

Supplementary Information

Influence of fluoro and cyano substituents in the aromatic and antiaromatic characteristics of cyclooctatetraene

Goar Sánchez-Sanz,^{a,*} Cristina Trujillo,^b Isabel Rozas,^b Ibon Alkorta^c

^a *School of Physics & Complex and Adaptive Systems Laboratory, University College Dublin, Belfield, Dublin 4, Ireland*

^b *School of Chemistry, Trinity Biomedical Sciences Institute, Trinity College Dublin, 152-160 Pearse St., Dublin 2, Ireland*

^c *Instituto de Química Médica, CSIC, Juan de la Cierva, 3, E-28006 Madrid, Spain*

Table of Contents

- **Table S1.** Carbon-carbon ring distances, in Å, for all compounds studied at B3LYP/6-311++G(d,p) computational level.
- **Table S2.** Wiberg indexes for all the compounds studied at B3LYP/6-311++G(d,p) computational level.
- **Table S3.** NICS values (ppm) and HOMA indexes for all the compounds studied at B3LYP/6-311++G(d,p) computational level.
- **Figure S1.** Evolution of the C-C distance upon substitution of the ring, for triplet and transition state in F and CN compounds.

Table S1. Carbon-carbon ring distances, in Å, for all compounds studied at B3LYP/6-311++G(d,p) computational level.

	Sym	C1-C2	C2-C3	C3-C4	C4-C5	C5-C6	C6-C7	C7-C8	C8-C1
1COT _S	D _{2d}	1.472	1.340	1.472	1.340	1.472	1.340	1.472	1.340
2F _{1S}	C ₁	1.466	1.338	1.470	1.340	1.471	1.340	1.469	1.332
3F _{2S}	C ₂	1.469	1.330	1.468	1.341	1.469	1.341	1.468	1.330
4F _{2S}	C ₁	1.461	1.332	1.465	1.339	1.468	1.341	1.467	1.333
5F _{2S}	C _S	1.466	1.336	1.466	1.332	1.468	1.340	1.468	1.332
6F _{2S}	C ₂	1.465	1.339	1.466	1.334	1.465	1.339	1.466	1.334
7F _{3S}	C ₁	1.464	1.334	1.462	1.340	1.466	1.343	1.465	1.332
8F _{3S}	C ₁	1.470	1.330	1.461	1.333	1.465	1.341	1.466	1.331
9F _{3S}	C ₁	1.469	1.331	1.463	1.334	1.464	1.339	1.466	1.331
10F _{3S}	C ₁	1.459	1.333	1.459	1.334	1.463	1.340	1.463	1.335
11F _{3S}	C ₁	1.461	1.332	1.466	1.336	1.464	1.334	1.463	1.333
12F _{4S}	C _S	1.464	1.332	1.464	1.333	1.463	1.344	1.463	1.333
13F _{4S}	C ₁	1.463	1.335	1.457	1.335	1.461	1.341	1.462	1.333
14F _{4S}	C ₁	1.464	1.334	1.462	1.338	1.462	1.336	1.461	1.332
15F _{4S}	C ₁	1.469	1.330	1.458	1.337	1.460	1.340	1.463	1.333
16F _{4S}	D ₂	1.469	1.332	1.463	1.332	1.469	1.332	1.463	1.332
17F _{4S}	C ₁	1.469	1.331	1.461	1.333	1.458	1.335	1.461	1.332
18F _{4S}	C ₂	1.472	1.330	1.460	1.334	1.461	1.334	1.460	1.330
19F _{4S}	S ₄	1.456	1.335	1.456	1.335	1.456	1.335	1.456	1.335
20F _{5S}	C ₁	1.462	1.333	1.458	1.337	1.458	1.343	1.459	1.335
21F _{5S}	C ₁	1.463	1.333	1.465	1.332	1.457	1.337	1.458	1.334
22F _{5S}	C ₁	1.463	1.335	1.458	1.332	1.468	1.334	1.459	1.334
23F _{5S}	C ₁	1.462	1.337	1.454	1.336	1.455	1.336	1.457	1.333
24F _{5S}	C ₁	1.470	1.331	1.456	1.338	1.455	1.334	1.459	1.332
25F _{6S}	C ₂	1.462	1.335	1.459	1.335	1.462	1.337	1.455	1.337
26F _{6S}	C ₁	1.463	1.335	1.457	1.338	1.452	1.338	1.455	1.334
27F _{6S}	C _S	1.464	1.335	1.464	1.333	1.454	1.341	1.454	1.333
28F _{6S}	C ₂	1.462	1.338	1.455	1.334	1.462	1.338	1.455	1.334
29F _{7S}	C ₁	1.462	1.337	1.458	1.336	1.456	1.341	1.452	1.336
30F _{8S}	D _{2D}	1.457	1.339	1.457	1.339	1.457	1.339	1.457	1.339
1COT _T	D _{8h}	1.404	1.404	1.404	1.404	1.404	1.404	1.404	1.404

2F _{1T}	C _{2v}	1.397	1.398	1.405	1.403	1.403	1.405	1.398	1.397
3F _{2T}	C _{2v}	1.407	1.394	1.400	1.403	1.402	1.403	1.400	1.394
4F _{2T}	C _{2v}	1.392	1.392	1.398	1.398	1.404	1.404	1.398	1.398
5F _{2T}	C _{2v}	1.399	1.392	1.399	1.397	1.397	1.407	1.397	1.397
6F _{2T}	D _{2H}	1.396	1.399	1.399	1.396	1.396	1.399	1.399	1.396
7F _{3T}	C _{2v}	1.405	1.405	1.395	1.399	1.402	1.402	1.399	1.395
8F _{3T}	C _s	1.409	1.389	1.394	1.397	1.396	1.405	1.398	1.394
9F _{3T}	C _s	1.407	1.396	1.394	1.397	1.395	1.398	1.401	1.392
10F _{3T}	C _{2v}	1.391	1.393	1.393	1.391	1.397	1.400	1.400	1.397
11F _{3T}	C _{2v}	1.391	1.391	1.400	1.392	1.399	1.399	1.392	1.400
12F _{4T}	C _{2v}	1.407	1.403	1.407	1.394	1.397	1.402	1.397	1.394
13F _{4T}	C _s	1.405	1.407	1.389	1.393	1.395	1.397	1.401	1.393
14F _{4T}	C _{2v}	1.404	1.404	1.397	1.393	1.396	1.396	1.393	1.397
15F _{4T}	C _s	1.407	1.391	1.391	1.407	1.392	1.399	1.399	1.392
16F _{4T}	D _{2H}	1.405	1.394	1.396	1.394	1.405	1.394	1.396	1.394
17F _{4T}	C _s	1.409	1.388	1.395	1.392	1.390	1.399	1.393	1.396
18F _{4T}	C _{2v}	1.410	1.389	1.393	1.399	1.391	1.399	1.393	1.389
19F _{4T}	C _{2v}	1.393	1.393	1.393	1.393	1.393	1.393	1.393	1.393
20F _{5T}	C _{2v}	1.406	1.405	1.405	1.406	1.392	1.397	1.397	1.392
21F _{5T}	C _s	1.406	1.403	1.409	1.389	1.391	1.396	1.391	1.397
22F _{5T}	C _s	1.403	1.405	1.392	1.390	1.405	1.393	1.394	1.395
23F _{5T}	C _{2v}	1.407	1.407	1.389	1.395	1.390	1.390	1.395	1.389
24F _{5T}	C _{2v}	1.409	1.391	1.391	1.409	1.388	1.394	1.394	1.388
25F _{6T}	C _{2v}	1.404	1.404	1.407	1.404	1.404	1.393	1.393	1.393
26F _{6T}	C _{2v}	1.408	1.404	1.404	1.408	1.387	1.392	1.392	1.387
27F _{6T}	C _{2v}	1.407	1.401	1.407	1.391	1.388	1.407	1.388	1.391
28F _{6T}	C _{2v}	1.404	1.404	1.391	1.391	1.404	1.404	1.391	1.391
29F _{7T}	C _{2v}	1.405	1.403	1.406	1.406	1.403	1.405	1.389	1.389
30F _{8T}	D _{2d}	1.403	1.403	1.403	1.403	1.403	1.403	1.403	1.403
1COT _{TS}	D _{2h}	1.343	1.474	1.343	1.474	1.343	1.474	1.343	1.474
2F _{1TS}	C _s	1.344	1.472	1.344	1.467	1.335	1.469	1.340	1.474
3F _{2TS}	C _{2v}	1.340	1.465	1.341	1.473	1.344	1.473	1.341	1.465
4F _{2TS}	C _s	1.335	1.461	1.337	1.464	1.346	1.470	1.342	1.468
5F _{2TS}	C _{2v}	1.335	1.462	1.335	1.468	1.341	1.474	1.341	1.468

6F _{2TS}	C _{2h}	1.338	1.464	1.342	1.467	1.338	1.464	1.342	1.467
7F _{3TS}	C _s	1.341	1.480	1.336	1.466	1.343	1.469	1.341	1.466
8F _{3TS}	C _s	1.341	1.460	1.334	1.468	1.341	1.472	1.342	1.462
9F _{3TS}	C _s	1.342	1.463	1.338	1.468	1.336	1.466	1.341	1.464
10F _{3TS}	C _s	1.338	1.458	1.338	1.457	1.340	1.460	1.344	1.464
11F _{3TS}	C _s	1.334	1.462	1.336	1.461	1.336	1.467	1.338	1.470
12F _{4TS}	C _{2v}	1.341	1.480	1.341	1.464	1.340	1.469	1.340	1.464
13F _{4TS}	C _s	1.343	1.478	1.335	1.460	1.337	1.461	1.342	1.464
14F _{4TS}	C _s	1.342	1.481	1.335	1.461	1.335	1.465	1.338	1.465
15F _{4TS}	C _s	1.341	1.459	1.333	1.483	1.335	1.466	1.341	1.462
16F _{4TS}	D _{2h}	1.341	1.463	1.339	1.463	1.341	1.463	1.339	1.463
17F _{4TS}	C _s	1.343	1.458	1.336	1.460	1.336	1.467	1.340	1.458
18F _{4TS}	C _{2v}	1.341	1.459	1.334	1.468	1.338	1.468	1.334	1.459
19F _{4TS}	C _{4h}	1.341	1.453	1.341	1.453	1.341	1.453	1.341	1.453
20F _{5TS}	C _s	1.341	1.480	1.343	1.480	1.336	1.462	1.340	1.462
21F _{5TS}	C _s	1.343	1.478	1.342	1.459	1.334	1.464	1.338	1.462
22F _{5TS}	C _s	1.341	1.477	1.336	1.460	1.335	1.480	1.334	1.460
23F _{5TS}	C _s	1.345	1.473	1.338	1.457	1.337	1.455	1.338	1.455
24F _{5TS}	C _s	1.341	1.457	1.334	1.483	1.334	1.462	1.334	1.457
25F _{6TS}	C _{2v}	1.334	1.478	1.343	1.482	1.343	1.478	1.334	1.457
26F _{6TS}	C _s	1.343	1.477	1.345	1.477	1.335	1.457	1.335	1.455
27F _{6TS}	C _{2v}	1.342	1.477	1.342	1.458	1.333	1.480	1.333	1.458
28F _{6TS}	C _{2h}	1.342	1.474	1.336	1.457	1.342	1.474	1.336	1.457
29F _{7TS}	C _s	1.341	1.475	1.343	1.479	1.343	1.476	1.333	1.455
30F _{8TS}	D _{4h}	1.342	1.476	1.342	1.476	1.342	1.476	1.342	1.476
2CN _{1S}	C ₁	1.485	1.336	1.471	1.339	1.470	1.341	1.466	1.348
3CN _{2S}	C ₂	1.500	1.345	1.464	1.342	1.469	1.342	1.464	1.345
4CN _{2S}	C ₁	1.480	1.344	1.484	1.336	1.469	1.341	1.464	1.350
5CN _{2S}	C _s	1.484	1.334	1.484	1.348	1.465	1.342	1.465	1.348
6CN _{2S}	C ₂	1.484	1.337	1.465	1.348	1.484	1.337	1.465	1.348
7CN _{3S}	C ₁	1.499	1.355	1.479	1.339	1.467	1.342	1.462	1.346
8CN _{3S}	C ₁	1.499	1.342	1.479	1.350	1.463	1.342	1.464	1.345
9CN _{3S}	C ₁	1.499	1.346	1.460	1.349	1.482	1.338	1.464	1.345
10CN _{3S}	C ₁	1.479	1.345	1.480	1.344	1.483	1.338	1.464	1.349

11CN _{3S}	C ₁	1.479	1.344	1.483	1.334	1.482	1.349	1.460	1.350
12CN _{4S}	C _s	1.497	1.352	1.497	1.347	1.462	1.344	1.462	1.347
13CN _{4S}	C ₁	1.497	1.356	1.477	1.346	1.481	1.339	1.463	1.346
14CN _{4S}	C ₁	1.498	1.355	1.480	1.336	1.481	1.350	1.459	1.347
15CN _{4S}	C ₁	1.497	1.343	1.477	1.360	1.479	1.339	1.463	1.346
16CN _{4S}	D ₂	1.498	1.346	1.461	1.346	1.498	1.346	1.461	1.346
17CN _{4S}	C ₁	1.498	1.342	1.479	1.346	1.478	1.351	1.459	1.346
18CN _{4S}	C ₂	1.499	1.342	1.478	1.351	1.458	1.351	1.478	1.342
19CN _{4S}	S ₄	1.479	1.346	1.479	1.346	1.479	1.346	1.479	1.346
20CN _{5S}	C ₁	1.494	1.353	1.497	1.357	1.477	1.341	1.461	1.348
21CN _{5S}	C ₁	1.496	1.352	1.497	1.344	1.476	1.352	1.458	1.348
22CN _{5S}	C ₁	1.496	1.357	1.477	1.344	1.497	1.347	1.459	1.347
23CN _{5S}	C ₁	1.497	1.356	1.476	1.347	1.477	1.347	1.477	1.343
24CN _{5S}	C ₁	1.497	1.343	1.476	1.361	1.475	1.347	1.477	1.343
25CN _{6S}	C ₂	1.494	1.354	1.496	1.354	1.494	1.349	1.458	1.349
26CN _{6S}	C ₁	1.495	1.353	1.496	1.358	1.474	1.349	1.476	1.345
27CN _{6S}	C _s	1.496	1.353	1.496	1.345	1.474	1.362	1.474	1.345
28CN _{6S}	C ₂	1.496	1.357	1.475	1.344	1.496	1.357	1.475	1.344
29CN _{7S}	C ₁	1.495	1.355	1.495	1.355	1.494	1.359	1.474	1.346
30CN _{8S}	D _{2D}	1.493	1.357	1.493	1.357	1.493	1.357	1.493	1.357
2CN _{1T}	C _{2v}	1.418	1.395	1.406	1.400	1.400	1.406	1.395	1.418
3CN _{2T}	C _{2v}	1.434	1.413	1.398	1.403	1.396	1.403	1.398	1.413
4CN _{2T}	C _{2v}	1.409	1.409	1.420	1.394	1.403	1.403	1.394	1.420
5CN _{2T}	C _{2v}	1.421	1.388	1.421	1.415	1.392	1.409	1.392	1.415
6CN _{2T}	D _{2h}	1.414	1.398	1.398	1.414	1.414	1.398	1.398	1.414
7CN _{3T}	C _{2v}	1.431	1.431	1.416	1.396	1.398	1.398	1.396	1.416
8CN _{3T}	C _s	1.437	1.406	1.412	1.417	1.389	1.405	1.394	1.412
9CN _{3T}	C _s	1.431	1.417	1.391	1.416	1.410	1.395	1.402	1.409
10CN _{3T}	C _{2v}	1.405	1.410	1.410	1.405	1.417	1.396	1.396	1.417
11CN _{3T}	C _{2v}	1.406	1.406	1.424	1.385	1.418	1.418	1.385	1.424
12CN _{4T}	C _{2v}	1.435	1.429	1.435	1.414	1.391	1.400	1.391	1.414
13CN _{4T}	C _s	1.429	1.435	1.408	1.409	1.412	1.391	1.399	1.412
14CN _{4T}	C _{2v}	1.427	1.427	1.420	1.388	1.412	1.412	1.388	1.420
15CN _{4T}	C _s	1.433	1.409	1.409	1.433	1.406	1.397	1.398	1.406

16CN _{4T}	D _{2h}	1.426	1.412	1.394	1.412	1.426	1.412	1.394	1.412
17CN _{4T}	C _s	1.434	1.402	1.416	1.409	1.403	1.419	1.388	1.415
18CN _{4T}	C _{2v}	1.441	1.403	1.409	1.420	1.382	1.420	1.409	1.403
19CN _{4T}	C _{2v}	1.408	1.407	1.407	1.408	1.410	1.409	1.409	1.410
20CN _{5T}	C ₂	1.434	1.431	1.431	1.434	1.406	1.393	1.393	1.406
21CN _{5T}	C _s	1.431	1.426	1.439	1.406	1.404	1.414	1.384	1.417
22CN _{5T}	C _s	1.423	1.430	1.413	1.405	1.429	1.408	1.391	1.415
23CN _{5T}	C _{2v}	1.432	1.432	1.405	1.413	1.404	1.404	1.413	1.405
24CN _{5T}	C _{2v}	1.437	1.406	1.406	1.437	1.399	1.412	1.412	1.399
25CN _{6T}	C _s	1.425	1.432	1.431	1.432	1.425	1.409	1.388	1.409
26CN _{6T}	C ₂	1.441	1.426	1.426	1.441	1.397	1.409	1.409	1.397
27CN _{6T}	C _s	1.435	1.419	1.435	1.409	1.400	1.432	1.400	1.409
28CN _{6T}	C _{2v}	1.426	1.426	1.408	1.409	1.426	1.426	1.409	1.408
29CN _{7T}	C _s	1.438	1.413	1.436	1.438	1.411	1.438	1.401	1.401
30CN _{8T}	D _{2d}	1.431	1.421	1.431	1.421	1.431	1.421	1.431	1.421
2CN _{1TS}	C _s	1.354	1.465	1.346	1.470	1.342	1.473	1.341	1.489
3CN _{2TS}	C _{2v}	1.367	1.484	1.343	1.468	1.341	1.468	1.343	1.484
4CN _{2TS}	C _s	1.351	1.480	1.357	1.460	1.345	1.469	1.340	1.489
5CN _{2TS}	C _{2v}	1.355	1.458	1.355	1.484	1.340	1.472	1.340	1.484
6CN _{2TS}	C _{2h}	1.353	1.464	1.343	1.485	1.353	1.465	1.343	1.485
7CN _{3TS}	C _s	1.368	1.503	1.357	1.459	1.343	1.462	1.342	1.484
8CN _{3TS}	C _s	1.369	1.477	1.353	1.483	1.339	1.467	1.343	1.479
9CN _{3TS}	C _s	1.366	1.483	1.341	1.482	1.352	1.461	1.345	1.480
10CN _{3TS}	C _s	1.350	1.480	1.354	1.475	1.356	1.460	1.342	1.484
11CN _{3TS}	C _s	1.355	1.454	1.358	1.477	1.351	1.487	1.338	1.483
12CN _{4TS}	C _{2v}	1.371	1.503	1.371	1.479	1.341	1.459	1.341	1.479
13CN _{4TS}	C _s	1.370	1.499	1.356	1.459	1.340	1.477	1.352	1.478
14CN _{4TS}	C _s	1.367	1.499	1.359	1.453	1.353	1.476	1.340	1.483
15CN _{4TS}	C _s	1.368	1.476	1.354	1.500	1.352	1.459	1.344	1.474
16CN _{4TS}	D _{2h}	1.365	1.478	1.343	1.478	1.365	1.478	1.343	1.478
17CN _{4TS}	C _s	1.368	1.473	1.355	1.476	1.350	1.481	1.340	1.478
18CN _{4TS}	C _{2v}	1.371	1.473	1.353	1.481	1.337	1.481	1.353	1.473
19CN _{4TS}	C _{4h}	1.353	1.476	1.353	1.476	1.353	1.476	1.353	1.476
20CN _{5TS}	C _s	1.370	1.504	1.374	1.499	1.354	1.451	1.341	1.473

21CN _{5TS}	C _S	1.371	1.498	1.374	1.473	1.351	1.473	1.338	1.478
22CN _{5TS}	C _S	1.366	1.498	1.357	1.471	1.366	1.471	1.342	1.478
23CN _{5TS}	C _S	1.370	1.499	1.354	1.474	1.351	1.469	1.354	1.473
24CN _{5TS}	C _S	1.370	1.472	1.354	1.500	1.350	1.474	1.354	1.467
25CN _{6TS}	C _{2v}	1.373	1.506	1.373	1.492	1.355	1.445	1.355	1.492
26CN _{6TS}	C _S	1.373	1.499	1.373	1.499	1.352	1.466	1.352	1.466
27CN _{6TS}	C _{2v}	1.372	1.492	1.372	1.472	1.352	1.491	1.352	1.472
28CN _{6TS}	C _{2h}	1.368	1.491	1.355	1.472	1.368	1.491	1.355	1.472
29CN _{7TS}	C _S	1.370	1.491	1.376	1.500	1.371	1.490	1.353	1.463
30CN _{8TS}	D _{4h}	1.374	1.491	1.374	1.491	1.374	1.491	1.374	1.491

Table S2. Wiberg indexes for all the compounds studied at B3LYP/6-311++G(d,p) computational level.

	C1-C2	C2-C3	C3-C4	C4-C5	C5-C6	C6-C7	C7-C8	C8-C1
COT _S	1.07	1.86	1.07	1.86	1.07	1.86	1.07	1.86
2F _{1S}	1.05	1.85	1.07	1.85	1.07	1.85	1.07	1.79
3F _{2S}	1.02	1.80	1.07	1.85	1.08	1.85	1.07	1.80
4F _{2S}	1.06	1.78	1.06	1.84	1.08	1.84	1.07	1.78
5F _{2S}	1.05	1.85	1.05	1.79	1.07	1.84	1.07	1.79
6F _{2S}	1.06	1.84	1.08	1.78	1.06	1.84	1.08	1.78
7F _{3S}	1.03	1.71	1.06	1.83	1.09	1.83	1.08	1.79
8F _{3S}	1.02	1.79	1.05	1.78	1.08	1.84	1.08	1.79
9F _{3S}	1.02	1.79	1.07	1.78	1.06	1.84	1.07	1.79
10F _{3S}	1.06	1.77	1.06	1.76	1.06	1.83	1.08	1.77
11F _{3S}	1.06	1.78	1.05	1.84	1.06	1.78	1.07	1.78
12F _{4S}	1.03	1.71	1.03	1.78	1.09	1.82	1.09	1.78
13F _{4S}	1.03	1.71	1.06	1.76	1.07	1.82	1.09	1.77
14F _{4S}	1.03	1.71	1.06	1.83	1.07	1.77	1.08	1.78
15F _{4S}	1.02	1.78	1.06	1.70	1.07	1.83	1.08	1.78
16F _{4S}	1.03	1.79	1.07	1.79	1.03	1.79	1.07	1.79
17F _{4S}	1.03	1.78	1.06	1.77	1.06	1.77	1.08	1.78
18F _{4S}	1.02	1.79	1.06	1.77	1.08	1.77	1.06	1.79
19F _{4S}	1.07	1.75	1.07	1.75	1.07	1.75	1.07	1.75
20F _{5S}	1.04	1.70	1.04	1.69	1.07	1.81	1.10	1.76
21F _{5S}	1.03	1.71	1.03	1.77	1.07	1.75	1.09	1.77

22F _{5S}	1.04	1.70	1.06	1.77	1.03	1.77	1.09	1.77
23F _{5S}	1.04	1.69	1.07	1.75	1.08	1.75	1.07	1.76
24F _{5S}	1.02	1.78	1.06	1.70	1.07	1.76	1.06	1.77
25F _{6S}	1.04	1.70	1.04	1.70	1.04	1.75	1.10	1.75
26F _{6S}	1.04	1.70	1.04	1.69	1.08	1.74	1.08	1.76
27F _{6S}	1.03	1.70	1.03	1.76	1.08	1.68	1.08	1.76
28F _{6S}	1.04	1.69	1.07	1.76	1.04	1.69	1.07	1.76
29F _{7S}	1.04	1.69	1.04	1.69	1.05	1.67	1.08	1.75
30F _{8S}	1.05	1.68	1.05	1.68	1.05	1.68	1.05	1.68
COT _T	1.36	1.36	1.36	1.36	1.36	1.36	1.36	1.36
2F _{1T}	1.33	1.38	1.35	1.37	1.37	1.35	1.38	1.33
3F _{2T}	1.26	1.34	1.37	1.36	1.37	1.36	1.37	1.34
4F _{2T}	1.34	1.34	1.32	1.38	1.35	1.35	1.38	1.32
5F _{2T}	1.31	1.40	1.31	1.33	1.39	1.34	1.39	1.33
6F _{2T}	1.33	1.37	1.37	1.33	1.33	1.37	1.37	1.33
7F _{3T}	1.28	1.28	1.34	1.37	1.36	1.36	1.37	1.34
8F _{3T}	1.26	1.36	1.34	1.32	1.39	1.34	1.38	1.34
9F _{3T}	1.27	1.33	1.39	1.32	1.33	1.38	1.36	1.35
10F _{3T}	1.35	1.33	1.33	1.35	1.32	1.37	1.37	1.32
11F _{3T}	1.35	1.35	1.31	1.40	1.32	1.32	1.40	1.31
12F _{4T}	1.28	1.30	1.28	1.34	1.38	1.35	1.38	1.34
13F _{4T}	1.28	1.27	1.36	1.33	1.33	1.38	1.36	1.35
14F _{4T}	1.28	1.28	1.33	1.39	1.32	1.32	1.39	1.33
15F _{4T}	1.26	1.35	1.35	1.26	1.35	1.37	1.37	1.35
16F _{4T}	1.27	1.34	1.38	1.34	1.27	1.34	1.38	1.34
17F _{4T}	1.26	1.37	1.32	1.34	1.35	1.31	1.39	1.33
18F _{4T}	1.25	1.36	1.34	1.31	1.40	1.31	1.34	1.37
19F _{4T}	1.34	1.34	1.34	1.34	1.34	1.34	1.34	1.34
20F _{5T}	1.28	1.29	1.29	1.28	1.35	1.37	1.37	1.35
21F _{5T}	1.28	1.30	1.27	1.36	1.34	1.32	1.40	1.33
22F _{5T}	1.29	1.28	1.35	1.36	1.26	1.34	1.38	1.33
23F _{5T}	1.27	1.27	1.36	1.32	1.34	1.34	1.33	1.36
24F _{5T}	1.25	1.35	1.35	1.25	1.37	1.33	1.33	1.37
25F _{6T}	1.28	1.29	1.28	1.30	1.28	1.34	1.38	1.34
26F _{6T}	1.27	1.29	1.29	1.27	1.36	1.33	1.33	1.36

27F _{6T}	1.27	1.31	1.27	1.34	1.36	1.26	1.36	1.35
28F _{6T}	1.28	1.28	1.35	1.35	1.28	1.28	1.35	1.35
29F _{7T}	1.27	1.30	1.28	1.28	1.30	1.27	1.35	1.35
30F _{8T}	1.29	1.29	1.29	1.29	1.29	1.29	1.29	1.29

COT_{TS}

2F _{1TS}	1.82	1.07	1.82	1.07	1.82	1.07	1.82	1.07
3F _{2TS}	1.68	1.07	1.82	1.08	1.82	1.08	1.82	1.07
4F _{2TS}	1.07	1.75	1.06	1.81	1.09	1.79	1.09	1.74
5F _{2TS}	1.75	1.08	1.76	1.06	1.83	1.07	1.83	1.06
6F _{2TS}	1.74	1.09	1.80	1.06	1.74	1.09	1.80	1.06
7F _{3TS}	1.68	1.03	1.76	1.09	1.80	1.08	1.82	1.07
8F _{3TS}	1.67	1.07	1.76	1.06	1.82	1.08	1.81	1.07
9F _{3TS}	1.68	1.07	1.82	1.06	1.75	1.09	1.81	1.07
10F _{3TS}	1.73	1.08	1.72	1.08	1.71	1.10	1.78	1.07
11F _{3TS}	1.76	1.06	1.74	1.09	1.75	1.06	1.83	1.06
12F _{4TS}	1.68	1.03	1.68	1.07	1.81	1.08	1.81	1.07
13F _{4TS}	1.67	1.04	1.74	1.07	1.74	1.09	1.80	1.07
14F _{4TS}	1.68	1.03	1.75	1.09	1.75	1.06	1.82	1.07
15F _{4TS}	1.67	1.08	1.76	1.02	1.77	1.08	1.81	1.07
16F _{4TS}	1.68	1.07	1.81	1.07	1.68	1.07	1.81	1.07
17F _{4TS}	1.66	1.08	1.73	1.07	1.75	1.06	1.81	1.08
18F _{4TS}	1.67	1.07	1.76	1.06	1.83	1.06	1.76	1.08
19F _{4TS}	1.70	1.09	1.70	1.09	1.70	1.09	1.70	1.09
20F _{5TS}	1.68	1.03	1.67	1.03	1.75	1.09	1.80	1.07
21F _{5TS}	1.67	1.04	1.67	1.08	1.75	1.06	1.82	1.08
22F _{5TS}	1.03	1.67	1.08	1.76	1.02	1.76	1.09	1.75
23F _{5TS}	1.64	1.04	1.73	1.08	1.72	1.08	1.72	1.09
24F _{5TS}	1.66	1.08	1.76	1.02	1.76	1.07	1.74	1.08
25F _{6TS}	1.03	1.68	1.03	1.67	1.03	1.75	1.09	1.75
26F _{6TS}	1.66	1.05	1.67	1.04	1.74	1.07	1.73	1.08
27F _{6TS}	1.67	1.04	1.67	1.08	1.76	1.02	1.76	1.08
28F _{6TS}	1.04	1.66	1.08	1.74	1.04	1.66	1.08	1.74
29F _{7TS}	1.67	1.04	1.66	1.04	1.68	1.04	1.75	1.08
30F _{8TS}	1.04	1.66	1.04	1.67	1.04	1.67	1.04	1.67

2CN _{1S}	1.02	1.87	1.07	1.85	1.07	1.84	1.08	1.74
3CN _{2S}	0.98	1.75	1.08	1.84	1.08	1.84	1.08	1.75
4CN _{2S}	1.03	1.76	1.02	1.87	1.07	1.84	1.09	1.72
5CN _{2S}	1.02	1.88	1.02	1.74	1.08	1.83	1.08	1.74
6CN _{2S}	1.02	1.86	1.08	1.74	1.02	1.86	1.08	1.74
7CN _{3S}	0.98	1.66	1.03	1.85	1.08	1.83	1.09	1.74
8CN _{3S}	0.98	1.77	1.03	1.72	1.09	1.82	1.08	1.75
9CN _{3S}	0.98	1.75	1.09	1.73	1.03	1.85	1.08	1.75
10CN _{3S}	1.03	1.75	1.03	1.76	1.02	1.85	1.08	1.73
11CN _{3S}	1.03	1.76	1.02	1.88	1.02	1.73	1.09	1.72
12CN _{4S}	0.98	1.67	0.98	1.74	1.09	1.82	1.09	1.74
13CN _{4S}	0.98	1.65	1.04	1.75	1.03	1.85	1.08	1.74
14CN _{4S}	0.98	1.66	1.03	1.86	1.03	1.72	1.09	1.74
15CN _{4S}	0.98	1.77	1.04	1.63	1.04	1.84	1.08	1.75
16CN _{4S}	0.98	1.75	1.08	1.75	0.98	1.75	1.08	1.75
17CN _{4S}	0.98	1.77	1.03	1.74	1.04	1.72	1.09	1.74
18CN _{4S}	0.98	1.77	1.03	1.72	1.10	1.72	1.03	1.77
19CN _{4S}	1.03	1.75	1.03	1.75	1.03	1.75	1.03	1.75
20CN _{5S}	0.99	1.67	0.98	1.65	1.04	1.83	1.09	1.73
21CN _{5S}	0.99	1.67	0.98	1.76	1.04	1.71	1.10	1.73
22CN _{5S}	0.99	1.65	1.03	1.76	0.99	1.74	1.09	1.74
23CN _{5S}	0.98	1.65	1.04	1.74	1.04	1.74	1.03	1.76
24CN _{5S}	0.98	1.76	1.04	1.63	1.05	1.74	1.03	1.77
25CN _{6S}	0.99	1.66	0.98	1.66	0.99	1.73	1.10	1.73
26CN _{6S}	0.99	1.67	0.99	1.64	1.05	1.73	1.04	1.75
27CN _{6S}	0.99	1.67	0.99	1.75	1.05	1.62	1.05	1.75
28CN _{6S}	0.99	1.65	1.04	1.76	0.99	1.65	1.04	1.76
29CN _{7S}	0.99	1.66	0.99	1.66	0.99	1.64	1.04	1.75
30CN _{8S}	0.994	1.651	0.993	1.655	0.994	1.654	0.994	1.652
2CN _{1T}	1.27	1.40	1.34	1.37	1.37	1.34	1.40	1.27
3CN _{2T}	1.21	1.31	1.39	1.35	1.38	1.35	1.39	1.31
4CN _{2T}	1.32	1.32	1.26	1.41	1.35	1.35	1.41	1.26
5CN _{2T}	1.26	1.44	1.26	1.28	1.42	1.32	1.42	1.28
6CN _{2T}	1.29	1.38	1.38	1.29	1.29	1.38	1.38	1.29
7CN _{3T}	1.24	1.24	1.30	1.39	1.36	1.36	1.39	1.30

8CN _{3T}	1.20	1.35	1.30	1.27	1.42	1.33	1.40	1.31
9CN _{3T}	1.22	1.29	1.43	1.27	1.30	1.39	1.36	1.32
10CN _{3T}	1.32	1.30	1.30	1.32	1.27	1.39	1.39	1.27
11CN _{3T}	1.33	1.33	1.24	1.45	1.27	1.27	1.45	1.24
12CN _{4T}	1.23	1.27	1.23	1.30	1.40	1.34	1.40	1.30
13CN _{4T}	1.24	1.23	1.34	1.31	1.28	1.40	1.37	1.31
14CN _{4T}	1.25	1.25	1.28	1.43	1.28	1.28	1.43	1.27
15CN _{4T}	1.21	1.31	1.34	1.20	1.33	1.37	1.37	1.33
16CN _{4T}	1.22	1.30	1.39	1.30	1.23	1.30	1.40	1.30
17CN _{4T}	1.21	1.36	1.28	1.31	1.34	1.25	1.43	1.29
18CN _{4T}	1.18	1.36	1.31	1.25	1.46	1.25	1.31	1.36
19CN _{4T}	1.31	1.31	1.31	1.31	1.31	1.31	1.31	1.31
20CN _{5T}	1.22	1.26	1.26	1.22	1.32	1.38	1.38	1.32
21CN _{5T}	1.24	1.28	1.21	1.34	1.32	1.26	1.44	1.28
22CN _{5T}	1.26	1.21	1.29	1.35	1.21	1.31	1.41	1.29
23CN _{5T}	1.23	1.23	1.35	1.29	1.32	1.32	1.29	1.35
24CN _{5T}	1.19	1.34	1.34	1.19	1.37	1.29	1.29	1.37
25CN _{6T}	1.25	1.24	1.26	1.24	1.25	1.30	1.41	1.30
26CN _{6T}	1.19	1.27	1.27	1.19	1.38	1.29	1.29	1.38
27CN _{6T}	1.22	1.30	1.22	1.32	1.35	1.19	1.36	1.30
28CN _{6T}	1.24	1.24	1.33	1.30	1.22	1.22	1.33	1.33
29CN _{7T}	1.19	1.32	1.22	1.21	1.33	1.19	1.35	1.35
30CN _{8T}	1.23	1.29	1.23	1.29	1.23	1.28	1.23	1.29
2CN _{1TS}	1.695	1.096	1.789	1.083	1.815	1.074	1.837	1.028
3CN _{2TS}	1.60	1.05	1.81	1.08	1.81	1.08	1.81	1.05
4CN _{2TS}	1.72	1.05	1.67	1.11	1.78	1.08	1.83	1.03
5CN _{2TS}	1.68	1.11	1.68	1.04	1.83	1.07	1.83	1.04
6CN _{2TS}	1.69	1.09	1.81	1.04	1.69	1.10	1.81	1.04
7CN _{3TS}	1.01	1.61	1.05	1.80	1.09	1.78	1.11	1.68
8CN _{3TS}	1.58	1.06	1.70	1.04	1.82	1.08	1.80	1.06
9CN _{3TS}	1.59	1.05	1.82	1.04	1.69	1.10	1.79	1.05
10CN _{3TS}	1.71	1.05	1.69	1.06	1.67	1.11	1.80	1.04
11CN _{3TS}	1.05	1.71	1.03	1.84	1.04	1.67	1.13	1.65
12CN _{4TS}	1.59	1.02	1.59	1.06	1.79	1.10	1.79	1.06
13CN _{4TS}	1.02	1.59	1.07	1.69	1.05	1.79	1.11	1.68

14CN _{4TS}	1.61	1.01	1.67	1.13	1.67	1.05	1.82	1.05
15CN _{4TS}	1.57	1.07	1.70	1.01	1.70	1.10	1.78	1.06
16CN _{4TS}	1.59	1.05	1.80	1.06	1.59	1.05	1.80	1.05
17CN _{4TS}	1.57	1.07	1.68	1.06	1.71	1.04	1.82	1.06
18CN _{4TS}	1.56	1.08	1.69	1.04	1.83	1.04	1.69	1.07
19CN _{4TS}	1.69	1.06	1.69	1.06	1.69	1.06	1.69	1.06
20CN _{5TS}	1.59	1.03	1.60	1.03	1.67	1.11	1.77	1.06
21CN _{5TS}	1.59	1.03	1.58	1.08	1.68	1.05	1.81	1.06
22CN _{5TS}	1.60	1.00	1.69	1.07	1.57	1.06	1.79	1.05
23CN _{5TS}	1.59	1.02	1.70	1.06	1.69	1.06	1.67	1.07
24CN _{5TS}	1.56	1.07	1.70	1.00	1.72	1.06	1.67	1.08
25CN _{6TS}	1.03	1.60	1.03	1.60	1.02	1.65	1.14	1.65
26CN _{6TS}	1.57	1.03	1.60	1.03	1.69	1.07	1.66	1.09
27CN _{6TS}	1.57	1.04	1.57	1.06	1.70	1.01	1.70	1.08
28CN _{6TS}	1.55	1.03	1.68	1.08	1.58	1.02	1.69	1.08
29CN _{7TS}	1.57	1.04	1.59	1.04	1.60	1.02	1.68	1.07
30CN _{8TS}	1.05	1.58	1.04	1.57	1.05	1.58	1.04	1.57

Table S3. NICS values (ppm) and HOMA indexes for all the compounds studied at B3LYP/6-311++G(d,p) computational level.

Comp.	NICS					HOMA	Comp.	NICS					HOMA
	-2	-1	0	1	2			-2	-1	0	1	2	
COT _S	0.7	1.0	4.8	1.0	0.7	-0.24							
2F _{1S}	0.5	0.5	3.9	0.9	0.7	-0.17	2CN _{1S}	0.3	0.3	3.9	0.5	0.4	-0.22
3F _{2S}	0.1	-0.5	1.8	-0.5	0.1	-0.20	3CN _{2S}	-0.1	-0.8	2.5	-0.8	-0.1	-0.25
4F _{2S}	0.4	0.1	2.5	0.1	0.4	-0.11	4CN _{2S}	0.1	-0.4	3.0	-0.4	0.1	-0.24
5F _{2S}	0.2	-0.1	2.7	0.6	0.7	-0.16	5CN _{2S}	0.1	-0.4	3.2	0.1	0.2	-0.24
6F _{2S}	0.3	0.1	2.9	0.8	0.8	-0.11	6CN _{2S}	-0.2	-0.6	3.0	-0.1	0.1	-0.24
7F _{3S}	-0.2	-1.2	0.1	-1.8	-0.4	-0.08	7CN _{3S}	-0.4	-1.4	1.5	-1.8	-0.5	-0.28
8F _{3S}	-0.2	-1.3	0.5	-0.9	0.0	-0.16	8CN _{3S}	-0.3	-1.3	1.9	-1.2	-0.3	-0.27
9F _{3S}	0.0	-0.8	1.2	-0.4	0.2	-0.16	9CN _{3S}	-0.4	-1.4	1.8	-1.2	-0.3	-0.28
10F _{3S}	0.1	-0.5	1.4	-0.2	0.4	-0.04	10CN _{3S}	-0.3	-1.1	2.2	-0.9	-0.1	-0.26
11F _{3S}	0.4	-0.1	1.6	-0.4	0.2	-0.12	11CN _{3S}	-0.1	-0.7	2.3	-0.9	-0.2	-0.26
12F _{4S}	-0.7	-2.4	-1.8	-2.7	-0.7	-0.09	12CN _{4S}	-0.7	-2.1	0.7	-2.4	-0.7	-0.32
13F _{4S}	-0.4	-1.9	-1.0	-2.0	-0.4	-0.03	13CN _{4S}	-0.6	-2.0	0.8	-2.1	-0.7	-0.32

14F _{4S}	-0.1	-1.2	-0.7	-2.1	-0.5	-0.07	14CN _{4S}	-0.5	-1.7	0.9	-2.2	-0.7	-0.32
15F _{4S}	-0.5	-2.1	-0.9	-1.4	-0.1	-0.08	15CN _{4S}	-0.7	-2.1	1.0	-1.7	-0.5	-0.32
16F _{4S}	-0.1	-1.4	-0.3	-1.4	-0.1	-0.19	16CN _{4S}	-0.7	-2.2	0.6	-2.2	-0.7	-0.34
17F _{4S}	-0.1	-1.4	-0.4	-1.4	-0.1	-0.10	17CN _{4S}	-0.5	-1.7	1.1	-1.7	-0.5	-0.31
18F _{4S}	-0.2	-1.5	-0.6	-1.5	-0.2	-0.14	18CN _{4S}	-0.5	-1.7	1.2	-1.7	-0.5	-0.30
19F _{4S}	0.0	-1.1	0.0	-1.1	0.0	0.05	19CN _{4S}	-0.5	-1.6	1.3	-1.6	-0.5	-0.29
20F _{5S}	-1.1	-3.5	-3.4	-3.3	-0.9	0.01	20CN _{5S}	-1.1	-2.9	-0.1	-2.8	-0.9	-0.37
21F _{5S}	-0.6	-2.5	-2.7	-3.1	-0.8	-0.06	21CN _{5S}	-0.8	-2.3	0.2	-2.7	-0.8	-0.36
22F _{5S}	-0.4	-2.3	-2.2	-2.7	-0.7	-0.08	22CN _{5S}	-0.8	-2.5	0.0	-2.7	-0.9	-0.38
23F _{5S}	-0.5	-2.2	-2.3	-2.7	-0.7	0.03	23CN _{5S}	-0.7	-2.3	0.2	-2.6	-0.8	-0.35
24F _{5S}	-0.6	-2.6	-2.1	-2.2	-0.4	-0.06	24CN _{5S}	-0.7	-2.4	0.3	-2.2	-0.7	-0.34
25F _{6S}	-1.1	-3.9	-4.6	-3.9	-1.1	-0.01	25CN _{6S}	-1.3	-3.6	-1.2	-3.6	-1.3	-0.43
26F _{6S}	-1.0	-3.6	-4.3	-3.7	-1.0	0.04	26CN _{6S}	-1.1	-3.1	-0.6	-3.2	-1.0	-0.41
27F _{6S}	-0.7	-3.0	-4.1	-3.9	-1.1	-0.01	27CN _{6S}	-1.0	-2.9	-0.7	-3.4	-1.2	-0.41
28F _{6S}	-0.6	-2.9	-3.9	-3.7	-1.1	0.02	28CN _{6S}	-1.0	-3.0	-0.7	-3.4	-1.1	-0.42
29F _{7S}	-1.2	-4.3	-5.8	-4.6	-1.4	0.06	29CN _{7S}	-1.2	-3.6	-1.3	-3.8	-1.2	-0.49
30F _{8S}	-1.5	-5.1	-7.2	-5.1	-1.5	0.08	30CN _{8S}	-1.8	-4.7	-2.9	-4.7	-1.8	-0.56
Comp.	-2	-1	0	1	2	HOMA	Comp.	-2	-1	0	1	2	HOMA
COT _T	-6.4	-11.0	-11.1	-11.0	-6.4	0.94							
2F _{1T}	-6.1	-10.8	-11.3	-10.8	-6.1	0.96	2CN _{1T}	-6.1	-10.5	-10.7	-10.5	-6.1	0.91
3F _{2T}	-6.1	-11.0	-11.9	-11.0	-6.1	0.96	3CN _{2T}	-5.8	-10.1	-10.2	-10.1	-5.8	0.87
4F _{2T}	-5.9	-10.6	-11.5	-10.6	-5.9	0.97	4CN _{2T}	-5.9	-10.1	-10.3	-10.1	-5.9	0.89
5F _{2T}	-6.0	-10.7	-11.6	-10.7	-6.0	0.97	5CN _{2T}	-5.7	-9.8	-9.9	-9.8	-5.7	0.87
6F _{2T}	-5.9	-10.7	-11.6	-10.7	-5.9	0.98	6CN _{2T}	-6.1	-10.4	-10.7	-10.4	-6.1	0.90
7F _{3T}	-6.1	-11.1	-12.5	-11.1	-6.1	0.96	7CN _{3T}	-5.9	-10.1	-10.4	-10.1	-5.9	0.82
8F _{3T}	-5.9	-10.8	-12.2	-10.8	-5.9	0.97	8CN _{3T}	-5.6	-9.6	-9.8	-9.6	-5.6	0.84
9F _{3T}	-6.0	-11.0	-12.4	-11.0	-6.0	0.97	9CN _{3T}	-5.6	-9.7	-9.9	-9.7	-5.6	0.85
10F _{3T}	-5.7	-10.6	-11.9	-10.6	-5.7	0.98	10CN _{3T}	-6.0	-10.2	-10.6	-10.2	-6.0	0.88
11F _{3T}	-5.6	-10.3	-11.5	-10.3	-5.6	0.98	11CN _{3T}	-5.7	-9.6	-9.9	-9.6	-5.7	0.84
12F _{4T}	-6.1	-11.4	-13.1	-11.4	-6.1	0.96	12CN _{4T}	-5.4	-9.4	-9.7	-9.4	-5.4	0.76
13F _{4T}	-6.0	-11.2	-13.1	-11.2	-6.0	0.97	13CN _{4T}	-5.4	-9.4	-9.7	-9.4	-5.4	0.81
14F _{4T}	-5.8	-11.0	-12.7	-11.0	-5.8	0.97	14CN _{4T}	-5.7	-9.7	-10.1	-9.7	-5.7	0.80
15F _{4T}	-5.8	-11.0	-12.7	-11.0	-5.8	0.97	15CN _{4T}	-5.7	-9.6	-10.0	-9.6	-5.7	0.81
16F _{4T}	-6.0	-11.2	-13.1	-11.2	-6.0	0.97	16CN _{4T}	-5.5	-9.4	-9.8	-9.4	-5.5	0.83
17F _{4T}	-5.8	-10.9	-12.7	-10.9	-5.8	0.98	17CN _{4T}	-5.4	-9.3	-9.6	-9.3	-5.4	0.83

18F _{4T}	-5.7	-10.7	-12.4	-10.7	-5.7	0.97	18CN _{4T}	-5.3	-9.0	-9.3	-9.0	-5.3	0.80
19F _{4T}	-5.6	-10.7	-12.3	-10.7	-5.6	0.99	19CN _{4T}	-6.0	-10.1	-10.5	-10.1	-6.0	0.88
20F _{5T}	-6.0	-11.5	-13.5	-11.5	-6.0	0.95	20CN _{5T}	-5.5	-9.3	-9.5	-9.2	-5.5	0.72
21F _{5T}	-5.9	-11.2	-13.4	-11.2	-5.9	0.96	21CN _{5T}	-5.2	-9.0	-9.4	-9.0	-5.2	0.74
22F _{5T}	-6.0	-11.4	-13.6	-11.4	-6.0	0.97	22CN _{5T}	-5.2	-9.1	-9.4	-9.1	-5.2	0.78
23F _{5T}	-5.7	-11.0	-13.1	-11.0	-5.7	0.97	23CN _{5T}	-5.5	-9.4	-9.9	-9.4	-5.5	0.80
24F _{5T}	-5.5	-10.7	-12.7	-10.7	-5.5	0.97	24CN _{5T}	-5.4	-9.1	-9.5	-9.1	-5.4	0.78
25F _{6T}	-6.1	-11.7	-14.3	-11.7	-6.1	0.95	25CN _{6T}	-5.2	-9.0	-9.0	-8.8	-5.2	0.70
26F _{6T}	-5.8	-11.3	-13.7	-11.3	-5.8	0.96	26CN _{6T}	-5.1	-8.7	-8.8	-8.7	-5.1	0.70
27F _{6T}	-5.9	-11.5	-14.1	-11.5	-5.9	0.96	27CN _{6T}	-5.0	-8.6	-8.8	-8.6	-5.0	0.73
28F _{6T}	-5.9	-11.5	-14.0	-11.5	-5.9	0.97	28CN _{6T}	-5.4	-9.2	-9.8	-9.2	-5.4	0.76
29F _{7T}	-6.0	-11.8	-14.6	-11.8	-6.0	0.95	29CN _{7T}	-4.6	-8.0	-8.0	-8.1	-4.6	0.64
30F _{8T}	-5.9	-12.0	-15.1	-12.0	-5.9	0.94	30CN _{8T}	-4.3	-7.7	-7.2	-7.7	-4.3	0.62

Comp.	-2	-1	0	1	2	HOMA	Comp.	-2	-1	0	1	2	HOMA
COT _{TS}	16.3	32.5	41.0	32.5	16.3	-0.22							
2F _{1TS}	15.0	30.1	38.0	30.1	15.0	-0.17	2CN _{1TS}	15.6	31.3	39.6	31.3	15.6	-0.21
3F _{2TS}	14.0	28.3	35.5	28.3	14.0	-0.12	3CN _{2TS}	15.3	30.8	38.9	30.8	15.3	-0.22
4F _{2TS}	13.8	27.9	35.1	27.9	13.8	-0.08	4CN _{2TS}	14.7	29.7	37.7	29.7	14.7	-0.19
5F _{2TS}	13.7	27.9	35.0	27.9	13.7	-0.15	5CN _{2TS}	15.1	30.4	38.5	30.4	15.1	-0.20
6F _{2TS}	13.8	28.0	35.2	28.0	13.8	-0.07	6CN _{2TS}	14.4	29.1	37.0	29.1	14.4	-0.19
7F _{3TS}	13.2	26.7	33.3	26.7	13.2	-0.17	7CN _{3TS}	14.6	29.6	37.4	29.6	14.6	-0.24
8F _{3TS}	12.9	26.2	32.7	26.2	12.9	-0.08	8CN _{3TS}	14.4	29.0	36.8	29.0	14.4	-0.21
9F _{3TS}	12.7	25.9	32.4	25.9	12.7	-0.07	9CN _{3TS}	13.9	27.9	35.4	27.9	13.9	-0.21
10F _{3TS}	12.7	25.8	32.4	25.8	12.7	0.04	10CN _{3TS}	13.4	27.5	34.9	27.5	13.4	-0.17
11F _{3TS}	12.6	25.6	32.0	25.6	12.6	-0.11	11CN _{3TS}	13.7	27.9	35.4	27.9	13.7	-0.19
12F _{4TS}	12.1	24.7	30.7	24.7	12.1	-0.14	12CN _{4TS}	13.7	27.8	35.2	27.8	13.7	-0.28
13F _{4TS}	11.8	24.2	30.0	24.2	11.8	-0.10	13CN _{4TS}	13.5	27.3	34.6	27.3	13.5	-0.22
14F _{4TS}	12.1	24.6	30.5	24.6	12.1	-0.16	14CN _{4TS}	13.0	26.6	33.7	26.6	13.0	-0.23
15F _{4TS}	12.2	24.8	30.7	24.8	12.2	-0.16	15CN _{4TS}	13.1	26.8	34.0	26.8	13.1	-0.21
16F _{4TS}	11.9	24.3	30.1	24.3	11.9	-0.03	16CN _{4TS}	12.7	25.7	32.6	25.7	12.7	-0.21
17F _{4TS}	11.6	23.8	29.6	23.8	11.6	0.00	17CN _{4TS}	13.0	26.3	33.4	26.3	13.0	-0.19
18F _{4TS}	11.6	23.8	29.6	23.8	11.6	-0.07	18CN _{4TS}	13.3	26.9	34.1	26.9	13.3	-0.20
19F _{4TS}	11.6	23.9	29.8	23.9	11.6	0.17	19CN _{4TS}	12.4	25.6	32.5	25.6	12.4	-0.15
20F _{5TS}	11.4	23.3	28.7	23.3	11.4	-0.19	20CN _{5TS}	12.5	25.7	32.5	25.7	12.5	-0.32
21F _{5TS}	11.0	22.6	27.8	22.6	11.0	-0.10	21CN _{5TS}	12.5	25.3	32.1	25.3	12.5	-0.26

22F _{5TS}	11.3	23.1	28.4	23.1	11.3	-0.20	22CN _{5TS}	12.2	24.9	31.6	24.9	12.2	-0.23
23F _{5TS}	11.1	22.7	28.0	22.7	11.1	0.02	23CN _{5TS}	12.0	24.7	31.3	24.7	12.0	-0.21
24F _{5TS}	11.1	22.6	27.9	22.6	11.1	-0.12	24CN _{5TS}	12.1	25.0	31.7	25.0	12.1	-0.20
25F _{6TS}	10.6	21.6	26.4	21.6	10.6	-0.28	25CN _{6TS}	12.2	24.9	31.6	24.9	12.2	-0.34
26F _{6TS}	10.4	21.3	26.2	21.3	10.4	-0.11	26CN _{6TS}	11.3	23.6	29.9	23.6	11.3	-0.29
27F _{6TS}	10.4	21.2	25.8	21.2	10.4	-0.18	27CN _{6TS}	11.7	24.0	30.5	24.0	11.7	-0.24
28F _{6TS}	10.5	21.5	26.3	21.5	10.5	-0.09	28CN _{6TS}	11.3	23.4	29.7	23.4	11.3	-0.23
29F _{7TS}	9.8	20.0	24.3	20.0	9.8	-0.20	29CN _{7TS}	10.8	22.5	28.4	22.5	10.8	-0.33
30F _{8TS}	9.2	18.7	22.4	18.7	9.2	-0.26	30CN _{8TS}	10.7	21.8	27.6	21.8	10.7	-0.40

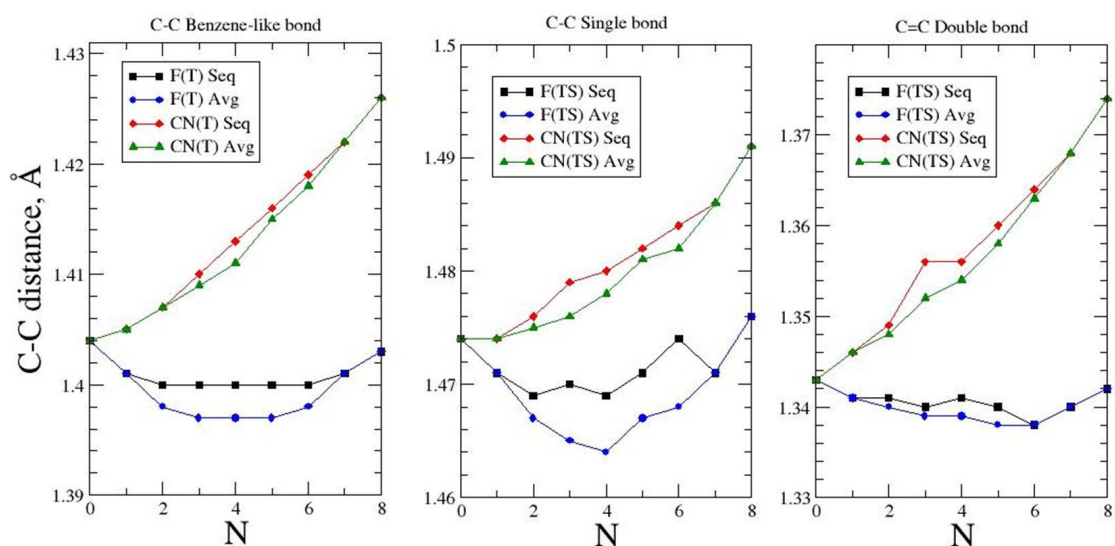


Figure S1. Evolution of the C-C distance upon substitution of the ring, for triplet and transition state in F and CN compounds. Sequential substitution (Seq) and average over the distances with the same N (Avg) are shown.