

• C-C • C-N • C-O • C-S • C-P

$R^2 = 0.85$

RMSE = 2.4 kcal mol<sup>-1</sup>

Marcus  $E_a$  error / kcal mol<sup>-1</sup>

Predicted  $E_a$  error =  $9.2n_3 + 1.2$

0

5

10

15

20

0

5

10

15

20

Predicted  $E_a$  error / kcal mol<sup>-1</sup>

