

Simultaneous quantification of ion pairs in water via infrared attenuated total reflection spectroscopy

- Supplementary Information -

F. Rauh ^a, B. Mizaikoff* ^a

^a Institute of Analytical and Bioanalytical Chemistry, Ulm University, Germany,

boris.mizaikoff@uni-ulm.de

Table S1: concentrations of each salt in the calibration and validation mixtures in % (w/v)

Calibration	Salt conc. in % (w/v)						
	NaCl	NaBr	KCl	KBr	CaCl ₂	MgCl ₂	Na ₂ SO ₄
cal_1	2,4	2,4	2,4	2,4	2,4	2,4	0,09
cal_2	2,4	0,8	4,0	4,0	3,2	4,0	0,09
cal_3	0,8	4,0	4,0	3,2	4,0	2,4	0,06
cal_4	4,0	4,0	3,2	4,0	2,4	1,6	0,12
cal_5	4,0	3,2	4,0	2,4	1,6	3,2	0,12
cal_6	3,2	4,0	2,4	1,6	3,2	3,2	0,03
cal_7	4,0	2,4	1,6	3,2	3,2	0,8	0,12
cal_8	2,4	1,6	3,2	3,2	0,8	3,2	0,09
cal_9	1,6	3,2	3,2	0,8	3,2	2,4	0,15

cal_10	3,2	3,2	0,8	3,2	2,4	4,0	0,03
cal_11	3,2	0,8	3,2	2,4	4,0	0,8	0,03
cal_12	0,8	3,2	2,4	4,0	0,8	0,8	0,06
cal_13	3,2	2,4	4,0	0,8	0,8	1,6	0,03
cal_14	2,4	4,0	0,8	0,8	1,6	0,8	0,09
cal_15	4,0	0,8	0,8	1,6	0,8	2,4	0,12
cal_16	0,8	0,8	1,6	0,8	2,4	3,2	0,06
cal_17	0,8	1,6	0,8	2,4	3,2	1,6	0,06
cal_18	1,6	0,8	2,4	3,2	1,6	1,6	0,15
cal_19	0,8	2,4	3,2	1,6	1,6	4,0	0,06
cal_20	2,4	3,2	1,6	1,6	4,0	1,6	0,09
cal_21	3,2	1,6	1,6	4,0	1,6	2,4	0,03
cal_22	1,6	1,6	4,0	1,6	2,4	0,8	0,15
cal_23	1,6	4,0	1,6	2,4	0,8	4,0	0,15
cal_24	4,0	1,6	2,4	0,8	4,0	4,0	0,12
cal_25	1,6	2,4	0,8	4,0	4,0	3,2	0,15

Validation	Salt conc. in % (w/v)						
Solution no.	NaCl	NaBr	KCl	KBr	CaCl ₂	MgCl ₂	Na ₂ SO ₄
val_1	2,8	1,2	2,0	1,2	2,8	2,0	0,135
val_2	1,2	2,0	3,6	2,0	2,0	1,2	0,135
val_3	2,8	2,8	1,2	2,8	1,2	3,6	0,075
val_4	3,6	3,6	2,0	3,6	2,0	1,2	0,045
val_5	2,0	3,6	3,6	3,6	2,8	2,0	0,045
val_6	2,0	1,2	2,8	1,2	3,6	3,6	0,105
val_7	3,6	2,8	2,8	2,8	1,2	2,8	0,075

val_8	1,2	2,0	1,2	2,0	3,6	2,8	0,105
-------	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-------

Data Processing:

The following figure S1 illustrates the way in which the raw data was processed before a multivariate model was built. The diagrams show spectra of the solutions cal_1 to cal_5 from table 1, in order to get a simplified but comprehensive overview over the data processing.

- a) Shows the raw data
- b) Shows the data after atmospheric compensation (removal of spectral features arising from atmospheric carbon dioxide and water)
- c) Shows the difference spectra: a spectrum of Millipore Water was subtracted from each salt solution spectrum, only the changes induced upon the addition of ion pairs are visible
- d) Spectral region containing no or too little information and/or interfering absorption features are excluded
- e) Spectra are smoothed
- f) All spectra are mean centered. This means that the mean of each y-value is calculated and subtracted from the respective y-value of each spectrum.

