-90.6	1.8	11
148	1	F1	=N-	F1	F1	OH	C1	-75.9	-71.1	-4.8	12
149	1	F1	=N-	F1	F1	OH	C1	-80.0	-71.1	-8.9	13
150	1	F1	=N-	F1	F1	OH	F1	-93.6	-93.9	0.3	12
151	1	F1	=N-	F1	F1	OH	F1	-94.3	-93.9	-0.4	12
152	1	F1	=N-	F1	F1	OX	F1	-90.8	-93.1	2.3	16
153	1	F1	=N-	F1	F1	OX	F1	-92.3	-93.1	0.8	12
154	1	F1	=N-	F1	F1	OX	F1	-92.5	-93.1	0.6	12
155	1	F1	=N-	F1	F1	OX	F1	-92.9	-93.1	0.2	6
156	1	F1	=N-	F1	F1	OX	F1	-94.9	-93.1	-1.8	12
157	1	F1	=N-	F1	F1	Rk	F1	-91.9	-90.5	-1.4	7
158	1	F1	=N-	F1	F1	SH	F1	-91.2	-93.0	1.8	7
159	1	F1	=N-	F1	F1	VI	C1	-74.7	-73.2	-1.5	7
160	1	F1	=N-	F1	F1	sM	F1	-93.0	-93.6	0.6	13

(continued)

TABLE 1 (continued)

No.	Type	Sort Code/Position						¹⁹ F nmr		Residual	Ref
		1	2	3	4	5	6	Obs	Pred		
161	1	F1	=N-	F1	F1	sM	F1	-94.2	-93.6	-0.6	6
162	1	F1	=N-	F1	Me	F1	F1	-88.8	-89.0	0.2	15
163	1	F1	=N-	F1	NH	NH	F1	-104.0	-106.0	2.0	13
164	1	F1	=N-	F1	NH	NH	F1	-106.1	-106.0	-0.1	12
165	1	F1	=N-	F1	OH	F1	F1	-97.0	-98.6	1.6	13
166	1	F1	=N-	F1	OX	NF	F1	-89.0	-92.6	3.6	13
167	1	F1	=N-	F1	OX	NF	F1	-90.8	-92.6	1.8	12
168	1	F1	=N-	F1	Rj	F1	C1	-69.4	-71.1	1.7	11
169	1	F1	=N-	F1	Rj	F1	F1	-90.8	-94.0	3.2	11
170	1	F1	=N-	Me	F1	Me	F1	-90.9	-96.6	5.7	6
171	1	F1	=N-	NH	F1	AA	F1	-94.4	-97.1	2.7	12
172	1	F1	=N-	NH	F1	Br	F1	-92.2	-93.6	1.4	12
173	1	F1	=N-	NH	F1	Io	F1	-93.0	-93.6	0.6	13
174	1	F1	=N-	NH	F1	Io	F1	-94.1	-93.6	-0.5	6
175	1	F1	=N-	NH	F1	Me	F1	-94.9	-97.5	2.6	6
176	1	F1	=N-	NH	F1	NF	F1	-89.6	-93.4	3.8	12
177	1	F1	=N-	NH	F1	NF	NH	-90.2	-93.0	2.8	12
178	1	F1	=N-	NH	F1	NH	F1	-96.4	-98.4	2.0	6
179	1	F1	=N-	NH	F1	NH	F1	-99.1	-98.4	-0.7	12
180	1	F1	=N-	NH	F1	NH	NH	-100.1	-98.1	-2.0	12
181	1	F1	=N-	NM	C1	F1	C1	-71.5	-64.0	-7.5	7
182	1	F1	=N-	NM	F1	F1	C1	-73.4	-69.8	-3.6	7
183	1	F1	=N-	NM	F1	NM	F1	-91.7	-93.4	1.7	12
184	1	F1	=N-	NM	F1	NM	F1	-92.0	-93.4	1.4	13
185	1	F1	=N-	OE	F1	Me	F1	-95.1	-96.3	1.2	6
186	1	F1	=N-	OH	C1	F1	C1	-73.3	-65.2	-8.1	12
187	1	F1	=N-	OH	C1	F1	F1	-90.2	-88.1	-2.1	12
188	1	F1	=N-	OH	F1	Br	F1	-92.2	-92.4	0.2	12
189	1	F1	=N-	OH	F1	F1	C1	-75.9	-71.1	-4.8	12
190	1	F1	=N-	OH	F1	F1	C1	-80.0	-71.1	-8.9	13
191	1	F1	=N-	OH	F1	F1	F1	-91.5	-93.9	2.4	12
192	1	F1	=N-	OH	F1	Io	F1	-94.0	-92.3	-1.7	13
193	1	F1	=N-	OH	F1	Io	F1	-95.1	-92.3	-2.8	6
194	1	F1	=N-	OH	F1	OH	F1	-94.9	-95.9	1.0	12
195	1	F1	=N-	OX	Co	Co	F1	-82.9	-81.0	-1.9	13
196	1	F1	=N-	OX	F1	AA	F1	-95.4	-95.1	-0.3	13
197	1	F1	=N-	OX	F1	Br	F1	-92.2	-91.6	-0.6	12
198	1	F1	=N-	OX	F1	Cj	F1	-91.5	-91.5	0.0	6
199	1	F1	=N-	OX	F1	Cj	F1	-91.7	-91.5	-0.2	16
200	1	F1	=N-	OX	F1	F1	F1	-90.7	-93.1	2.4	13
201	1	F1	=N-	OX	F1	F1	F1	-91.4	-93.1	1.7	6
202	1	F1	=N-	OX	F1	F1	F1	-93.4	-93.1	-0.3	12
203	1	F1	=N-	OX	F1	Io	C1	-74.2	-68.7	-5.5	10
204	1	F1	=N-	OX	F1	Io	F1	-91.0	-91.5	0.5	13
205	1	F1	=N-	OX	F1	Io	F1	-92.6	-91.5	-1.1	6
206	1	F1	=N-	OX	F1	Me	F1	-94.9	-95.4	0.5	13
207	1	F1	=N-	OX	F1	NF	F1	-88.0	-91.3	3.3	13
208	1	F1	=N-	OX	F1	NH	F1	-97.0	-96.3	-0.7	13
209	1	F1	=N-	OX	F1	NH	F1	-99.1	-96.3	-2.8	12
210	1	F1	=N-	OX	F1	NM	F1	-90.6	-93.9	3.3	7
211	1	F1	=N-	OX	F1	OX	F1	-93.4	-94.3	0.9	16
212	1	F1	=N-	OX	F1	OX	F1	-94.4	-94.3	-0.1	12
213	1	F1	=N-	OX	F1	OX	F1	-94.9	-94.3	-0.6	12
214	1	F1	=N-	VI	C1	F1	C1	-71.4	-67.3	-4.1	7
215	1	F1	=N-	VI	F1	F1	C1	-73.2	-73.2	0.0	7
216	2	F1	AA	=N-	AA	AA	AA	-125.6	-116.9	-8.7	12
217	2	F1	AA	=N-	AA	AA	AA	-131.5	-116.9	-14.6	8
218	2	F1	AA	=N-	C1	AA	AA	-123.1	-117.6	-5.5	8
219	2	F1	AA	=N-	F1	AA	AA	-133.8	-123.5	-10.3	14
220	2	F1	AA	=N-	F1	F1	CI	-133.5	-125.0	-8.5	15
221	2	F1	AA	=N-	F1	F1	F1	-148.8	-144.7	-4.1	12
222	2	F1	AA	AA	AA	=N-	C1	-135.2	-117.2	-18.0	8
223	2	F1	AA	AA	AA	=N-	F1	-140.4	-140.1	-0.3	14

(continued)

TABLE 1 (continued)

No.	Type	Sort Code/Position						¹⁹ F nmr		Residual	Ref
		1	2	3	4	5	6	Obs	Pred		
224	2	F1	AA	AA	F1	=N-	F1	-147.4	-146.7	-0.7	12
225	2	F1	AA	CI	F1	=N-	F1	-144.2	-142.9	-1.3	15
226	2	F1	AA	Cl	F1	=N-	F1	-141.2	-143.2	2.0	12
227	2	F1	AA	F1	F1	=N-	F1	-141.0	-144.7	3.7	12
228	2	F1	AA	F1	F1	=N-	NH	-142.1	-144.4	2.3	12
229	2	F1	AA	F1	F1	=N-	OX	-133.6	-140.4	6.8	13
230	2	F1	AA	F1	NH	=N-	F1	-155.6	-155.5	-0.1	12
231	2	F1	AA	F1	OX	=N-	F1	-149.5	-147.2	-2.3	13
232	2	F1	Br	=N-	Br	F1	Br	-103.7	-99.6	-4.1	9
233	2	F1	Br	=N-	Br	F1	Io	-91.6	-87.3	-4.3	9
234	2	F1	Br	=N-	F1	F1	F1	-129.7	-137.1	7.4	7
235	2	F1	Br	=N-	F1	F1	F1	-133.6	-137.1	3.5	6
236	2	F1	Br	=N-	OH	F1	Br	-117.1	-113.0	-4.1	9
237	2	F1	Br	Br	OX	=N-	F1	-145.1	-138.0	-7.1	12
238	2	F1	Br	F1	Br	=N-	OH	-130.9	-130.7	-0.2	9
239	2	F1	Br	F1	F1	=N-	F1	-135.0	-137.1	2.1	13
240	2	F1	Br	F1	F1	=N-	NH	-137.8	-136.8	-1.0	12
241	2	F1	Br	F1	F1	=N-	OH	-135.7	-137.4	1.7	12
242	2	F1	Br	F1	F1	=N-	OX	-135.2	-132.8	-2.4	12
243	2	F1	Br	F1	NH	=N-	F1	-152.4	-147.9	-4.5	12
244	2	F1	Br	F1	OH	=N-	F1	-146.3	-143.8	-2.5	12
245	2	F1	Br	F1	OX	=N-	F1	-145.1	-139.6	-5.5	13
246	2	F1	Br	F1	OX	=N-	OX	-144.2	-135.3	-8.9	12
247	2	F1	CB	F1	F1	=N-	F1	-143.0	-147.9	4.9	6
248	2	F1	CF	=N-	F1	F1	F1	-141.5	-144.3	2.8	7
249	2	F1	CF	=N-	F1	F1	F1	-143.3	-144.3	1.0	12
250	2	F1	CF	=N-	F1	F1	F1	-144.0	-144.3	0.3	13
251	2	F1	CF	AA	F1	=N-	F1	-147.8	-146.2	-1.6	15
252	2	F1	CF	F1	F1	=N-	F1	-142.1	-144.3	2.2	12
253	2	F1	CF	F1	F1	=N-	F1	-143.0	-144.3	1.3	13
254	2	F1	CI	=N-	F1	F1	F1	-147.1	-148.2	1.1	15
255	2	F1	CI	F1	AA	=N-	F1	-139.8	-141.6	1.8	15
256	2	F1	CI	F1	F1	=N-	F1	-144.4	-148.2	3.8	15
257	2	F1	CL	AA	F1	=N-	F1	-152.6	-146.7	-5.9	15
258	2	F1	CR	F1	F1	=N-	F1	-140.7	-149.0	8.3	6
259	2	F1	CT	F1	F1	=N-	F1	-143.1	-152.4	9.3	6
260	2	F1	Cl	=N-	Cl	F1	Cl	-117.2	-116.3	-0.9	9
261	2	F1	Cl	=N-	F1	F1	Cl	-120.4	-122.2	1.8	11
262	2	F1	Cl	=N-	F1	F1	F1	-141.6	-145.0	3.4	10
263	2	F1	Cl	Cl	F1	=N-	F1	-140.9	-143.5	2.6	11
264	2	F1	Cl	F1	Cl	=N-	F1	-138.3	-139.2	0.9	11
265	2	F1	Cl	F1	F1	=N-	F1	-141.3	-145.0	3.7	9
266	2	F1	Cl	F1	F1	=N-	F1	-141.5	-145.0	3.5	10
267	2	F1	Cl	F1	F1	=N-	F1	-142.4	-145.0	2.6	11
268	2	F1	Cm	=N-	F1	F1	Me	-144.0	-132.8	-11.2	13
269	2	F1	Cm	F1	F1	=N-	F1	-146.8	-152.1	5.3	6
270	2	F1	Cm	F1	F1	=N-	F1	-147.0	-152.1	5.1	13
271	2	F1	Cm	F1	F1	=N-	F1	-148.9	-152.1	3.2	6
272	2	F1	Cn	F1	F1	=N-	F1	-142.1	-144.2	2.1	6
273	2	F1	Co	Co	F1	=N-	F1	-144.4	-143.2	-1.2	13
274	2	F1	Co	Co	OX	=N-	F1	-154.8	-145.7	-9.1	13
275	2	F1	Co	F1	F1	=N-	F1	-139.6	-142.4	2.8	12
276	2	F1	Co	F1	F1	=N-	F1	-140.3	-142.4	2.1	13
277	2	F1	DB	F1	F1	=N-	F1	-140.1	-134.8	-5.3	6
278	2	F1	DE	=N-	F1	F1	F1	-146.7	-157.3	10.6	15
279	2	F1	DE	AA	AA	=N-	F1	-147.1	-152.7	5.6	15
280	2	F1	F1	=N-	AA	AA	F1	-165.4	-163.3	-2.1	14
281	2	F1	F1	=N-	AA	CI	F1	-163.9	-159.5	-4.4	15
282	2	F1	F1	=N-	AA	F1	F1	-157.9	-161.3	3.4	12
283	2	F1	F1	=N-	Br	F1	F1	-155.4	-161.2	5.8	7
284	2	F1	F1	=N-	CF	F1	F1	-149.4	-155.5	6.1	7
285	2	F1	F1	=N-	CF	F1	F1	-151.4	-155.5	4.1	12
286	2	F1	F1	=N-	CF	F1	F1	-152.0	-155.5	3.5	13

(continued)

TABLE 1 (continued)

No.	Type	Sort Code/Position						¹⁹ F nmr		Residual	Ref
		1	2	3	4	5	6	Obs	Pred		
287	2	F1	F1	=N-	CI	F1	F1	-153.4	-154.6	1.2	15
288	2	F1	F1	=N-	C1	F1	F1	-160.8	-162.0	1.2	10
289	2	F1	F1	=N-	Cm	F1	Me	-131.0	-131.7	0.7	13
290	2	F1	F1	=N-	DE	F1	F1	-156.2	-148.6	-7.6	15
291	2	F1	F1	=N-	F1	CF	F1	-165.7	-166.8	1.1	12
292	2	F1	F1	=N-	F1	CF	F1	-166.0	-166.8	0.8	13
293	2	F1	F1	=N-	F1	CI	F1	-166.2	-166.1	-0.1	15
294	2	F1	F1	=N-	F1	C1	F1	-161.4	-166.4	5.0	12
295	2	F1	F1	=N-	F1	C1	F1	-163.4	-166.4	3.0	11
296	2	F1	F1	=N-	F1	C1	F1	-163.9	-166.4	2.5	8
297	2	F1	F1	=N-	F1	C1	F1	-164.9	-166.4	1.5	16
298	2	F1	F1	=N-	F1	C1	Io	-121.0	-123.3	2.3	13
299	2	F1	F1	=N-	F1	C1	Io	-122.5	-123.3	0.8	6
300	2	F1	F1	=N-	F1	C1	NH	-165.3	-166.1	0.8	16
301	2	F1	F1	=N-	F1	C1	NH	-166.7	-166.1	-0.6	13
302	2	F1	F1	=N-	F1	C1	NM	-156.4	-156.7	0.3	7
303	2	F1	F1	=N-	F1	C1	OH	-165.8	-166.7	0.9	12
304	2	F1	F1	=N-	F1	C1	VI	-155.9	-154.7	-1.2	7
305	2	F1	F1	=N-	F1	Co	F1	-167.0	-168.7	1.7	13
306	2	F1	F1	=N-	F1	DE	F1	-167.1	-167.5	0.4	14
307	2	F1	F1	=N-	F1	F1	F1	-160.5	-167.9	7.4	9
308	2	F1	F1	=N-	F1	F1	F1	-160.9	-167.9	7.0	11
309	2	F1	F1	=N-	F1	F1	F1	-162.0	-167.9	5.9	12
310	2	F1	F1	=N-	F1	F1	F1	-162.4	-167.9	5.5	15
311	2	F1	F1	=N-	F1	F1	F1	-162.5	-167.9	5.4	12
312	2	F1	F1	=N-	F1	F1	F1	-163.0	-167.9	4.9	13
313	2	F1	F1	=N-	F1	F1	F1	-163.2	-167.9	4.7	12
314	2	F1	F1	=N-	F1	F1	F1	-163.8	-167.9	4.1	12
315	2	F1	F1	=N-	F1	F1	Io	-122.0	-124.8	2.8	13
316	2	F1	F1	=N-	F1	F1	Io	-123.2	-124.8	1.6	6
317	2	F1	F1	=N-	F1	F1	Me	-144.0	-148.6	4.6	13
318	2	F1	F1	=N-	F1	F1	Me	-147.8	-148.6	0.8	6
319	2	F1	F1	=N-	F1	F1	NF	-148.0	-150.3	2.3	13
320	2	F1	F1	=N-	F1	F1	NF	-148.3	-150.3	2.0	12
321	2	F1	F1	=N-	F1	F1	NF	-149.6	-150.3	0.7	12
322	2	F1	F1	=N-	F1	F1	NH	-161.7	-167.6	5.9	6
323	2	F1	F1	=N-	F1	F1	NH	-165.0	-167.6	2.6	6
324	2	F1	F1	=N-	F1	F1	NH	-165.9	-167.6	1.7	13
325	2	F1	F1	=N-	F1	F1	NH	-166.6	-167.6	1.0	12
326	2	F1	F1	=N-	F1	F1	NM	-157.2	-158.2	1.0	12
327	2	F1	F1	=N-	F1	F1	NM	-158.0	-158.2	0.2	13
328	2	F1	F1	=N-	F1	F1	NN	-162.6	-160.8	-1.8	12
329	2	F1	F1	=N-	F1	F1	NW	-148.6	-156.1	7.5	11
330	2	F1	F1	=N-	F1	F1	OH	-162.6	-168.2	5.6	12
331	2	F1	F1	=N-	F1	F1	OH	-164.7	-168.2	3.5	12
332	2	F1	F1	=N-	F1	F1	OX	-156.6	-163.6	7.0	16
333	2	F1	F1	=N-	F1	F1	OX	-160.7	-163.6	2.9	12
334	2	F1	F1	=N-	F1	F1	OX	-161.0	-163.6	2.6	12
335	2	F1	F1	=N-	F1	F1	OX	-161.7	-163.6	1.9	6
336	2	F1	F1	=N-	F1	F1	OX	-163.7	-163.6	-0.1	12
337	2	F1	F1	=N-	F1	F1	Rk	-138.0	-135.9	-2.1	7
338	2	F1	F1	=N-	F1	F1	SH	-141.4	-134.7	-6.7	7
339	2	F1	F1	=N-	F1	F1	sM	-130.0	-130.9	0.9	13
340	2	F1	F1	=N-	F1	F1	sM	-131.9	-130.9	-1.0	6
341	2	F1	F1	=N-	F1	Me	F1	-168.8	-170.2	1.4	15
342	2	F1	F1	=N-	F1	NH	NF	-154.7	-153.6	-1.1	12
343	2	F1	F1	=N-	F1	NH	NH	-169.0	-170.8	1.8	13
344	2	F1	F1	=N-	F1	NH	NH	-171.2	-170.8	-0.4	12
345	2	F1	F1	=N-	F1	OH	F1	-165.0	-169.9	4.9	13
346	2	F1	F1	=N-	F1	OX	NF	-151.0	-151.5	0.5	13
347	2	F1	F1	=N-	F1	OX	NF	-152.4	-151.5	-0.9	12
348	2	F1	F1	=N-	F1	Rj	F1	-169.9	-174.5	4.6	11
349	2	F1	F1	=N-	Me	F1	Me	-144.2	-145.6	1.4	6

(continued)

TABLE 1 (continued)

No.	Type	Sort Code/Position						¹⁹ F nmr		Residual	Ref
		1	2	3	4	5	6	Obs	Pred		
350	2	F1	F1	=N-	NH	F1	Io	-139.0	-135.6	-3.4	13
351	2	F1	F1	=N-	NH	F1	Io	-140.7	-135.6	-5.1	6
352	2	F1	F1	=N-	NH	F1	Me	-160.1	-159.4	-0.7	6
353	2	F1	F1	=N-	NH	F1	NF	-167.6	-161.2	-6.4	12
354	2	F1	F1	=N-	NH	F1	NH	-175.2	-178.4	3.2	6
355	2	F1	F1	=N-	NH	F1	NH	-178.0	-178.4	0.4	12
356	2	F1	F1	=N-	NM	F1	NM	-163.3	-159.2	-4.1	12
357	2	F1	F1	=N-	NM	F1	NM	-164.0	-159.2	-4.8	13
358	2	F1	F1	=N-	OE	F1	Me	-154.1	-150.6	-3.5	6
359	2	F1	F1	=N-	OH	C1	F1	-173.6	-173.1	-0.5	12
360	2	F1	F1	=N-	OH	F1	F1	-173.6	-174.6	1.0	12
361	2	F1	F1	=N-	OH	F1	Io	-135.0	-131.5	-3.5	13
362	2	F1	F1	=N-	OH	F1	Io	-136.8	-131.5	-5.3	6
363	2	F1	F1	=N-	OH	F1	OH	-163.9	-174.9	11.0	12
364	2	F1	F1	=N-	OX	F1	F1	-171.3	-170.4	-0.9	13
365	2	F1	F1	=N-	OX	F1	F1	-171.9	-170.4	-1.5	6
366	2	F1	F1	=N-	OX	F1	F1	-173.9	-170.4	-3.5	12
367	2	F1	F1	=N-	OX	F1	Io	-131.0	-127.2	-3.8	13
368	2	F1	F1	=N-	OX	F1	Io	-132.7	-127.2	-5.5	6
369	2	F1	F1	=N-	OX	F1	Me	-160.1	-151.0	-9.1	13
370	2	F1	F1	=N-	OX	F1	NF	-159.0	-152.8	-6.2	13
371	2	F1	F1	=N-	OX	F1	NF	-160.7	-152.8	-7.9	12
372	2	F1	F1	=N-	OX	F1	NH	-171.0	-170.0	-1.0	13
373	2	F1	F1	=N-	OX	F1	NH	-173.2	-170.0	-3.2	12
374	2	F1	F1	=N-	OX	F1	NM	-151.4	-160.7	9.3	7
375	2	F1	F1	=N-	OX	F1	OX	-161.1	-166.1	5.0	12
376	2	F1	F1	=N-	OX	F1	OX	-161.7	-166.1	4.4	12
377	2	F1	F1	=N-	OX	F1	OX	-167.2	-166.1	-1.1	16
378	2	F1	F1	=N-	OX	F1	OX	-168.7	-166.1	-2.6	13
379	2	F1	F1	C1	F1	=N-	NM	-161.0	-156.7	-4.3	7
380	2	F1	F1	C1	F1	=N-	OH	-165.8	-166.7	0.9	12
381	2	F1	F1	C1	F1	=N-	VI	-157.8	-154.7	-3.1	7
382	2	F1	F1	F1	F1	=N-	OH	-164.7	-168.2	3.5	12
383	2	F1	F1	F1	F1	=N-	OX	-163.9	-163.6	-0.3	13
384	2	F1	F1	F1	F1	=N-	OX	-164.9	-163.6	-1.3	6
385	2	F1	F1	F1	F1	=N-	OX	-166.5	-163.6	-2.9	12
386	2	F1	Io	C1	F1	=N-	OX	-119.1	-119.0	-0.1	10
387	2	F1	Io	F1	F1	=N-	NH	-121.0	-124.4	3.4	13
388	2	F1	Io	F1	F1	=N-	NH	-122.9	-124.4	1.5	6
389	2	F1	Io	F1	F1	=N-	OH	-124.0	-125.1	1.1	13
390	2	F1	Io	F1	F1	=N-	OH	-125.4	-125.1	-0.3	6
391	2	F1	Io	F1	F1	=N-	OX	-121.0	-120.5	-0.5	13
392	2	F1	Io	F1	F1	=N-	OX	-122.3	-120.5	-1.8	6
393	2	F1	Io	F1	OX	=N-	OX	-134.0	-123.0	-11.0	13
394	2	F1	Io	F1	OX	=N-	OX	-135.5	-123.0	-12.5	6
395	2	F1	Me	=N-	F1	F1	Me	-128.6	-129.2	0.6	13
396	2	F1	Me	=N-	F1	F1	Me	-128.7	-129.2	0.5	6
397	2	F1	Me	F1	F1	=N-	NH	-145.8	-148.2	2.4	6
398	2	F1	Me	F1	F1	=N-	OE	-144.3	-142.8	-1.5	6
399	2	F1	Me	F1	F1	=N-	OX	-145.8	-144.3	-1.5	13
400	2	F1	Me	F1	OE	=N-	OE	-152.5	-144.9	-7.6	6
401	2	F1	NF	F1	F1	=N-	NH	-152.2	-150.0	-2.2	12
402	2	F1	NF	F1	F1	=N-	OX	-148.0	-146.1	-1.9	13
403	2	F1	NF	F1	F1	=N-	OX	-149.9	-146.1	-3.8	12
404	2	F1	NH	=N-	F1	F1	NH	-164.1	-167.3	3.2	6
405	2	F1	NH	=N-	F1	F1	NH	-166.8	-167.3	0.5	12
406	2	F1	NH	=N-	F1	NH	NH	-171.2	-170.5	-0.7	12
407	2	F1	NH	F1	F1	=N-	OX	-165.0	-163.3	-1.7	13
408	2	F1	NH	F1	F1	=N-	OX	-167.3	-163.3	-4.0	12
409	2	F1	NM	=N-	F1	F1	NM	-144.0	-148.5	4.5	12
410	2	F1	NM	=N-	F1	F1	NM	-145.0	-148.5	3.5	13
411	2	F1	NM	F1	F1	=N-	OX	-145.8	-153.9	8.1	7
412	2	F1	OH	=N-	F1	F1	OH	-171.9	-168.5	-3.4	12

(continued)

TABLE 1 (continued)

No.	Type	Sort Code/Position						19F nmr		Residual	Ref
		1	2	3	4	5	6	Obs	Pred		
413	2	F1	OX	=N-	F1	F1	OX	-160.2	-159.4	-0.8	16
414	2	F1	OX	=N-	F1	F1	OX	-161.7	-159.4	-2.3	13
415	2	F1	OX	=N-	F1	F1	OX	-168.1	-159.4	-8.7	12
416	2	F1	OX	=N-	F1	F1	OX	-168.7	-159.4	-9.3	12
417	2	F1	OX	=N-	OX	F1	OX	-167.0	-161.8	-5.2	12
418	3	F1	AA	AA	=N-	F1	F1	-123.1	-116.8	-6.3	14
419	3	F1	AA	F1	=N-	F1	AA	-93.1	-91.7	-1.4	13
420	3	F1	AA	F1	=N-	F1	C1	-94.6	-92.0	-2.6	13
421	3	F1	CF	F1	=N-	F1	F1	-113.1	-114.5	1.4	12
422	3	F1	CF	F1	=N-	F1	F1	-114.0	-114.5	0.5	13
423	3	F1	CI	AA	=N-	F1	F1	-127.4	-120.3	-7.1	15
424	3	F1	CI	F1	=N-	F1	F1	-116.7	-118.4	1.7	15
425	3	F1	C1	C1	=N-	F1	C1	-92.2	-90.9	-1.3	13
426	3	F1	C1	F1	=N-	F1	C1	-92.7	-92.4	-0.3	16
427	3	F1	C1	F1	=N-	F1	C1	-93.4	-92.4	-1.0	11
428	3	F1	C1	F1	=N-	F1	C1	-94.0	-92.4	-1.6	12
429	3	F1	C1	F1	=N-	F1	F1	-111.6	-115.2	3.6	12
430	3	F1	C1	F1	=N-	F1	F1	-113.5	-115.2	1.7	11
431	3	F1	C1	F1	=N-	F1	F1	-114.3	-115.2	0.9	8
432	3	F1	C1	F1	=N-	F1	F1	-116.4	-115.2	-1.2	16
433	3	F1	C1	F1	=N-	F1	Rj	-98.7	-100.8	2.1	11
434	3	F1	C1	F1	=N-	NM	C1	-98.2	-93.1	-5.1	7
435	3	F1	C1	F1	=N-	NM	F1	-124.2	-116.0	-8.2	7
436	3	F1	C1	F1	=N-	OH	C1	-99.5	-94.4	-5.1	12
437	3	F1	C1	F1	=N-	OH	F1	-120.4	-117.2	-3.2	12
438	3	F1	C1	F1	=N-	VI	C1	-98.3	-96.5	-1.8	7
439	3	F1	C1	F1	=N-	VI	F1	-123.4	-119.4	-4.0	7
440	3	F1	C1	OH	=N-	F1	F1	-117.9	-117.2	-0.7	12
441	3	F1	Co	F1	=N-	F1	F1	-112.4	-112.6	0.2	13
442	3	F1	DE	F1	=N-	F1	F1	-118.0	-127.5	9.5	14
443	3	F1	F1	AA	=N-	F1	F1	-140.5	-140.0	-0.5	12
444	3	F1	F1	Br	=N-	F1	F1	-129.7	-136.5	6.8	6
445	3	F1	F1	Br	=N-	F1	F1	-133.6	-136.5	2.9	7
446	3	F1	F1	CF	=N-	F1	F1	-134.9	-137.0	2.1	7
447	3	F1	F1	CF	=N-	F1	F1	-136.8	-137.0	0.2	12
448	3	F1	F1	CF	=N-	F1	F1	-137.0	-137.0	0.0	13
449	3	F1	F1	CI	=N-	F1	F1	-137.1	-136.3	-0.8	15
450	3	F1	F1	C1	=N-	F1	F1	-138.3	-136.6	-1.7	10
451	3	F1	F1	DE	=N-	F1	F1	-139.3	-137.6	-1.7	15
452	3	F1	F1	F1	=N-	F1	F1	-132.7	-138.1	5.4	9
453	3	F1	F1	F1	=N-	F1	F1	-132.8	-138.1	5.3	11
454	3	F1	F1	F1	=N-	F1	F1	-134.0	-138.1	4.1	12
455	3	F1	F1	F1	=N-	F1	F1	-134.1	-138.1	4.0	13
456	3	F1	F1	F1	=N-	F1	F1	-134.3	-138.1	3.8	15
457	3	F1	F1	F1	=N-	F1	F1	-135.0	-138.1	3.1	13
458	3	F1	F1	F1	=N-	F1	F1	-135.4	-138.1	2.7	12
459	3	F1	F1	F1	=N-	F1	F1	-136.4	-138.1	1.7	12
460	3	F1	F1	F1	=N-	F1	F1	-141.3	-138.1	-3.2	12
461	3	F1	F1	F1	=N-	F1	F1	-144.2	-138.1	-6.1	12
462	3	F1	F1	F1	=N-	F1	Me	-119.5	-118.7	-0.8	15
463	3	F1	F1	F1	=N-	F1	OH	-134.0	-138.4	4.4	13
464	3	F1	F1	F1	=N-	F1	Rj	-119.7	-123.7	4.0	11
465	3	F1	F1	F1	=N-	OH	F1	-141.3	-140.1	-1.2	13
466	3	F1	F1	F1	=N-	OX	F1	-140.3	-139.3	-1.0	13
467	3	F1	F1	F1	=N-	OX	F1	-140.9	-139.3	-1.6	6
468	3	F1	F1	F1	=N-	OX	F1	-142.9	-139.3	-3.6	12
469	4	F1	=N-	=N-	F1	C1	C1	-81.3	-71.6	-9.7	8
470	4	F1	=N-	=N-	F1	F1	F1	-85.3	-96.0	10.7	12
471	4	F1	=N-	=N-	F1	F1	F1	-91.2	-96.0	4.8	6
472	4	F1	=N-	=N-	F1	F1	NH	-92.1	-95.7	3.6	6
473	4	F1	=N-	=N-	F1	F1	OX	-89.2	-91.7	2.5	6
474	4	F1	=N-	=N-	F1	NH	F1	-102.8	-99.2	-3.6	6
475	4	F1	=N-	=N-	F1	OX	F1	-97.4	-97.2	-0.2	6

(continued)

TABLE 1 (continued)

No.	Type	Sort Code/Position						19F nmr		Residual	Ref
		1	2	3	4	5	6	Obs	Pred		
476	4	F1	=N-	=N-	F1	OX	OX	-92.3	-92.9	0.6	6
477	4	F1	=N-	=N-	OX	F1	F1	-98.2	-98.5	0.3	6
478	4	F1	=N-	=N-	OX	F1	OX	-96.2	-94.2	-2.0	6
479	4	F1	=N-	=N-	OX	OX	F1	-104.4	-99.6	-4.8	6
480	4	F1	=N-	=N-	OX	OX	OX	-97.3	-95.4	-1.9	6
481	5	F1	F1	=N-	=N-	F1	F1	-144.8	-154.8	10.0	6
482	5	F1	F1	=N-	=N-	F1	F1	-146.9	-154.8	7.9	12
483	5	F1	F1	=N-	=N-	F1	F1	-157.9	-154.8	-3.1	12
484	5	F1	F1	=N-	=N-	F1	NH	-154.9	-154.5	-0.4	6
485	5	F1	F1	=N-	=N-	F1	NH	-156.9	-154.5	-2.4	12
486	5	F1	F1	=N-	=N-	F1	OX	-147.9	-150.6	2.7	6
487	5	F1	F1	=N-	=N-	OX	F1	-153.8	-156.0	2.2	6
488	5	F1	F1	=N-	=N-	OX	OX	-156.9	-151.8	-5.1	6
489	5	F1	F1	F1	=N-	=N-	OX	-148.0	-150.6	2.6	6
490	5	F1	F1	OX	=N-	=N-	OX	-155.1	-151.8	-3.3	6
491	5	F1	OX	=N-	=N-	F1	OX	-151.1	-146.3	-4.8	6
492	5	F1	OX	=N-	=N-	OX	OX	-153.8	-147.5	-6.3	6
493	6	F1	=N-	AA	F1	AA	=N-	-52.0	-52.8	0.8	8
494	6	F1	=N-	AA	F1	AA	=N-	-53.7	-52.8	-0.9	6
495	6	F1	=N-	AA	F1	F1	=N-	-49.0	-50.8	1.8	14
496	6	F1	=N-	AA	F1	F1	=N-	-50.5	-50.8	0.3	6
497	6	F1	=N-	CF	F1	F1	=N-	-46.7	-47.7	1.0	8
498	6	F1	=N-	CF	F1	OX	=N-	-49.1	-48.9	-0.2	8
499	6	F1	=N-	C1	CN	C1	=N-	-35.5	-29.2	-6.3	8
500	6	F1	=N-	C1	CN	F1	=N-	-32.5	-30.7	-1.8	8
501	6	F1	=N-	F1	AA	F1	=N-	-41.0	-42.3	1.3	8
502	6	F1	=N-	F1	AA	F1	=N-	-42.0	-42.3	0.3	8
503	6	F1	=N-	F1	AA	F1	=N-	-43.3	-42.3	-1.0	6
504	6	F1	=N-	F1	AA	NH	=N-	-47.3	-45.5	-1.8	8
505	6	F1	=N-	F1	AA	OX	=N-	-44.1	-43.5	-0.6	8
506	6	F1	=N-	F1	CF	F1	=N-	-36.5	-36.4	-0.1	8
507	6	F1	=N-	F1	CF	OX	=N-	-39.9	-37.6	-2.3	8
508	6	F1	=N-	F1	CN	F1	=N-	-31.7	-32.2	0.5	8
509	6	F1	=N-	F1	C1	F1	=N-	-43.0	-43.0	0.0	13
510	6	F1	=N-	F1	C1	F1	=N-	-44.7	-43.0	-1.7	6
511	6	F1	=N-	F1	C1	NH	=N-	-49.3	-46.2	-3.1	8
512	6	F1	=N-	F1	C1	NZ	=N-	-45.1	-42.1	-3.0	11
513	6	F1	=N-	F1	C1	OX	=N-	-46.6	-44.1	-2.5	8
514	6	F1	=N-	F1	F1	F1	=N-	-46.0	-48.8	2.8	12
515	6	F1	=N-	F1	F1	F1	=N-	-47.9	-48.8	0.9	6
516	6	F1	=N-	F1	F1	NH	=N-	-49.0	-52.1	3.1	11
517	6	F1	=N-	F1	F1	NH	=N-	-50.9	-52.1	1.2	6
518	6	F1	=N-	F1	F1	NM	=N-	-47.0	-49.6	2.6	12
519	6	F1	=N-	F1	F1	NM	=N-	-48.5	-49.6	1.1	6
520	6	F1	=N-	F1	F1	NZ	=N-	-48.9	-48.0	-0.9	11
521	6	F1	=N-	F1	F1	Nm	=N-	-49.0	-50.1	1.1	12
522	6	F1	=N-	F1	F1	Nm	=N-	-50.1	-50.1	0.0	6
523	6	F1	=N-	F1	F1	OH	=N-	-52.0	-50.8	-1.2	11
524	6	F1	=N-	F1	F1	OH	=N-	-53.1	-50.8	-2.3	6
525	6	F1	=N-	F1	F1	OX	=N-	-47.0	-50.0	3.0	13
526	6	F1	=N-	F1	F1	OX	=N-	-48.9	-50.0	1.1	6
527	6	F1	=N-	F1	F1	Ra	=N-	-48.7	-54.0	5.3	6
528	6	F1	=N-	F1	NF	F1	=N-	-34.5	-32.7	-1.8	8
529	6	F1	=N-	NH	F1	NH	=N-	-52.0	-55.3	3.3	12
530	6	F1	=N-	NH	F1	NH	=N-	-53.7	-55.3	1.6	6
531	6	F1	=N-	NH	NF	NH	=N-	-41.5	-39.1	-2.4	8
532	6	F1	=N-	NM	F1	NM	=N-	-49.0	-50.3	1.3	7
533	6	F1	=N-	NM	F1	NM	=N-	-50.5	-50.3	-0.2	6
534	6	F1	=N-	NZ	C1	NZ	=N-	-43.9	-41.2	-2.7	11
535	6	F1	=N-	NZ	F1	NZ	=N-	-48.1	-47.1	-1.0	11
536	6	F1	=N-	Nm	F1	Nm	=N-	-50.0	-51.3	1.3	13
537	6	F1	=N-	Nm	F1	Nm	=N-	-51.9	-51.3	-0.6	6
538	6	F1	=N-	OX	CN	OX	=N-	-37.9	-34.5	-3.4	8

(continued)

TABLE 1 (continued)

No.	Type	Sort Code/Position						¹⁹ F nmr		Residual	Ref
		1	2	3	4	5	6	Obs	Pred		
539	6	F1	=N-	OX	F1	OX	=N-	-47.0	-51.2	4.2	6
540	6	F1	=N-	OX	F1	OX	=N-	-48.7	-51.2	2.5	6
541	7	F1	=N-	AA	=N-	F1	F1	-79.0	-83.0	4.0	6
542	7	F1	=N-	AA	=N-	F1	F1	-80.5	-83.0	2.5	6
543	7	F1	=N-	CF	=N-	F1	F1	-75.9	-80.0	4.1	8
544	7	F1	=N-	C1	=N-	C1	CN	-50.9	-48.0	-2.9	8
545	7	F1	=N-	F1	=N-	AA	F1	-75.0	-83.0	8.0	11
546	7	F1	=N-	F1	=N-	AA	F1	-77.0	-83.0	6.0	6
547	7	F1	=N-	F1	=N-	CF	F1	-70.6	-80.0	9.4	8
548	7	F1	=N-	F1	=N-	C1	CN	-46.9	-49.5	2.6	8
549	7	F1	=N-	F1	=N-	F1	AA	-53.0	-57.9	4.9	6
550	7	F1	=N-	F1	=N-	F1	AA	-54.0	-57.9	3.9	6
551	7	F1	=N-	F1	=N-	F1	AA	-54.5	-57.9	3.4	6
552	7	F1	=N-	F1	=N-	F1	CF	-51.1	-57.5	6.4	8
553	7	F1	=N-	F1	=N-	F1	CN	-45.5	-51.0	5.5	8
554	7	F1	=N-	F1	=N-	F1	C1	-56.0	-58.2	2.2	6
555	7	F1	=N-	F1	=N-	F1	C1	-57.5	-58.2	0.7	6
556	7	F1	=N-	F1	=N-	F1	F1	-73.0	-81.1	8.1	6
557	7	F1	=N-	F1	=N-	F1	F1	-74.7	-81.1	6.4	6
558	7	F1	=N-	F1	=N-	F1	F1	-82.3	-81.1	-1.2	6
559	7	F1	=N-	F1	=N-	F1	NF	-55.9	-63.5	7.6	8
560	7	F1	=N-	F1	=N-	NH	AA	-68.7	-61.1	-7.6	8
561	7	F1	=N-	F1	=N-	NH	C1	-70.3	-61.4	-8.9	8
562	7	F1	=N-	F1	=N-	NH	F1	-88.0	-84.3	-3.7	8
563	7	F1	=N-	F1	=N-	NH	F1	-89.7	-84.3	-5.4	6
564	7	F1	=N-	F1	=N-	NM	F1	-87.0	-81.8	-5.2	8
565	7	F1	=N-	F1	=N-	NM	F1	-88.3	-81.8	-6.5	6
566	7	F1	=N-	F1	=N-	NZ	C1	-59.2	-57.3	-1.9	11
567	7	F1	=N-	F1	=N-	NZ	F1	-78.5	-80.2	1.7	11
568	7	F1	=N-	F1	=N-	Nm	F1	-92.0	-82.3	-9.7	6
569	7	F1	=N-	F1	=N-	Nm	F1	-93.1	-82.3	-10.8	6
570	7	F1	=N-	F1	=N-	OH	F1	-85.0	-83.1	-1.9	8
571	7	F1	=N-	F1	=N-	OH	F1	-86.3	-83.1	-3.2	6
572	7	F1	=N-	F1	=N-	OX	AA	-62.9	-59.1	-3.8	8
573	7	F1	=N-	F1	=N-	OX	CF	-59.5	-58.6	-0.9	8
574	7	F1	=N-	F1	=N-	OX	C1	-65.7	-59.4	-6.3	8
575	7	F1	=N-	F1	=N-	OX	F1	-83.0	-82.3	-0.7	8
576	7	F1	=N-	F1	=N-	OX	F1	-84.1	-82.3	-1.8	6
577	7	F1	=N-	F1	=N-	Ra	F1	-88.5	-86.2	-2.3	6
578	7	F1	=N-	NH	=N-	F1	AA	-59.9	-61.1	1.2	8
579	7	F1	=N-	NH	=N-	F1	C1	-65.1	-61.4	-3.7	8
580	7	F1	=N-	NH	=N-	NH	CN	-58.5	-57.5	-1.0	8
581	7	F1	=N-	OE	=N-	OE	AA	-63.0	-62.0	-1.0	6
582	7	F1	=N-	OX	=N-	F1	AA	-56.9	-59.1	2.2	8
583	7	F1	=N-	OX	=N-	F1	CF	-55.5	-58.6	3.1	8
584	7	F1	=N-	OX	=N-	F1	C1	-61.1	-59.4	-1.7	8
585	7	F1	=N-	OX	=N-	OX	CN	-57.1	-53.4	-3.7	8
586	8	F1	AA	=N-	F1	=N-	AA	-147.0	-139.2	-7.8	8
587	8	F1	AA	=N-	F1	=N-	AA	-148.4	-139.2	-9.2	6
588	8	F1	AA	=N-	F1	=N-	F1	-160.0	-162.4	2.4	6
589	8	F1	AA	=N-	F1	=N-	F1	-161.5	-162.4	0.9	6
590	8	F1	CF	=N-	F1	=N-	F1	-156.9	-161.9	5.0	8
591	8	F1	CF	=N-	F1	=N-	OX	-156.5	-157.7	1.2	8
592	8	F1	F1	=N-	AA	=N-	F1	-170.0	-179.0	9.0	6
593	8	F1	F1	=N-	AA	=N-	F1	-171.9	-179.0	7.1	6
594	8	F1	F1	=N-	CF	=N-	F1	-167.3	-173.2	5.9	8
595	8	F1	F1	=N-	F1	=N-	F1	-176.0	-185.6	9.6	6
596	8	F1	F1	=N-	F1	=N-	F1	-177.5	-185.6	8.1	6
597	8	F1	F1	=N-	F1	=N-	NH	-180.0	-185.2	5.2	12
598	8	F1	F1	=N-	F1	=N-	NH	-181.7	-185.2	3.5	6
599	8	F1	F1	=N-	F1	=N-	NM	-175.0	-175.9	0.9	6
600	8	F1	F1	=N-	F1	=N-	NM	-176.9	-175.9	-1.0	6
601	8	F1	F1	=N-	F1	=N-	NZ	-168.9	-173.8	4.9	11

(continued)

TABLE 1 (continued)

No.	Type	Sort Code/Position						¹⁹ F nmr		Residual	Ref
		1	2	3	4	5	6	Obs	Pred		
602	8	F1	F1	=N-	F1	=N-	Nm	-183.0	-183.6	0.6	6
603	8	F1	F1	=N-	F1	=N-	Nm	-184.1	-183.6	-0.5	6
604	8	F1	F1	=N-	F1	=N-	OH	-180.0	-185.9	5.9	6
605	8	F1	F1	=N-	F1	=N-	OH	-181.5	-185.9	4.4	6
606	8	F1	F1	=N-	F1	=N-	OX	-179.0	-181.3	2.3	6
607	8	F1	F1	=N-	F1	=N-	OX	-180.3	-181.3	1.0	6
608	8	F1	F1	=N-	F1	=N-	Ra	-179.7	-176.4	-3.3	6
609	8	F1	Io	=N-	NH	=N-	Io	-117.0	-110.1	-6.9	10
610	8	F1	Io	=N-	OX	=N-	Io	-109.5	-101.8	-7.7	10
611	8	F1	Io	=N-	OX	=N-	OX	-145.0	-140.6	-4.4	10
612	8	F1	NH	=N-	F1	=N-	NH	-184.0	-184.9	0.9	16
613	8	F1	NH	=N-	F1	=N-	NH	-185.7	-184.9	-0.8	6
614	8	F1	NM	=N-	F1	=N-	NM	-169.0	-166.2	-2.8	12
615	8	F1	NM	=N-	F1	=N-	NM	-170.7	-166.2	-4.5	6
616	8	F1	NZ	=N-	F1	=N-	NZ	-163.3	-162.0	-1.3	11
617	8	F1	Nm	=N-	F1	=N-	Nm	-187.0	-181.7	-5.3	7
618	8	F1	Nm	=N-	F1	=N-	Nm	-188.7	-181.7	-7.0	6
619	8	F1	OX	=N-	F1	=N-	OX	-180.0	-177.0	-3.0	6
620	8	F1	OX	=N-	F1	=N-	OX	-181.1	-177.0	-4.1	6
621	8	F1	OX	=N-	OX	=N-	OX	-189.7	-179.5	-10.2	6
622	9	F1	=N-	Br	F1	=N-	F1	-91.8	-98.3	6.5	8
623	9	F1	=N-	CA	F1	=N-	F1	-92.0	-101.7	9.7	8
624	9	F1	=N-	Cl	Cl	=N-	Cl	-77.6	-69.7	-7.9	8
625	9	F1	=N-	Cl	F1	=N-	Cl	-79.0	-75.5	-3.5	13
626	9	F1	=N-	Cl	F1	=N-	Cl	-81.0	-75.5	-5.5	8
627	9	F1	=N-	Cl	F1	=N-	F1	-91.1	-98.4	7.3	8
628	9	F1	=N-	Cl	F1	=N-	OX	-91.2	-94.1	2.9	8
629	9	F1	=N-	F1	Br	=N-	F1	-92.2	-93.2	1.0	8
630	9	F1	=N-	F1	CA	=N-	F1	-93.2	-98.1	4.9	8
631	9	F1	=N-	F1	Cl	=N-	Cl	-77.8	-71.2	-6.6	8
632	9	F1	=N-	F1	Cl	=N-	F1	-92.9	-94.0	1.1	8
633	9	F1	=N-	F1	F1	=N-	Br	-77.5	-69.1	-8.4	8
634	9	F1	=N-	F1	F1	=N-	CA	-84.3	-75.6	-8.7	8
635	9	F1	=N-	F1	F1	=N-	Cl	-80.9	-77.0	-3.9	8
636	9	F1	=N-	F1	F1	=N-	F1	-95.0	-99.9	4.9	8
637	9	F1	=N-	F1	F1	=N-	Me	-83.7	-80.6	-3.1	8
638	9	F1	=N-	F1	F1	=N-	NH	-95.5	-99.6	4.1	8
639	9	F1	=N-	F1	F1	=N-	NH	-96.0	-99.6	3.6	8
640	9	F1	=N-	F1	F1	=N-	NN	-94.0	-92.8	-1.2	8
641	9	F1	=N-	F1	F1	=N-	OA	-92.7	-98.1	5.4	8
642	9	F1	=N-	F1	F1	=N-	OE	-93.1	-94.2	1.1	8
643	9	F1	=N-	F1	F1	=N-	OH	-94.3	-100.2	5.9	8
644	9	F1	=N-	F1	F1	=N-	OX	-92.8	-95.6	2.8	8
645	9	F1	=N-	F1	Me	=N-	F1	-94.3	-97.0	2.7	8
646	9	F1	=N-	F1	NH	=N-	F1	-109.0	-110.7	1.7	16
647	9	F1	=N-	F1	NH	=N-	F1	-113.6	-110.7	-2.9	8
648	9	F1	=N-	F1	NN	=N-	F1	-116.1	-105.0	-11.1	8
649	9	F1	=N-	F1	OA	=N-	F1	-99.6	-111.3	11.7	8
650	9	F1	=N-	F1	OE	=N-	F1	-99.6	-101.9	2.3	8
651	9	F1	=N-	F1	OH	=N-	F1	-99.2	-106.6	7.4	8
652	9	F1	=N-	F1	OX	=N-	F1	-106.9	-102.4	-4.5	8
653	9	F1	=N-	Me	F1	=N-	F1	-93.1	-102.2	9.1	8
654	9	F1	=N-	Me	F1	=N-	OX	-90.1	-98.0	7.9	8
655	9	F1	=N-	Me	OX	=N-	F1	-104.7	-104.7	0.0	8
656	9	F1	=N-	NH	F1	=N-	F1	-100.6	-103.1	2.5	8
657	9	F1	=N-	NH	F1	=N-	F1	-101.0	-103.1	2.1	8
658	9	F1	=N-	NN	F1	=N-	F1	-101.9	-103.1	1.2	8
659	9	F1	=N-	OA	F1	=N-	F1	-106.5	-103.6	-2.9	8
660	9	F1	=N-	OA	OA	=N-	F1	-111.1	-114.9	3.8	8
661	9	F1	=N-	OE	F1	=N-	F1	-107.5	-102.0	-5.5	8
662	9	F1	=N-	OH	F1	=N-	F1	-107.2	-101.9	-5.3	8
663	9	F1	=N-	OX	F1	=N-	Cl	-85.5	-78.2	-7.3	8
664	9	F1	=N-	OX	F1	=N-	F1	-99.4	-101.1	1.7	8

(continued)

TABLE 1 (continued)

No.	Type	Sort Code/Position						¹⁹ F nmr		Residual	Ref
		1	2	3	4	5	6	Obs	Pred		
665	9	F1	=N-	OX	F1	=N-	Me	-87.3	-81.7	-5.6	8
666	9	F1	=N-	OX	OX	=N-	F1	-111.7	-103.5	-8.2	8
667	9	F1	=N-	OX	OX	=N-	Me	-97.0	-84.2	-12.8	8
668	10	F1	=N-	CG	=N-	CG	=N-	-35.0	-31.0	-4.0	8
669	10	F1	=N-	Cj	=N-	Cj	=N-	-30.6	-32.1	1.5	8
670	10	F1	=N-	Cj	=N-	F1	=N-	-30.4	-33.7	3.3	8
671	10	F1	=N-	Cl	=N-	F1	=N-	-33.5	-33.9	0.4	8
672	10	F1	=N-	F1	=N-	F1	=N-	-31.1	-35.4	4.3	6
673	10	F1	=N-	F1	=N-	NH	=N-	-41.6	-38.6	-3.0	6
674	10	F1	=N-	F1	=N-	NW	=N-	-36.8	-34.0	-2.8	6

a Fluorobenzene is type 0, which was required as a standard in this study.

TABLE 2. Sort codes, groups, ¹⁹F NMR SSCS values and standard error of estimate of SSCS values for *ortho*, *meta* and *para* substituents attached to fluorobenzene (data from ref. 3)

Sort Code	Group	SSCS Value			Standard Error of Estimate		
		Ortho	Meta	Para	Ortho	Meta	Para
AA	H	0.00	0.00	0.00	0.0	0.0	0.0
Ac	COCH3	2.49	1.79	7.62	0.7	0.6	0.8
BA	BF2	11.92	4.49	13.37	2.5	2.5	2.5
BB	BC12	10.52	3.89	11.37	2.5	2.5	2.5
BO	B(OH)2	6.82	0.79	2.09	2.5	2.5	1.7
Br	Br	7.61	3.52	0.14	0.3	0.3	0.5
CA	C(CH3)3	1.07	0.20	-4.80	2.5	2.5	2.5
CB	CH2Br	-3.18	2.33	1.64	1.8	1.4	1.2
CC	CH(CH3)2	a	0.10	-4.10	a	2.5	2.5
CD	CH=CH2	-4.41	0.73	-0.55	1.4	1.4	1.4
CE	CH2COC1	-3.88	2.69	2.77	2.5	2.5	2.5
CF	CF3	0.42	3.08	5.84	0.4	0.3	0.5
CG	CF2CF3	3.82	4.15	8.34	2.5	1.7	1.7
CH	CH2OH	-5.90	1.49	-0.65	1.3	1.1	1.2
CI	CHF2	-3.48	3.79	6.77	2.5	2.5	2.5
CJ	CF2CH3	0.92	4.19	5.67	2.5	2.5	2.5
CK	CF2CF3	-0.58	2.89	3.07	2.5	2.5	2.5
CL	CHFCF3	-0.08	4.49	7.67	2.5	2.5	2.5
CM	CH[COOEt]2	0.06	2.44	1.57	1.7	1.7	2.5
CN	CN	6.87	4.11	10.13	0.4	0.4	0.5
CP	CH2CN	-3.78	2.20	0.00	2.5	1.7	1.2
CQ	CO2Br	-10.62	14.81	a	2.5	1.8	a
CR	CHC12	-4.30	2.20	3.30	2.5	2.5	2.5
CS	CH2SOMe	a	a	-0.60	a	a	2.5
CT	CH2C1	-7.70	-4.36	-0.43	1.7	1.4	1.7
CU	CH2N=C(NH2)2	a	-0.50	-3.40	a	2.5	2.5
CV	CH2CH2NH2	-0.90	5.82	4.23	1.8	1.8	2.5
CW	COCH2Ac	-0.78	3.09	4.87	2.5	2.5	2.5
CY	CH2COCH3	a	a	-2.60	a	a	2.5
CZ	CH2CO2Me	a	-0.10	-2.50	a	2.5	1.7
Ca	CH2CONMe2	a	a	-6.51	a	a	2.5
Cb	COOMe	3.25	3.84	7.07	2.5	1.2	0.9
Cc	COC1	3.36	3.45	12.85	1.1	0.9	1.1
Cd	COCN	a	4.10	a	a	2.5	a
Ce	COCF3	a	3.40	13.10	a	2.5	2.5
Cf	COF	-14.38	3.00	6.24	2.5	1.7	1.7
Cg	C[CN]3	a	7.20	7.50	a	2.5	2.5
Ci	CCH	a	a	3.30	a	a	2.5
Cj	CF[CF3]2	a	3.60	4.80	a	2.5	2.5
Ck	COEt	a	a	7.40	a	a	2.5
Cl	C1	-0.34	3.45	-0.68	0.2	0.2	0.3

(continued)

TABLE 2 (continued)

Sort Code	Group	SSCS Value			Standard Error of Estimate		
		Ortho	Meta	Para	Ortho	Meta	Para
Cm	CHO	-7.39	2.08	10.34	1.2	1.1	1.1
Cn	CONH2	0.45	-0.78	3.40	1.7	1.4	1.1
Co	COOH	2.30	1.11	6.46	0.4	0.4	0.5
Cq	CH2COOH	a	-0.10	-2.61	a	2.5	1.4
Cs	CH2SiMe3	a	a	-6.20	a	a	2.5
Ct	CH2CH(NH2)COOH	0.72	a	a	2.5	a	a
Cu	CH(OH)CH3	-3.78	1.05	-1.66	2.5	1.7	1.7
Cv	CHBr2	a	1.30	a	a	2.5	a
Cw	C[CF3]2OH	a	2.10	2.80	a	2.5	2.5
Cx	n-C4F9	a	3.10	a	a	2.5	a
Cy	COC3F7	a	a	13.10	a	a	2.5
Cz	COSCH3	a	a	6.80	a	a	2.5
DA	CH2NH2	a	a	-2.80	a	a	2.5
DB	CCl3	9.90	1.90	3.40	2.5	2.5	2.5
DC	CF=CF2	2.32	3.29	6.67	2.5	2.5	2.5
DD	CCl=CCl2	1.72	3.89	5.77	2.5	2.5	2.5
DE	CH2F	-12.58	2.39	12.77	2.5	2.5	2.5
DF	COOEt	1.20	1.17	6.43	0.8	0.7	1.0
Et	CH2CH3	-22.11	-0.20	-4.29	3.5	2.5	1.7
Fe	Fe(CO)2Cp	32.59	-2.88	-9.32	0.5	0.6	1.3
F1	F	-23.20	1.96	-6.55	0.1	0.1	0.2
GM	GeMe3	11.82	1.75	1.64	2.5	1.7	1.7
Hg	HgMe	15.22	2.19	0.27	2.5	2.5	2.5
IC	ICl2	a	a	7.90	a	a	2.5
ID	IF2	a	a	16.90	a	a	2.5
Io	I	19.93	3.55	1.39	0.6	0.5	0.7
Me	CH3	-3.87	-0.36	-3.61	0.4	0.4	0.4
Mg	MgBr	25.22	1.79	-3.23	2.5	2.5	2.5
Mn	Mn(CO)5	36.53	-0.59	-1.13	1.1	1.4	2.5
NA	NHCH2CH2OH	-18.18	-1.11	-9.93	2.5	2.5	2.5
NB	N[CH2CH2OH]2	-13.18	-4.75	a	1.8	1.8	a
NC	NHCOCH3	-11.16	1.76	-5.54	0.8	0.8	1.0
ND	NHOH	a	0.30	-11.40	a	2.5	1.7
NF	NO2	-5.63	3.76	9.61	0.3	0.3	0.4
NH	NH2	-22.88	-1.27	-17.40	0.3	0.3	0.5
NJ	NHCONH2	a	0.90	-8.10	a	2.5	2.5
NL	NHCONHCONH2	a	2.20	-6.30	a	2.5	2.5
NM	N(CH3)2	-13.51	1.21	-7.52	0.6	0.6	0.9
NN	NHNNH2	-16.13	-1.28	-11.66	1.1	0.8	1.5
NO	NO	a	2.60	11.75	a	1.7	1.7
NQ	NHCOCF3	a	a	-2.30	a	a	2.5
NR	NHCONHCH3	a	0.60	-9.70	a	1.7	1.7
NS	NHCN	a	a	-7.30	a	a	2.5
NT	N[SnMe3]2	-12.28	-1.11	-16.63	2.5	2.5	2.5
NU	NHSO2CH3	a	a	-5.20	a	a	2.5
NV	NHCONMe2	a	a	-7.90	a	a	2.5
NW	N=PCl3	-11.42	3.30	a	2.5	2.5	a
NX	NHOMe	a	a	-10.30	a	a	2.5
NZ	N3	-11.43	2.84	-0.31	0.9	0.8	1.5
Nc	NCO	-9.20	2.34	-2.15	1.7	1.4	1.7
Nd	NCS	a	3.20	0.20	a	2.5	2.5
Ne	NHCOOMe	a	0.10	-7.05	a	2.5	1.7
Nf	N[COF]2	a	4.30	4.00	a	2.5	2.5
Ng	N[CF3]2	a	3.70	4.00	a	2.5	2.5
Nh	NHCH2CH2NH2	-21.38	-1.21	-18.23	2.5	2.5	2.5
Ni	N=CCl2	-10.38	2.19	-2.73	2.5	2.5	2.5
Nj	NHNO2	a	a	-0.50	a	a	2.5
Nk	NHNNHCOCH3	a	a	-12.80	a	a	2.5
Nm	NHCH3	-21.27	0.73	-17.91	0.6	0.5	0.8
Ns	N[SiMe3]2	-8.18	2.19	-9.03	2.5	2.5	2.5
Nt	NHSnMe3	-25.28	-1.11	-24.63	2.5	2.5	2.5
OA	OCH2CH2OH	-21.38	-1.71	-17.93	2.5	2.5	2.5

(continued)

TABLE 2 (continued)

Sort Code	Group	SSCS Value			Standard Error of Estimate		
		Ortho	Meta	Para	Ortho	Meta	Para
OB	OCH ₂ COOH	-17.48	-0.71	-8.83	2.5	2.5	2.5
OE	OCH ₂ CH ₃	-17.47	-0.11	-8.58	0.6	0.5	0.9
OF	OCH ₂ CF ₃	-18.54	-0.59	-6.50	0.8	0.9	1.5
OG	OCCl ₃	-8.02	0.71	-1.03	1.7	1.7	2.5
OH	OH	-23.52	-0.04	-13.27	0.4	0.4	0.6
OJ	OCOCF ₃	a	a	-0.80	a	a	1.7
OK	OCO ₂ Me	a	a	-2.80	a	a	2.5
OL	OCOF	a	a	-1.10	a	a	2.5
OM	OCONMe ₂	a	a	-4.70	a	a	2.5
ON	ONO	-18.09	3.64	13.07	1.7	1.6	2.5
OO	OCOMe	a	a	-3.66	a	a	1.4
OP	OSOF	-11.28	2.89	0.67	2.5	2.5	2.5
OO	OC(Me) ₂ CH=CH ₂	-13.68	-0.81	-11.43	2.5	2.5	2.5
OS	OSO ₂ F	-12.08	4.29	3.07	2.5	2.5	2.5
OT	OCF ₃	-15.18	1.61	0.19	1.2	1.1	1.4
OU	O-nBu	-17.47	-1.07	a	2.5	2.5	a
OV	OSO ₂ Me	a	a	-1.00	a	a	2.5
OX	OCH ₃	-18.94	0.78	-9.02	0.4	0.3	0.5
PA	PH ₂	9.62	1.89	a	2.5	2.5	a
PB	PMe ₂	6.32	0.59	0.57	2.5	2.5	2.5
PC	PEt ₂	7.42	0.59	1.47	2.5	2.5	2.5
PD	P{NMe ₂ } ₂	-0.48	0.79	-0.73	2.5	2.5	2.5
PE	PF ₂	-0.38	1.39	7.57	2.5	2.5	2.5
PF	PCl ₂	8.12	4.09	9.87	2.5	2.5	2.5
PG	P{NMe ₂ }C1	10.72	2.39	5.37	2.5	2.5	2.5
PH	P{Nt-Bu} ₂	2.02	2.79	0.67	2.5	2.5	2.5
PI	POCl ₂	a	a	12.10	a	a	2.5
PM	PbMe ₃	a	0.40	-0.40	a	2.5	2.5
RB	CH ₂ C ₆ H ₅	a	a	-3.40	a	a	2.5
RD	COC ₆ H ₅	a	a	7.10	a	a	1.2
RE	COC ₆ F ₅	-1.74	1.48	9.97	1.4	1.4	2.5
RF	COC ₆ F ₄ H-o	3.29	4.11	10.64	2.5	1.7	2.5
RG	COC ₆ F ₄ OMe-p	-2.99	2.73	a	2.5	2.5	a
RW	SC ₆ H ₄ SCH ₃ -p	7.95	a	a	2.5	a	a
RX	COC ₆ F ₄ COOH-p	-2.10	1.69	9.57	1.8	1.8	2.5
RZ	OC ₆ H ₄ Br-m	-2.36	a	a	1.1	a	a
Ra	NHC ₆ H ₅	-14.02	-3.18	a	2.5	2.5	a
Re	Re(CO) ₅	39.50	-1.93	a	1.3	1.8	a
Ri	cyclo-C ₅ H ₉	17.39	2.31	1.90	1.5	1.3	2.5
Rj	cyclo-C ₆ H ₁₁	-8.78	-4.61	-8.63	2.5	2.5	2.5
Rk	SC ₆ H ₅	8.82	3.42	2.18	0.8	0.8	1.0
Rl	OCOC ₆ H ₅	a	a	-3.00	a	a	2.5
Rm	NHCOC ₆ H ₅	a	a	-4.90	a	a	2.5
Rn	CH ₂ SC ₆ H ₅	a	a	-1.50	a	a	2.5
Ro	CH ₂ COC ₆ H ₅	a	a	-2.60	a	a	2.5
Rq	OC ₆ H ₅	a	2.70	-6.70	a	2.5	2.5
Rr	OC ₆ H ₄ F-p	a	0.30	-5.90	a	2.5	2.5
SA	SOF ₃	a	a	12.40	a	a	2.5
SB	SO ₂ F	7.46	5.76	13.75	2.5	2.5	1.7
SC	SCF ₃	8.60	3.10	-3.90	2.5	2.5	2.5
SD	SO ₂ CF ₃	9.50	5.50	-14.30	2.5	2.5	2.5
SF	SOMe	a	a	3.80	a	a	2.5
SG	SOOMe	2.24	5.89	10.01	1.3	0.7	1.3
SH	SH	9.95	0.90	-3.50	3.5	2.5	1.7
SI	SOF	a	a	11.40	a	a	2.5
SJ	SF ₅	a	3.90	6.30	a	2.5	2.5
SK	SO ₃ Et	a	3.70	9.10	a	2.5	2.5
SL	SO ₂ NH ₂	a	a	8.30	a	a	2.5
SM	SCH ₃	6.50	1.24	-4.53	0.4	0.4	0.9
SN	SO ₂ C1	a	a	13.00	a	a	2.5
TC	SnCl ₃	a	1.85	2.14	a	1.7	1.7
TM	SnMe ₃	16.32	2.20	2.12	1.8	1.7	1.4

(continued)

TABLE 2 (continued)

Sort Code	Group	SSCS Value			Standard Error of Estimate		
		Ortho	Meta	Para	Ortho	Meta	Para
Tl	TlBr	20.42	-2.11	-1.83	2.5	2.5	2.5
UW	COOC6H5	a	a	8.50	a	a	2.5
UY	N-morpholino	-12.78	0.80	-2.46	1.2	0.8	1.4
VH	CCPh	3.48	-1.18	0.94	0.8	0.7	1.8
VI	N-piperidino	-11.52	-2.18	-2.38	1.0	0.9	1.8
VJ	N-pyrrolidino	-13.97	-2.27	-0.43	1.2	1.2	2.9
VK	N-homopiperidino	-9.96	-3.22	a	1.6	1.6	a
sA	SiHMe2	14.86	0.73	2.11	1.7	1.0	1.9
sB	SiMe2OEt	15.89	-0.60	-0.09	1.1	1.1	2.7
sC	SiMe2OMe	15.59	-0.40	-0.41	1.1	1.1	2.7
sD	SiMe2OH	15.81	-0.72	-1.64	1.2	1.2	2.8
sF	SiF3	14.42	5.09	12.57	2.5	2.5	2.5
sM	SiMe3	13.76	0.27	1.60	0.5	0.8	0.8
sf	SeF3	a	a	9.40	a	a	2.5

a Not computable from the data base.

TABLE 3. ¹⁹F NMR structure factors and standard error of estimate of structure factors for types 1-10

Type	Structure Factor	Standard Error
1	47.77	4.51
2	-3.03	4.51
3	18.28	4.54
4	45.73	4.68
5	3.50	4.68
6	67.71	4.55
7	52.06	4.55
8	-18.73	4.56
9	41.81	4.55
10	74.56	4.81

TABLE 4. Type, sort code, ¹⁹F NMR position observed and predicted, residual and original reference for 53 compounds from which new SSSS values have been deduced.

No.	Type	Sort Code/Position						19F nmr		Residual	Ref
		1	2	3	4	5	6	Obs	Pred		
1	1	F1	=N-	DH	F1	Me	F1	-90.7	-94.8	4.1	6
2	1	F1	=N-	F1	C1	Nv	F1	-93.0	-93.4	0.4	11
3	1	F1	=N-	F1	C1	OZ	C1	-66.6	-63.1	-3.5	16
4	1	F1	=N-	F1	C1	OZ	F1	-86.5	-85.9	-0.6	16
5	1	F1	=N-	F1	DQ	F1	F1	-89.0	-89.0	0.0	11
6	1	F1	=N-	F1	F1	DH	F1	-91.9	-92.5	0.6	6
7	1	F1	=N-	F1	F1	F1	DQ	-74.8	-73.9	-0.9	11
8	1	F1	=N-	F1	F1	Nv	C1	-77.0	-76.6	-0.4	11
9	1	F1	=N-	F1	F1	OZ	C1	-72.3	-69.0	-3.3	16
10	1	F1	=N-	F1	F1	OZ	F1	-89.0	-91.8	2.8	16
11	1	F1	=N-	F1	F1	SO	F1	-90.0	-90.0	0.0	7
12	1	F1	=N-	OZ	C1	F1	C1	-68.4	-63.1	-5.3	16
13	1	F1	=N-	OZ	C1	OZ	C1	-65.8	-65.6	-0.2	16
14	1	F1	=N-	OZ	F1	Cj	F1	-87.8	-90.2	2.4	16
15	1	F1	=N-	OZ	F1	F1	C1	-71.8	-69.0	-2.8	16
16	1	F1	=N-	OZ	F1	OZ	C1	-71.3	-71.4	0.1	16
17	1	F1	=N-	OZ	F1	OZ	F1	-87.1	-94.3	7.2	16
18	2	F1	Cj	=N-	F1	F1	Cj	-112.3	-114.6	2.3	6
19	2	F1	Cj	F1	Cj	=N-	F1	-122.7	-128.7	6.0	6
20	2	F1	Cj	F1	F1	=N-	F1	-135.1	-140.0	4.9	6

(continued)

TABLE 4 (continued)

No.	Type	Sort Code/Position						¹⁹ F nmr		Residual	Ref
		1	2	3	4	5	6	Obs	Pred		
21	2	F1	Cj	F1	F1	=N-	F1	-136.3	-140.0	3.7	16
22	2	F1	Cj	F1	F1	=N-	OX	-134.9	-135.8	0.9	6
23	2	F1	Cj	F1	F1	=N-	OZ	-132.8	-134.6	1.8	16
24	2	F1	Cj	F1	OX	=N-	F1	-147.1	-142.5	-4.6	6
25	2	F1	Cj	F1	OX	=N-	F1	-147.3	-142.5	-4.8	16
26	2	F1	Cj	F1	OX	=N-	OX	-146.9	-138.2	-8.7	16
27	2	F1	Cj	F1	OZ	=N-	F1	-136.2	-136.3	0.1	16
28	2	F1	Cj	F1	OZ	=N-	OZ	-132.1	-130.9	-1.2	16
29	2	F1	Cv	F1	F1	=N-	F1	-139.9	-139.9	0.0	6
30	2	F1	DH	=N-	F1	F1	Me	-130.6	-130.1	-0.5	6
31	2	F1	DH	F1	F1	=N-	F1	-144.2	-149.4	5.2	6
32	2	F1	F1	=N-	DH	F1	Me	-144.3	-148.6	4.3	6
33	2	F1	F1	=N-	F1	C1	Nv	-166.0	-166.0	0.0	11
34	2	F1	F1	=N-	F1	DQ	F1	-169.4	-169.4	0.0	11
35	2	F1	F1	=N-	F1	F1	SO	-140.6	-140.6	0.0	7
36	2	F1	OZ	=N-	F1	C1	F1	-162.4	-158.5	-3.9	16
37	2	F1	OZ	=N-	F1	C1	OZ	-156.3	-153.1	-3.2	16
38	2	F1	OZ	=N-	F1	F1	OZ	-152.4	-154.6	2.2	16
39	2	F1	OZ	C1	F1	=N-	F1	-157.2	-158.5	1.3	16
40	2	F1	OZ	F1	F1	=N-	F1	-157.1	-160.0	2.9	16
41	2	F1	OZ	F1	OZ	=N-	F1	-155.3	-156.3	1.0	16
42	3	F1	C1	F1	=N-	OZ	F1	-116.3	-115.1	-1.2	16
43	3	F1	C1	OZ	=N-	F1	C1	-95.2	-92.2	-3.0	16
44	3	F1	DQ	F1	=N-	F1	F1	-119.1	-120.0	0.9	11
45	4	F1	=N-	=N-	F1	Cj	Cj	-69.2	-66.4	-2.8	9
46	4	F1	=N-	=N-	F1	F1	N1	-83.0	-86.1	3.1	6
47	4	F1	=N-	=N-	F1	N1	F1	-103.0	-103.0	0.0	6
48	5	F1	F1	=N-	=N-	F1	N1	-148.0	-144.9	-3.1	6
49	9	F1	=N-	DH	DH	=N-	DH	-91.4	-87.1	-4.3	8
50	9	F1	=N-	DH	F1	=N-	DH	-84.8	-84.4	-0.4	8
51	9	F1	=N-	F1	F1	=N-	OY	-91.9	-91.9	0.0	8
52	9	F1	=N-	F1	OY	=N-	F1	-98.9	-98.9	0.0	8
53	9	F1	=N-	OY	F1	=N-	F1	-107.1	-107.1	0.0	8

TABLE 5. Sort codes, groups, ¹⁹F NMR SSCS values and standard error of estimate of SSCS values for *ortho*, *meta* and *p* substituents for new groups

Sort Code	Group	SSCS Value			Standard Error of Estimate		
		Ortho	Meta	Para	Ortho	Meta	Para
Cj	CF(CF3)2	2.19	a	a	1.8	a	a
Cv	CHBr2	2.29	a	a	4.3		
DH	n-Bu	-7.21	-1.12	-9.14	2.6	2.6	3.1
DQ	CH2CH2C1	-7.61	-2.01	-6.11	3.3	4.3	4.3
N1	NEt2	-15.81	-7.61	a	3.3	4.3	a
Nv	NHC6H11	-25.31	-7.96	a	4.3	3.3	a
OY	OtBu	-17.71	-7.81	-8.11	4.3	4.3	4.3
OZ	ON(CF3)2	-17.81	-0.45	-2.83	1.6	1.6	2.5
SO	SO3H	1.59	1.39	a	4.3	4.3	a

a Not computable from the data base.