Electronic Supplementary Material (ESI) for Physical Chemistry Chemical Physics.

Understanding the adsorption of ionic liquids onto zeolite ZSM-5 from aqueous solution: Experimental and Computational Modelling

Kiki Adi Kurnia,[1],* Yuly Kusumawati,[2] Didik Prasetyoko,[2] Hellna Tehubijuluw,[2] Mochammad Amin Alamsjah,[1] Joao A.P. Coutinho[3]

[1]Department of Marine, Faculty of Fisheries and Marines, Universitas Airlangga, Kampus C Jalan Mulyorejo, Surabaya 60115 Indonesia.

[2]Department of Chemistry, Faculty of Science, Institut Teknologi Sepuluh Nopember, Kampus ITS Sukolilo, Surabaya 60111 Indonesia.

[3]CICECO – Aveiro Institute of Material, Department of Chemistry, Universidade de Aveiro, Aveiro 3810-193 Portugal.

ELECTRONIC SUPPLEMENTARY INFORMATION

Table S1 List of ionic liquids used in the present work, together with acronym, supplier, CAS-Number and other properties.

No	Full Name	Acronym	Supplier	CAS Number	Chemical Formula	Molecular Weight	Purity Wt%
1	1-butyl-3-methylimidazolium acetate	$[C_4C_1im][Ac]$	Merck	284049-75-8	$C_{10}H_{18}N_2O_2$	198.26	95
2	1-butyl-3-methylimidazolium chloride	$[C_4C_1im]Cl$	Merck	79917-90-1	$C_8H_{15}ClN_2$	174.67	98
3	1-Butyl-3-methylimidazolium dimethyl phosphate	$[C_4C_1im][DMP]$	Iolitec	891772-94-4	$C_{10}H_{21}N_2O_4P$	264.26	98
4	1-butyl-3-methylimidazolium bromide	$[C_4C_1im]Br$	Merck	85100-77-2	$C_8H_{15}BrN_2$	219.12	97
5	1-butyl-3-methylimidazolium trifluoromethanesulfonate	$[C_4C_1im][CF_3SO_3]$	Merck	174899-66-2	$C_9H_{15}F_3N_2O_3S$	288.29	97
6	1-Butyl-3-methylimidazolium dicyanamide	$[C_4C_1im][N(CN)_2]$	Merck	448245-52-1	$C_{10}H_{15}N_5$	205.26	97
7	1-Butyl-3-methylimidazolium thiocyanate	$[C_4C_1im][SCN]$	Merck	344790-87-0	$C_9H_{15}N_3S$	197.30	95
8	1-Butyl-3-methylimidazolium hydrogen sulfate	$[C_4C_1im][HSO_4]$	Merck	262297-13-2	$C_8H_{16}N_2O_4S$	236.29	95
9	1-Butyl-3-methylimidazolium methyl sulfate	$[C_4C_1im][MeSO_4]$	Merck	401788-98-5	$C_9H_{18}N_2O_4S$	250.32	97
10	1-Butyl-3-methylimidazolium methanesulfonate	$[C_4C_1im][CH_3SO_3]$	Merck	342789-81-5	$C_9H_{18}N_2O_3S$	234.32	95
11	1-Butyl-3-methylimidazolium trifluoroacetate	$[C_4C_1im][TFA]$	Iolitec	174899-94-6	$C_{10}H_{15}F_3N_2O_2$	252.11	97
12	1-Butyl-3-methylimidazolium hexafluorophosphate	$[C_4C_1im][PF_6]$	Iolitec	174501-64 -5	$C_8H_{15}F_6N_2P$	284.18	99
13	1-Butyl-3-methylimidazolium tetrafluoroborate	$[C_4C_1im][BF_4]$	Iolitec	174501-65-6	$C_8H_{15}BF_4N_2$	226.02	99
14	1-Butyl-3-methylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide	$[C_4C_1im][Tf_2N]$	Iolitec	174899-83-3	$C_{10}H_{15}F_6N_3O_4S_2$	419.37	99
15	1,3-Dimethylimidazolium chloride	$[C_1C_1im]Cl$	Merck	79917-88-7	$C_5H_9ClN_2$	132.59	98
16	1-Ethyl-3-methylimidazolium chloride	$[C_2C_1im]Cl$	Iolitec	65039-09-0	$C_6H_{11}ClN_2$	146.62	98
17	1-Methyl-3-propylimidazolium chloride	$[C_3C_1im]Cl$	Iolitec	79917-89-8	$C_7H_{13}ClN_2$	160.64	98
18	1-Hexyl-3-methylimidazolium chloride	$[C_6C_1im]Cl$	Iolitec	171058-17-6	$C_{10}H_{19}ClN_2$	202.72	99
19	1-Methyl-3-octylimidazolium chloride	$[C_8C_1im]Cl$	Iolitec	64697-40-1	$C_{12}H_{23}ClN_2$	230.78	97
20	1-Decyl-3-methylimidazolium chloride	$[C_{10}C_1im]Cl$	Iolitec	171058-18-7	$C_{14}H_{27}ClN_2$	258.83	98

21	1-Butyl-1-methylpiperidinium chloride	$[C_4C_1pip]Cl$	Iolitec	845790-13-8	$C_{10}H_{22}ClN$	191.74	99
22	1-Butyl-2-methylpyridinium chloride	o-$[C_4C_1py]Cl$	Iolitec	112400-85-8	$C_{10}H_{16}ClN$	185.69	99
23	1-Butyl-4-methylpyridinium chloride	p-$[C_4C_1py]Cl$	Iolitec	112400-86-9	$C_{10}H_{16}ClN$	185.69	99
24	1-Butyl-1-methylpyrrolidinium chloride	$[C_4C_1pyrr]Cl$	Iolitec	479500-35-1	$C_9H_{20}ClN$	177.72	99
25	Choline chloride	[Ch]Cl	Merck	67-48-1	$C_5H_{14}ClNO$	139.62	98
26	Tetrabutylammonium chloride	$[N_{4444}]Cl$	Merck	1112-67-0	$C_{16}H_{36}ClN$	277.92	97
27	Tetrabutylphosphonium chloride	$[P_{4444}]Cl$	Iolitec	2304-30-5	$C_{16}H_{36}ClP$	294.88	95

Table S2 Experimental adsorption isotherm and modelling using Langmuir, Freundlich, and Redlich-Peterson models

C_0 (mmol·L^{-1})	C_e (mmol·L^{-1})	Q_e (mmol·g^{-1})	K_d (L·g^{-1})	Removal (%)	Langmuir		Freundlich		Redlich–Peterson	
					$Q_{e,L}$ (mmol·g^{-1})	ARD	$Q_{e,F}$ (mmol·g^{-1})	ARD	$Q_{e,RP}$ (mmol·g$^{-1)}$	ARD
[C_4C_1im][Ac]										
10.09	4.14	0.2975	7.2	59.0	0.2890	0.0084	0.2986	0.0012	0.2966	0.0008
8.83	3.48	0.2675	7.7	60.6	0.2675	0.0000	0.2675	0.0000	0.2675	0.0000
7.57	2.84	0.2361	8.3	62.4	0.2425	0.0063	0.2357	0.0004	0.2372	0.0011
6.30	2.24	0.2030	9.0	64.4	0.2132	0.0101	0.2031	0.0000	0.2055	0.0025
5.04	1.63	0.1709	10.5	67.8	0.1750	0.0041	0.1658	0.0051	0.1684	0.0025
3.78	1.10	0.1339	12.1	70.8	0.1339	0.0000	0.1299	0.0040	0.1317	0.0022
2.52	0.65	0.0934	14.3	74.1	0.0891	0.0043	0.0934	0.0000	0.0934	0.0000
1.26	0.27	0.0496	18.4	78.6	0.0410	0.0085	0.0534	0.0039	0.0504	0.0009
0.50	0.08	0.0212	26.3	84.0	0.0130	0.0082	0.0250	0.0038	0.0202	0.0010
					AARD	0.0056	AARD	0.0021	AARD	0.0012
[C_4C_1im]Cl										
11.45	5.26	0.3097	5.9	54.1	0.3000	0.0097	0.3097	0.0000	0.3077	0.0019
10.02	4.40	0.2810	6.4	56.1	0.2810	0.0000	0.2812	0.0002	0.2810	0.0000
8.59	3.56	0.2514	7.1	58.6	0.2575	0.0061	0.2509	0.0006	0.2519	0.0005
7.16	2.76	0.2197	8.0	61.4	0.2286	0.0089	0.2188	0.0009	0.2205	0.0008
5.73	2.01	0.1857	9.2	64.9	0.1926	0.0069	0.1843	0.0014	0.1857	0.0000
4.29	1.33	0.1483	11.2	69.1	0.1483	0.0000	0.1473	0.0010	0.1471	0.0012
2.86	0.75	0.1056	14.1	73.8	0.0976	0.0080	0.1083	0.0027	0.1051	0.0005

1.43	0.29	0.0570	19.5	79.6	0.0436	0.0133	0.0650	0.0081	0.0571	0.0002
0.57	0.08	0.0247	31.1	86.2	0.0127	0.0119	0.0322	0.0075	0.0219	0.0027
					AARD	0.0072	AARD	0.0025	AARD	0.0009
$[C_4C_1im][DMP]$										
7.57	2.87	0.2348	8.2	62.0	0.2279	0.0069	0.2348	0.0000	0.2348	0.0000
6.62	2.40	0.2109	8.8	63.7	0.2108	0.0001	0.2109	0.0001	0.2125	0.0016
5.68	1.92	0.1876	9.7	66.1	0.1891	0.0015	0.1844	0.0032	0.1870	0.0006
4.73	1.49	0.1618	10.8	68.4	0.1646	0.0027	0.1583	0.0035	0.1612	0.0007
3.78	1.10	0.1341	12.2	70.9	0.1364	0.0023	0.1317	0.0024	0.1341	0.0001
2.84	0.75	0.1045	13.9	73.6	0.1045	0.0000	0.1044	0.0000	0.1053	0.0008
1.89	0.44	0.0724	16.3	76.5	0.0695	0.0029	0.0762	0.0039	0.0746	0.0022
0.95	0.18	0.0385	21.9	81.4	0.0309	0.0076	0.0436	0.0051	0.0385	0.0000
0.38	0.06	0.0161	28.7	85.2	0.0104	0.0057	0.0219	0.0058	0.0156	0.0006
					AARD	0.0033	AARD	0.0027	AARD	0.0007
$[C_4C_1im]Br$										
9.13	3.74	0.2692	7.2	59.0	0.2628	0.0063	0.2709	0.0017	0.2692	0.0000
7.99	3.10	0.2442	7.9	61.2	0.2442	0.0000	0.2442	0.0000	0.2445	0.0003
6.85	2.49	0.2176	8.7	63.6	0.2218	0.0042	0.2165	0.0011	0.2182	0.0006
5.70	1.91	0.1895	9.9	66.4	0.1943	0.0048	0.1871	0.0024	0.1894	0.0001
4.56	1.39	0.1589	11.5	69.6	0.1615	0.0026	0.1566	0.0023	0.1584	0.0005
3.42	0.92	0.1251	13.6	73.1	0.1234	0.0016	0.1250	0.0001	0.1251	0.0000
2.28	0.52	0.0880	16.8	77.1	0.0803	0.0077	0.0914	0.0035	0.0881	0.0002
1.14	0.20	0.0471	23.6	82.5	0.0348	0.0123	0.0537	0.0066	0.0457	0.0014

0.46	0.07	0.0195	29.3	85.4	0.0123	0.0072	0.0293	0.0098	0.0196	0.0002
					AARD	0.0052	AARD	0.0031	AARD	0.0004
$[C_4C_1im][CF_3SO_3]$										
6.94	1.85	0.2545	13.8	73.4	0.2488	0.0057	0.2535	0.0010	0.2528	0.0017
6.07	1.56	0.2255	14.4	74.3	0.2255	0.0000	0.2255	0.0000	0.2255	0.0000
5.20	1.28	0.1961	15.3	75.4	0.1994	0.0033	0.1967	0.0007	0.1972	0.0011
4.34	1.01	0.1663	16.5	76.7	0.1698	0.0035	0.1668	0.0005	0.1674	0.0011
3.47	0.75	0.1360	18.1	78.4	0.1365	0.0006	0.1356	0.0004	0.1361	0.0001
2.60	0.51	0.1045	20.4	80.3	0.1009	0.0035	0.1041	0.0004	0.1041	0.0004
1.73	0.30	0.0719	24.3	83.0	0.0630	0.0090	0.0711	0.0009	0.0702	0.0018
0.87	0.12	0.0372	30.0	85.7	0.0283	0.0089	0.0389	0.0017	0.0370	0.0002
0.35	0.05	0.0148	29.2	85.4	0.0119	0.0029	0.0209	0.0061	0.0186	0.0038
					AARD	0.0042	AARD	0.0013	AARD	0.0011
$[C_4C_1im][N(CN)_2]$										
9.74	3.04	0.3349	11.0	68.8	0.3269	0.0081	0.3356	0.0006	0.3347	0.0003
8.53	2.56	0.2984	11.7	70.0	0.2984	0.0000	0.2984	0.0000	0.2984	0.0000
7.31	2.09	0.2609	12.5	71.4	0.2659	0.0050	0.2604	0.0005	0.2610	0.0000
6.09	1.65	0.2221	13.5	72.9	0.2295	0.0075	0.2220	0.0000	0.2227	0.0007
4.87	1.23	0.1821	14.8	74.8	0.1880	0.0058	0.1823	0.0002	0.1827	0.0005
3.65	0.84	0.1409	16.9	77.1	0.1407	0.0002	0.1405	0.0004	0.1401	0.0008
2.44	0.49	0.0975	20.1	80.1	0.0898	0.0077	0.0975	0.0000	0.0956	0.0019
1.22	0.20	0.0511	26.1	83.9	0.0394	0.0117	0.0529	0.0018	0.0492	0.0019
0.49	0.07	0.0208	29.1	85.4	0.0150	0.0058	0.0268	0.0060	0.0226	0.0018

					AARD	0.0058	AARD	0.0011	AARD	0.0009
$[C_4C_1im][SCN]$										
10.14	2.96	0.3586	12.1	70.8	0.3504	0.0082	0.3586	0.0000	0.3585	0.0001
8.87	2.50	0.3185	12.7	71.8	0.3185	0.0000	0.3182	0.0003	0.3185	0.0000
7.60	2.06	0.2772	13.5	72.9	0.2832	0.0060	0.2777	0.0006	0.2781	0.0009
6.34	1.63	0.2351	14.4	74.2	0.2434	0.0083	0.2361	0.0010	0.2362	0.0010
5.07	1.22	0.1922	15.7	75.9	0.1983	0.0060	0.1928	0.0006	0.1922	0.0000
3.80	0.84	0.1482	17.7	78.0	0.1479	0.0003	0.1478	0.0004	0.1462	0.0020
2.53	0.49	0.1023	21.0	80.8	0.0937	0.0086	0.1012	0.0012	0.0981	0.0043
1.27	0.19	0.0536	27.6	84.7	0.0403	0.0133	0.0530	0.0006	0.0485	0.0051
0.51	0.07	0.0217	29.3	85.4	0.0158	0.0058	0.0269	0.0053	0.0224	0.0008
					AARD	0.0063	AARD	0.0011	AARD	0.0016
$[C_4C_1im][HSO_4]$										
8.46	2.86	0.2802	9.8	66.2	0.2726	0.0076	0.2818	0.0015	0.2796	0.0007
7.41	2.37	0.2520	10.6	68.0	0.2518	0.0002	0.2520	0.0000	0.2520	0.0000
6.35	1.90	0.2222	11.7	70.0	0.2273	0.0051	0.2216	0.0006	0.2230	0.0008
5.29	1.46	0.1913	13.1	72.3	0.1977	0.0064	0.1897	0.0017	0.1917	0.0004
4.23	1.06	0.1586	15.0	74.9	0.1629	0.0043	0.1568	0.0018	0.1584	0.0002
3.17	0.71	0.1234	17.5	77.7	0.1234	0.0000	0.1234	0.0000	0.1232	0.0001
2.12	0.39	0.0862	22.0	81.4	0.0780	0.0082	0.0872	0.0010	0.0839	0.0023
1.06	0.16	0.0448	27.5	84.6	0.0360	0.0088	0.0519	0.0071	0.0448	0.0000
0.42	0.05	0.0184	33.7	87.1	0.0128	0.0057	0.0272	0.0088	0.0189	0.0004
					AARD	0.0051	AARD	0.0025	AARD	0.0006

$[C_4C_1im][MeSO_4]$										
7.99	2.82	0.2583	9.1	64.7	0.2528	0.0055	0.2596	0.0014	0.2583	0.0000
6.99	2.34	0.2324	9.9	66.5	0.2324	0.0000	0.2324	0.0000	0.2328	0.0004
5.99	1.88	0.2059	11.0	68.7	0.2078	0.0019	0.2036	0.0023	0.2052	0.0006
4.99	1.45	0.1770	12.2	70.9	0.1800	0.0030	0.1750	0.0021	0.1772	0.0001
3.99	1.06	0.1469	13.9	73.5	0.1474	0.0005	0.1449	0.0020	0.1468	0.0000
3.00	0.71	0.1143	16.1	76.3	0.1110	0.0033	0.1143	0.0001	0.1150	0.0007
2.00	0.40	0.0800	20.1	80.1	0.0701	0.0099	0.0811	0.0012	0.0794	0.0005
1.00	0.16	0.0420	26.3	84.0	0.0310	0.0110	0.0471	0.0051	0.0421	0.0002
0.40	0.05	0.0174	34.4	87.3	0.0103	0.0071	0.0238	0.0064	0.0175	0.0000
					AARD	0.0047	AARD	0.0023	AARD	0.0003
$[C_4C_1im][CH_3SO_3]$										
8.54	3.50	0.2519	7.2	59.0	0.2453	0.0066	0.2532	0.0013	0.2519	0.0000
7.47	2.90	0.2282	7.9	61.1	0.2282	0.0000	0.2282	0.0000	0.2286	0.0004
6.40	2.34	0.2030	8.7	63.4	0.2077	0.0048	0.2023	0.0006	0.2038	0.0009
5.33	1.80	0.1769	9.9	66.3	0.1820	0.0051	0.1743	0.0026	0.1764	0.0006
4.27	1.31	0.1479	11.3	69.3	0.1520	0.0041	0.1460	0.0019	0.1477	0.0003
3.20	0.87	0.1165	13.4	72.8	0.1165	0.0000	0.1163	0.0002	0.1165	0.0000
2.13	0.50	0.0818	16.4	76.6	0.0765	0.0053	0.0850	0.0033	0.0825	0.0008
1.07	0.19	0.0437	22.5	81.8	0.0338	0.0099	0.0501	0.0064	0.0437	0.0000
0.43	0.06	0.0185	32.5	86.7	0.0106	0.0079	0.0252	0.0067	0.0172	0.0013
					AARD	0.0048	AARD	0.0026	AARD	0.0005
$[C_4C_1im][TFA]$										

7.93	2.35	0.2794	11.9	70.4	0.2745	0.0048	0.2794	0.0000	0.2794	0.0000
6.94	1.97	0.2485	12.6	71.6	0.2485	0.0000	0.2477	0.0008	0.2480	0.0005
5.95	1.62	0.2164	13.3	72.7	0.2202	0.0038	0.2164	0.0000	0.2168	0.0004
4.96	1.28	0.1838	14.3	74.2	0.1881	0.0043	0.1838	0.0000	0.1842	0.0004
3.97	0.96	0.1502	15.6	75.7	0.1530	0.0029	0.1508	0.0006	0.1511	0.0009
2.97	0.66	0.1158	17.6	77.9	0.1136	0.0022	0.1159	0.0001	0.1158	0.0000
1.98	0.38	0.0800	20.9	80.7	0.0717	0.0083	0.0797	0.0003	0.0791	0.0009
0.99	0.15	0.0422	28.5	85.1	0.0299	0.0123	0.0413	0.0009	0.0399	0.0022
0.40	0.05	0.0173	34.2	87.2	0.0105	0.0068	0.0196	0.0023	0.0181	0.0008
					AARD	0.0051	AARD	0.0006	AARD	0.0007
$[C_4C_1im][BF_4]$										
8.85	2.75	0.3048	11.1	68.9	0.2973	0.0074	0.3054	0.0007	0.3032	0.0015
7.74	2.29	0.2727	11.9	70.4	0.2727	0.0000	0.2727	0.0000	0.2727	0.0000
6.64	1.85	0.2393	12.9	72.1	0.2444	0.0050	0.2395	0.0001	0.2409	0.0016
5.53	1.43	0.2050	14.3	74.1	0.2108	0.0058	0.2046	0.0004	0.2068	0.0018
4.42	1.03	0.1695	16.4	76.6	0.1711	0.0016	0.1678	0.0017	0.1695	0.0000
3.32	0.69	0.1315	19.1	79.3	0.1274	0.0041	0.1307	0.0008	0.1309	0.0007
2.21	0.38	0.0914	23.9	82.7	0.0794	0.0120	0.0915	0.0000	0.0886	0.0029
1.11	0.16	0.0473	29.5	85.5	0.0364	0.0109	0.0537	0.0064	0.0473	0.0000
0.44	0.06	0.0190	30.3	85.8	0.0148	0.0042	0.0302	0.0112	0.0226	0.0036
					AARD	0.0057	AARD	0.0024	AARD	0.0013
$[C_4C_1im][PF_6]$										
3.17	0.55	0.1310	24.0	82.7	0.1310	0.0000	0.1310	0.0000	0.1310	0.0000

2.82	0.48	0.1166	24.1	82.8	0.1193	0.0027	0.1184	0.0018	0.1184	0.0018
2.46	0.40	0.1032	25.9	83.8	0.1025	0.0008	0.1010	0.0022	0.1011	0.0021
2.11	0.34	0.0886	26.1	83.9	0.0899	0.0014	0.0886	0.0000	0.0886	0.0000
1.76	0.27	0.0742	27.0	84.4	0.0752	0.0010	0.0743	0.0001	0.0742	0.0000
1.41	0.20	0.0605	30.5	85.9	0.0564	0.0041	0.0567	0.0038	0.0564	0.0041
1.06	0.15	0.0451	29.2	85.4	0.0450	0.0000	0.0462	0.0011	0.0457	0.0006
0.70	0.09	0.0307	34.3	87.3	0.0271	0.0036	0.0294	0.0013	0.0286	0.0021
0.35	0.04	0.0154	34.2	87.3	0.0139	0.0014	0.0166	0.0013	0.0157	0.0004
					AARD	0.0017	AARD	0.0013	AARD	0.0012
$[C_4C_1im][Tf_2N]$										
2.15	0.37	0.0887	23.9	82.7	0.0909	0.0021	0.0914	0.0026	0.0906	0.0018
1.91	0.31	0.0796	25.3	83.5	0.0796	0.0000	0.0796	0.0000	0.0796	0.0000
1.67	0.27	0.0701	26.3	84.0	0.0696	0.0006	0.0695	0.0006	0.0700	0.0001
1.43	0.22	0.0605	27.5	84.6	0.0591	0.0014	0.0593	0.0013	0.0600	0.0005
1.19	0.17	0.0509	29.2	85.4	0.0483	0.0026	0.0489	0.0020	0.0498	0.0011
0.95	0.14	0.0405	28.2	84.9	0.0406	0.0001	0.0417	0.0012	0.0424	0.0019
0.72	0.11	0.0305	29.0	85.3	0.0306	0.0001	0.0322	0.0017	0.0327	0.0022
0.48	0.06	0.0208	33.6	87.0	0.0185	0.0023	0.0208	0.0000	0.0207	0.0001
0.24	0.03	0.0102	30.3	85.8	0.0103	0.0001	0.0126	0.0024	0.0121	0.0019
					AARD	0.0010	AARD	0.0013	AARD	0.0011
$[C_1C_1im]Cl$										
15.08	7.43	0.3826	5.1	50.7	0.3386	0.0440	0.3691	0.0135	0.3672	0.0154
13.20	6.39	0.3405	5.3	51.6	0.3228	0.0177	0.3405	0.0000	0.3405	0.0000

11.31	5.28	0.3016	5.7	53.3	0.3017	0.0000	0.3077	0.0060	0.3094	0.0077
9.43	4.12	0.2654	6.4	56.3	0.2728	0.0074	0.2697	0.0043	0.2727	0.0073
7.54	2.99	0.2276	7.6	60.3	0.2342	0.0066	0.2274	0.0001	0.2308	0.0033
5.66	1.97	0.1845	9.4	65.2	0.1845	0.0000	0.1819	0.0026	0.1845	0.0000
3.77	1.07	0.1349	12.6	71.5	0.1218	0.0130	0.1319	0.0030	0.1317	0.0032
1.89	0.40	0.0744	18.7	78.9	0.0537	0.0207	0.0778	0.0034	0.0723	0.0021
0.75	0.12	0.0319	27.7	84.7	0.0169	0.0150	0.0403	0.0083	0.0311	0.0009
					AARD	0.0138	AARD	0.0046	AARD	0.0044
$[C_2C_1im]Cl$										
13.64	6.63	0.3504	5.3	51.4	0.3326	0.0177	0.3445	0.0059	0.3405	0.0099
11.94	5.65	0.3144	5.6	52.7	0.3143	0.0001	0.3157	0.0013	0.3144	0.0000
10.23	4.62	0.2803	6.1	54.8	0.2905	0.0102	0.2832	0.0029	0.2845	0.0042
8.53	3.59	0.2468	6.9	57.9	0.2592	0.0124	0.2468	0.0000	0.2501	0.0033
6.82	2.61	0.2104	8.1	61.7	0.2197	0.0093	0.2077	0.0027	0.2120	0.0016
5.12	1.72	0.1700	9.9	66.5	0.1700	0.0000	0.1653	0.0047	0.1693	0.0007
3.41	0.95	0.1229	12.9	72.1	0.1111	0.0118	0.1200	0.0029	0.1215	0.0014
1.71	0.36	0.0674	18.8	79.0	0.0485	0.0188	0.0706	0.0032	0.0669	0.0005
0.68	0.11	0.0288	27.3	84.5	0.0154	0.0135	0.0364	0.0075	0.0286	0.0002
					AARD	0.0104	AARD	0.0035	AARD	0.0024
$[C_3C_1im]Cl$										
12.45	5.91	0.3270	5.5	52.5	0.3139	0.0131	0.3270	0.0000	0.3223	0.0047
10.89	4.98	0.2956	5.9	54.3	0.2954	0.0001	0.2981	0.0025	0.2956	0.0000
9.34	4.05	0.2645	6.5	56.6	0.2719	0.0074	0.2664	0.0019	0.2657	0.0012

7.78	3.14	0.2322	7.4	59.7	0.2421	0.0099	0.2320	0.0002	0.2327	0.0005
6.23	2.29	0.1968	8.6	63.2	0.2050	0.0082	0.1956	0.0012	0.1968	0.0000
4.67	1.50	0.1582	10.5	67.8	0.1582	0.0000	0.1558	0.0024	0.1564	0.0018
3.11	0.84	0.1136	13.5	73.0	0.1037	0.0099	0.1136	0.0000	0.1121	0.0016
1.56	0.32	0.0618	19.2	79.4	0.0458	0.0159	0.0675	0.0057	0.0618	0.0000
0.62	0.09	0.0264	27.8	84.8	0.0145	0.0118	0.0349	0.0085	0.0264	0.0000
					AARD	0.0085	AARD	0.0025	AARD	0.0011
$[C_6C_1im]Cl$										
9.87	4.16	0.2855	6.9	57.9	0.2798	0.0057	0.2868	0.0013	0.2855	0.0000
8.63	3.47	0.2583	7.4	59.8	0.2583	0.0000	0.2583	0.0000	0.2587	0.0004
7.40	2.81	0.2294	8.2	62.0	0.2331	0.0037	0.2288	0.0006	0.2304	0.0010
6.17	2.18	0.1995	9.2	64.7	0.2025	0.0031	0.1973	0.0022	0.1995	0.0000
4.93	1.59	0.1670	10.5	67.7	0.1670	0.0000	0.1646	0.0024	0.1666	0.0005
3.70	1.07	0.1314	12.3	71.0	0.1267	0.0047	0.1308	0.0006	0.1314	0.0000
2.47	0.62	0.0923	14.8	74.8	0.0826	0.0096	0.0955	0.0032	0.0934	0.0012
1.23	0.25	0.0492	19.7	79.8	0.0369	0.0123	0.0562	0.0070	0.0503	0.0011
0.49	0.08	0.0208	27.1	84.4	0.0120	0.0088	0.0285	0.0076	0.0207	0.0001
					AARD	0.0053	AARD	0.0028	AARD	0.0005
$[C_8C_1im]Cl$										
8.67	3.33	0.2668	8.0	61.6	0.2600	0.0068	0.2674	0.0007	0.2668	0.0000
7.58	2.80	0.2393	8.6	63.1	0.2393	0.0000	0.2393	0.0000	0.2406	0.0013
6.50	2.29	0.2106	9.2	64.8	0.2156	0.0049	0.2107	0.0000	0.2133	0.0027
5.42	1.76	0.1830	10.4	67.6	0.1851	0.0021	0.1783	0.0047	0.1818	0.0012

4.33	1.30	0.1518	11.7	70.1	0.1522	0.0004	0.1470	0.0048	0.1506	0.0012
3.25	0.89	0.1182	13.3	72.7	0.1158	0.0024	0.1155	0.0027	0.1182	0.0000
2.17	0.52	0.0821	15.7	75.8	0.0760	0.0061	0.0827	0.0006	0.0835	0.0013
1.08	0.21	0.0436	20.5	80.4	0.0340	0.0095	0.0466	0.0031	0.0442	0.0007
0.43	0.06	0.0187	31.8	86.4	0.0100	0.0088	0.0207	0.0020	0.0164	0.0023
					AARD	0.0046	AARD	0.0021	AARD	0.0012
$[C_{10}C_1im]Cl$										
7.73	2.74	0.2494	9.1	64.5	0.2452	0.0042	0.2494	0.0000	0.2500	0.0007
6.76	2.32	0.2221	9.6	65.7	0.2251	0.0030	0.2235	0.0014	0.2249	0.0029
5.80	1.84	0.1977	10.7	68.2	0.1977	0.0000	0.1920	0.0056	0.1939	0.0037
4.83	1.45	0.1688	11.6	69.9	0.1706	0.0017	0.1642	0.0046	0.1660	0.0028
3.86	1.09	0.1387	12.7	71.8	0.1402	0.0015	0.1358	0.0029	0.1370	0.0017
2.90	0.76	0.1070	14.1	73.8	0.1070	0.0000	0.1070	0.0000	0.1070	0.0000
1.93	0.46	0.0738	16.2	76.4	0.0707	0.0031	0.0766	0.0029	0.0749	0.0011
0.97	0.19	0.0389	20.6	80.5	0.0319	0.0069	0.0428	0.0040	0.0389	0.0000
0.39	0.06	0.0163	27.3	84.5	0.0106	0.0057	0.0201	0.0038	0.0155	0.0008
					AARD	0.0029	AARD	0.0028	AARD	0.0015
$[C_4C_1pip]Cl$										
10.43	4.78	0.2824	5.9	54.1	0.2739	0.0084	0.2824	0.0000	0.2800	0.0024
9.13	4.01	0.2557	6.4	56.0	0.2557	0.0000	0.2563	0.0006	0.2557	0.0000
7.82	3.26	0.2283	7.0	58.4	0.2332	0.0048	0.2283	0.0001	0.2291	0.0007
6.52	2.53	0.1993	7.9	61.1	0.2058	0.0065	0.1987	0.0006	0.2004	0.0011
5.22	1.84	0.1687	9.2	64.7	0.1717	0.0030	0.1665	0.0022	0.1684	0.0003

3.91	1.22	0.1345	11.0	68.8	0.1312	0.0033	0.1327	0.0018	0.1336	0.0009
2.61	0.69	0.0957	13.8	73.4	0.0856	0.0101	0.0970	0.0012	0.0957	0.0000
1.30	0.27	0.0515	18.7	78.9	0.0385	0.0130	0.0581	0.0066	0.0531	0.0016
0.52	0.08	0.0221	27.4	84.6	0.0120	0.0101	0.0294	0.0074	0.0221	0.0000
					AARD	0.0066	AARD	0.0023	AARD	0.0008
$[C_4C_1pyrr]Cl$										
11.25	5.29	0.2981	5.6	53.0	0.2848	0.0133	0.2981	0.0000	0.2951	0.0030
9.85	4.46	0.2696	6.0	54.7	0.2677	0.0018	0.2711	0.0015	0.2696	0.0000
8.44	3.62	0.2408	6.6	57.1	0.2462	0.0054	0.2418	0.0010	0.2415	0.0006
7.03	2.82	0.2107	7.5	59.9	0.2193	0.0086	0.2105	0.0001	0.2109	0.0003
5.63	2.07	0.1779	8.6	63.2	0.1860	0.0081	0.1774	0.0006	0.1779	0.0000
4.22	1.36	0.1432	10.6	67.9	0.1432	0.0000	0.1405	0.0027	0.1403	0.0029
2.81	0.77	0.1023	13.3	72.7	0.0946	0.0077	0.1025	0.0002	0.1005	0.0018
1.41	0.30	0.0553	18.4	78.6	0.0428	0.0125	0.0611	0.0058	0.0559	0.0006
0.56	0.09	0.0238	27.2	84.5	0.0133	0.0104	0.0308	0.0070	0.0237	0.0001
					AARD	0.0075	AARD	0.0021	AARD	0.0010
o-$[C_4C_1py]Cl$										
10.77	4.93	0.2922	5.9	54.3	0.2826	0.0095	0.2922	0.0000	0.2900	0.0022
9.42	4.13	0.2646	6.4	56.2	0.2646	0.0000	0.2653	0.0006	0.2646	0.0000
8.08	3.35	0.2364	7.1	58.5	0.2423	0.0059	0.2364	0.0000	0.2370	0.0005
6.73	2.60	0.2064	7.9	61.3	0.2150	0.0086	0.2060	0.0004	0.2071	0.0008
5.39	1.89	0.1746	9.2	64.8	0.1805	0.0059	0.1729	0.0017	0.1740	0.0006
4.04	1.26	0.1391	11.1	68.9	0.1391	0.0000	0.1381	0.0010	0.1381	0.0011

2.69	0.71	0.0989	13.8	73.5	0.0917	0.0072	0.1014	0.0024	0.0989	0.0000
1.35	0.28	0.0533	18.9	79.1	0.0414	0.0119	0.0608	0.0076	0.0546	0.0013
0.54	0.08	0.0228	27.6	84.7	0.0130	0.0098	0.0311	0.0083	0.0227	0.0001
					AARD	0.0065	AARD	0.0024	AARD	0.0007
p-[C_4C_1py]Cl										
10.77	4.87	0.2950	6.1	54.8	0.2859	0.0091	0.2952	0.0002	0.2935	0.0015
9.42	4.08	0.2673	6.6	56.7	0.2673	0.0000	0.2678	0.0005	0.2673	0.0000
8.08	3.31	0.2386	7.2	59.1	0.2444	0.0058	0.2386	0.0000	0.2390	0.0003
6.73	2.57	0.2080	8.1	61.8	0.2165	0.0085	0.2080	0.0000	0.2086	0.0006
5.39	1.87	0.1757	9.4	65.3	0.1815	0.0058	0.1747	0.0010	0.1749	0.0008
4.04	1.24	0.1398	11.2	69.2	0.1398	0.0000	0.1396	0.0001	0.1385	0.0012
2.69	0.71	0.0991	14.0	73.6	0.0922	0.0070	0.1027	0.0035	0.0991	0.0000
1.35	0.28	0.0533	19.1	79.2	0.0415	0.0118	0.0616	0.0083	0.0544	0.0011
0.54	0.08	0.0228	27.3	84.5	0.0132	0.0095	0.0317	0.0090	0.0228	0.0000
					AARD	0.0064	AARD	0.0025	AARD	0.0006
[Ch]Cl										
14.32	6.97	0.3676	5.3	51.3	0.3489	0.0187	0.3635	0.0041	0.3568	0.0108
12.53	5.92	0.3308	5.6	52.8	0.3308	0.0000	0.3341	0.0033	0.3308	0.0000
10.74	4.81	0.2965	6.2	55.2	0.3068	0.0102	0.3004	0.0039	0.3004	0.0038
8.95	3.70	0.2625	7.1	58.6	0.2747	0.0121	0.2625	0.0000	0.2651	0.0026
7.16	2.66	0.2251	8.5	62.8	0.2333	0.0082	0.2215	0.0035	0.2255	0.0005
5.37	1.74	0.1817	10.5	67.7	0.1816	0.0002	0.1779	0.0038	0.1816	0.0001
3.58	0.94	0.1320	14.0	73.7	0.1180	0.0140	0.1299	0.0020	0.1307	0.0013

1.79	0.35	0.0721	20.8	80.6	0.0511	0.0210	0.0778	0.0057	0.0721	0.0000
0.72	0.10	0.0307	30.2	85.8	0.0161	0.0146	0.0413	0.0106	0.0308	0.0001
					AARD	0.0110	AARD	0.0041	AARD	0.0021
$[N_{4444}]Cl$										
7.20	2.56	0.2319	9.1	64.4	0.2281	0.0038	0.2319	0.0000	0.2319	0.0000
6.30	2.18	0.2060	9.5	65.4	0.2094	0.0034	0.2081	0.0021	0.2091	0.0031
5.40	1.73	0.1834	10.6	68.0	0.1834	0.0000	0.1784	0.0051	0.1801	0.0033
4.50	1.36	0.1567	11.5	69.7	0.1579	0.0012	0.1522	0.0045	0.1540	0.0027
3.60	1.02	0.1288	12.6	71.6	0.1294	0.0006	0.1255	0.0033	0.1268	0.0021
2.70	0.72	0.0991	13.8	73.4	0.0991	0.0000	0.0990	0.0000	0.0991	0.0000
1.80	0.44	0.0679	15.4	75.5	0.0664	0.0015	0.0715	0.0036	0.0699	0.0019
0.90	0.19	0.0354	18.6	78.8	0.0313	0.0041	0.0409	0.0055	0.0370	0.0015
0.36	0.06	0.0152	26.7	84.2	0.0098	0.0054	0.0182	0.0030	0.0137	0.0015
					AARD	0.0022	AARD	0.0030	AARD	0.0018
$[P_{4444}]Cl$										
6.78	2.36	0.2210	9.4	65.2	0.2210	0.0000	0.2305	0.0095	0.2282	0.0072
5.93	1.93	0.2001	10.4	67.4	0.1980	0.0022	0.2001	0.0000	0.2001	0.0000
5.09	1.58	0.1754	11.1	69.0	0.1755	0.0001	0.1736	0.0017	0.1750	0.0004
4.24	1.25	0.1494	11.9	70.5	0.1509	0.0015	0.1474	0.0020	0.1494	0.0000
3.39	0.94	0.1226	13.0	72.3	0.1232	0.0007	0.1204	0.0022	0.1223	0.0003
2.54	0.66	0.0941	14.2	74.0	0.0941	0.0000	0.0940	0.0002	0.0950	0.0008
1.70	0.41	0.0645	15.9	76.0	0.0628	0.0017	0.0667	0.0023	0.0661	0.0016
0.85	0.17	0.0337	19.4	79.5	0.0291	0.0046	0.0366	0.0029	0.0337	0.0000

0.34	0.05	0.0143	26.5	84.1	0.0094	0.0048	0.0161	0.0018	0.0124	0.0018
					AARD	0.0017	AARD	0.0025	AARD	0.0014

Table S3 The obtained Langmuir and Redlich-Peterson parameters for adsorption of ionic liquids onto ZSM-5 from aqueous solution

No	Ionic liquids	Langmuir				Redlich-Peterson				
		Q_m	K_L	R^2	AARD	K_{RP}	α	β	R^2	AARD
1	$[C_4C_1im][Ac]$	0.4999	0.3313	0.9506	0.0056	0.4280	2.4650	0.4939	0.9709	0.0012
2	$[C_4C_1im]Cl$	0.4585	0.3601	0.9264	0.0072	0.4426	2.5464	0.5703	0.9515	0.0009
3	$[C_4C_1im][DMP]$	0.3908	0.4870	0.9480	0.0033	0.3956	2.1319	0.5576	0.9646	0.0007
4	$[C_4C_1im]Br$	0.4164	0.4572	0.9344	0.0052	0.4291	2.2696	0.5935	0.9528	0.0004
5	$[C_4C_1im][CF_3SO_3]$	0.5675	0.4224	0.9776	0.0042	0.8174	3.9185	0.3879	0.9848	0.0011
6	$[C_4C_1im][N(CN)_2]$	0.6547	0.3275	0.9675	0.0058	0.6280	2.9610	0.4175	0.9815	0.0009
7	$[C_4C_1im][SCN]$	0.7610	0.2879	0.9741	0.0063	0.5685	2.4198	0.3909	0.9859	0.0016
8	$[C_4C_1im][HSO_4]$	0.4521	0.5314	0.9437	0.0051	0.4923	2.2199	0.5687	0.9626	0.0006
9	$[C_4C_1im][MeSO_4]$	0.4424	0.4723	0.9514	0.0047	0.5387	2.7951	0.5388	0.9632	0.0003
10	$[C_4C_1im][CH_3SO_3]$	0.3877	0.4925	0.9335	0.0048	0.4545	2.5977	0.5709	0.9553	0.0005
11	$[C_4C_1im][TFA]$	0.6137	0.3450	0.9756	0.0051	1.2431	7.0167	0.3478	0.9847	0.0007
12	$[C_4C_1im][PF_6]$	0.5288	0.6030	0.9948	0.0017	0.5806	1.7117	0.3078	0.9969	0.0012
13	$[C_4C_1im][BF_4]$	0.5344	0.4555	0.9566	0.0057	0.5449	2.2818	0.5414	0.9685	0.0013
14	$[C_4C_1im][Tf_2N]$	0.4137	0.7579	0.9959	0.0010	0.4466	1.3801	0.5112	0.9946	0.0011
15	$[C_1C_1im]Cl$	0.4841	0.3132	0.9110	0.0138	0.5239	3.1460	0.5564	0.9514	0.0044
16	$[C_2C_1im]Cl$	0.4993	0.3009	0.9238	0.0104	0.4991	2.9899	0.5660	0.9498	0.0024
17	$[C_3C_1im]Cl$	0.4726	0.3347	0.9237	0.0085	0.5178	3.1739	0.5543	0.9523	0.0011
18	$[C_6C_1im]Cl$	0.4821	0.3329	0.9495	0.0053	0.4293	2.4069	0.5474	0.9609	0.0005
19	$[C_8C_1im]Cl$	0.4742	0.3644	0.9570	0.0046	0.4475	2.5039	0.5031	0.9697	0.0012
20	$[C_{10}C_1im]Cl$	0.4849	0.3735	0.9652	0.0029	0.4061	2.1402	0.4737	0.9776	0.0015

21	$[C_4C_1pip]Cl$	0.4369	0.3514	0.9365	0.0066	0.4840	3.0664	0.5514	0.9551	0.0008
22	o-$[C_4C_1py]Cl$	0.4367	0.3722	0.9295	0.0065	0.4803	2.9719	0.5515	0.9551	0.0007
23	p-$[C_4C_1py]Cl$	0.4458	0.3672	0.9315	0.0064	0.4804	2.9411	0.5453	0.9568	0.0006
24	$[C_4C_1pyrr]Cl$	0.4324	0.3649	0.9257	0.0075	0.5354	3.5529	0.5305	0.9574	0.0010
25	[Ch]Cl	0.5025	0.3257	0.9121	0.0110	0.5264	2.8966	0.5999	0.9394	0.0021
26	$[N_{4444}]Cl$	0.4621	0.3808	0.9674	0.0022	0.3390	1.7141	0.4999	0.9780	0.0018
27	$[P_{4444}]Cl$	0.4644	0.3846	0.9702	0.0017	0.2977	1.3293	0.5214	0.9801	0.0014

Table S4 Activity coefficient of ionic liquids in water, γ_w, in ZSM-5, γ_{ZSM-5}, and partition coefficient, Log P, at infinite dilution predicted using COSMO-RS at 298.15 K

No	Ionic liquids	γ_w	γ_{ZSM-5}	Log P
1	$[C_4C_1im][Ac]$	2.99E-10	9.79E-30	19.48
2	$[C_4C_1im]Cl$	2.49E-09	5.49E-27	17.66
3	$[C_4C_1im][DMP]$	2.05E-08	4.54E-28	19.65
4	$[C_4C_1im]Br$	6.81E-07	5.95E-23	16.06
5	$[C_4C_1im][CF_3SO_3]$	5.71E-01	3.41E-13	12.22
6	$[C_4C_1im][N(CN)_2]$	7.94E-03	2.48E-16	13.51
7	$[C_4C_1im][SCN]$	1.01E-01	2.26E-13	11.65
8	$[C_4C_1im][HSO_4]$	6.65E-04	5.11E-17	13.11
9	$[C_4C_1im][MeSO_4]$	5.21E-04	7.49E-19	14.84
10	$[C_4C_1im][CH_3SO_3]$	7.41E-08	6.56E-26	18.05
11	$[C_4C_1im][TFA]$	1.15E-03	7.87E-18	14.17
12	$[C_4C_1im][PF_6]$	1.03E+03	9.67E-05	7.03
13	$[C_4C_1im][BF_4]$	1.65E-01	9.62E-12	10.23
14	$[C_4C_1im][Tf_2N]$	2.15E+04	6.92E-07	10.49
15	$[C_1C_1im]Cl$	1.50E-10	1.92E-26	15.89
16	$[C_2C_1im]Cl$	3.22E-10	9.55E-27	16.53
17	$[C_3C_1im]Cl$	8.92E-10	6.75E-27	17.12
18	$[C_6C_1im]Cl$	1.81E-08	3.81E-27	18.68
19	$[C_8C_1im]Cl$	1.30E-07	2.70E-27	19.68
20	$[C_{10}C_1im]Cl$	7.92E-07	1.59E-27	20.70
21	$[C_4C_1pip]Cl$	7.55E-11	1.97E-29	18.58
22	o-$[C_4C_1py]Cl$	4.69E-10	2.54E-28	18.27
23	p-$[C_4C_1py]Cl$	1.34E-09	6.19E-28	18.33
24	$[C_4C_1pyrr]Cl$	5.42E-11	3.16E-29	18.23
25	[Ch]Cl	3.18E-10	2.38E-25	15.13
26	$[N_{4444}]Cl$	1.91E-08	7.47E-31	22.41
27	$[P_{4444}]Cl$	2.36E-08	9.23E-31	22.41

Table S5 Excess enthalpy, H_E in kJ·mol^{-1}, for the ionic liquids and water binary mixtures predicted using COSMO-RS at 298.15 K

	Water				Cation				Anion			
Ionic liquids	$H_{E,Int}$	$H_{E,MF}$	$H_{E,HB}$	$H_{E,vdW}$	$H_{E,Int}$	$H_{E,MF}$	$H_{E,HB}$	$H_{E,vdW}$	$H_{E,Int}$	$H_{E,MF}$	$H_{E,HB}$	$H_{E,vdW}$
$[C_4C_1im][Ac]$	-0.53	1.10	-1.30	-0.34	-0.0927	-1.3395	1.1271	0.0916	-11.15	-0.89	-10.31	0.05
$[C_4C_1im]Cl$	2.47	0.73	2.37	-0.63	-0.4035	-1.0692	0.2717	0.3788	-7.38	-0.81	-6.59	0.02
$[C_4C_1im][DMP]$	1.49	0.62	1.19	-0.33	-0.1103	-0.7008	0.5059	0.0678	-8.71	-0.88	-7.90	0.08
$[C_4C_1im]Br$	3.06	0.44	3.16	-0.55	-0.2392	-0.7395	0.0813	0.4090	-5.39	-0.63	-4.89	0.13
$[C_4C_1im][CF_3SO_3]$	3.30	0.10	3.48	-0.28	-0.1896	-0.1082	-0.1125	0.0304	-2.94	-0.30	-2.68	0.05
$[C_4C_1im][N(CN)_2]$	2.62	0.22	2.54	-0.14	-0.1388	-0.3027	0.1523	0.0035	-4.77	-0.41	-4.53	0.17
$[C_4C_1im][SCN]$	2.53	0.20	2.60	-0.27	-0.0462	-0.3320	0.1493	0.1284	-4.14	-0.36	-3.92	0.14
$[C_4C_1im][HSO_4]$	2.47	0.12	2.65	-0.30	-0.1888	-0.2833	-0.0011	0.0906	-3.56	-0.31	-3.31	0.06
$[C_4C_1im][MeSO_4]$	3.28	0.18	3.41	-0.31	-0.1836	-0.2514	-0.0157	0.0792	-4.24	-0.46	-3.85	0.07
$[C_4C_1im][CH_3SO_3]$	2.58	0.40	2.50	-0.32	-0.2189	-0.5218	0.2118	0.0807	-6.82	-0.72	-6.16	0.06
$[C_4C_1im][TFA]$	2.07	0.33	2.04	-0.30	0.0032	-0.4104	0.3643	0.0343	-6.01	-0.50	-5.54	0.03
$[C_4C_1im][PF_6]$	3.52	0.05	3.74	-0.28	-0.3953	0.0077	-0.3687	-0.0251	-0.50	-0.08	-0.40	-0.01
$[C_4C_1im][BF_4]$	3.57	0.06	3.81	-0.30	-0.3204	-0.1016	-0.2174	0.0006	-1.99	-0.18	-1.79	-0.01
$[C_4C_1im][Tf_2N]$	3.49	0.10	3.61	-0.23	-0.3163	0.0031	-0.3137	0.0027	-1.07	-0.13	-0.96	0.07
$[C_1C_1im]Cl$	2.47	0.81	2.29	-0.62	-0.7758	-1.4787	0.3051	0.3979	-7.06	-0.64	-6.44	0.02
$[C_2C_1im]Cl$	2.46	0.77	2.31	-0.62	-0.5936	-1.2892	0.2877	0.3897	-7.25	-0.73	-6.54	0.02
$[C_3C_1im]Cl$	2.45	0.74	2.34	-0.62	-0.5008	-1.1684	0.2760	0.3840	-7.33	-0.77	-6.57	0.02
$[C_6C_1im]Cl$	2.50	0.71	2.42	-0.63	-0.2828	-0.9464	0.2667	0.3774	-7.45	-0.86	-6.60	0.02
$[C_8C_1im]Cl$	2.55	0.72	2.46	-0.63	-0.2186	-0.8705	0.2626	0.3746	-7.51	-0.91	-6.62	0.02

$[C_{10}C_1im]Cl$	2.60	0.74	2.50	-0.63	-0.1749	-0.8249	0.2602	0.3753	-7.57	-0.95	-6.63	0.02
$[C_4C_1pip]Cl$	2.84	0.82	2.64	-0.62	-0.6796	-1.2575	0.1932	0.3847	-8.12	-1.03	-7.10	0.01
o-$[C_4C_1py]Cl$	2.68	0.78	2.52	-0.63	-0.4962	-1.1311	0.2368	0.3909	-7.78	-0.92	-6.88	0.02
p-$[C_4C_1py]Cl$	2.59	0.77	2.45	-0.63	-0.4630	-1.0950	0.2363	0.3889	-7.73	-0.94	-6.80	0.02
$[C_4C_1pyrr]Cl$	2.83	0.81	2.64	-0.62	-0.6914	-1.2834	0.2021	0.3841	-8.02	-0.97	-7.07	0.01
[Ch]Cl	2.25	0.80	2.04	-0.59	-0.9766	-1.5729	0.2507	0.3772	-6.19	-0.51	-5.69	0.01
$[N_{4444}]Cl$	3.12	0.98	2.77	-0.63	-0.7283	-1.2595	0.1418	0.3893	-8.82	-1.47	-7.36	0.01
$[P_{4444}]Cl$	3.12	0.98	2.77	-0.63	-0.6962	-1.2338	0.1482	0.3894	-8.79	-1.46	-7.34	0.01

Table S6 Excess enthalpy, H_E in kJ·mol^{-1}, for the ionic liquids and ZSM-5 binary mixtures predicted using COSMO-RS at 298.15 K

	Water				Cation				Anion			
Ionic liquids	$H_{E,Int}$	$H_{E,MF}$	$H_{E,HB}$	$H_{E,vdW}$	$H_{E,Int}$	$H_{E,MF}$	$H_{E,HB}$	$H_{E,vdW}$	$H_{E,Int}$	$H_{E,MF}$	$H_{E,HB}$	$H_{E,vdW}$
$[C_4C_1im][Ac]$	-47.19	-5.00	-36.92	-5.27	-0.95	-6.90	4.67	1.10	-48.10	-3.37	-45.02	0.29
$[C_4C_1im]Cl$	-39.55	-5.75	-28.48	-5.33	-2.85	-8.27	3.32	1.92	-42.54	-3.85	-38.72	0.03
$[C_4C_1im][DMP]$	-43.80	-6.06	-32.06	-5.68	-0.74	-5.44	3.54	1.00	-47.01	-4.07	-43.40	0.57
$[C_4C_1im]Br$	-33.59	-6.01	-22.56	-5.02	-2.50	-7.32	2.56	2.10	-36.83	-3.41	-33.85	0.43
$[C_4C_1im][CF_3SO_3]$	-18.89	-4.29	-9.91	-4.69	-1.54	-3.25	1.32	0.30	-20.78	-1.08	-19.88	0.18
$[C_4C_1im][N(CN)_2]$	-25.75	-4.32	-17.22	-4.22	-1.16	-4.06	2.11	0.68	-27.07	-1.01	-26.80	0.74
$[C_4C_1im][SCN]$	-20.19	-4.08	-11.41	-4.69	-1.11	-4.48	1.69	1.57	-20.73	-0.86	-20.50	0.63
$[C_4C_1im][HSO_4]$	-26.70	-5.65	-17.09	-3.96	-1.97	-4.82	1.82	0.91	-26.70	-1.67	-25.39	0.36
$[C_4C_1im][MeSO_4]$	-27.74	-5.84	-17.22	-4.68	-1.63	-4.57	1.90	0.92	-31.90	-2.73	-29.60	0.43
$[C_4C_1im][CH_3SO_3]$	-39.32	-6.37	-28.06	-4.89	-1.76	-5.83	2.93	0.99	-44.00	-3.93	-40.42	0.35
$[C_4C_1im][TFA]$	-27.49	-4.11	-18.46	-4.92	-1.08	-4.06	2.50	0.36	-28.06	-1.23	-26.87	0.04
$[C_4C_1im][PF_6]$	-2.63	-1.30	3.29	-4.62	-2.55	-2.60	0.07	-0.05	-2.25	1.16	-3.24	-0.17
$[C_4C_1im][BF_4]$	-14.05	-4.26	-6.00	-3.79	-2.48	-3.86	0.96	0.33	-17.35	-0.57	-16.66	-0.13
$[C_4C_1im][Tf_2N]$	-8.20	-2.58	-0.45	-5.17	-1.73	-2.08	0.35	-0.05	-8.44	-0.24	-8.54	0.60
$[C_1C_1im]Cl$	-38.00	-5.48	-28.56	-3.96	-5.21	-10.40	3.55	1.64	-41.84	-3.44	-38.43	0.03
$[C_2C_1im]Cl$	-38.67	-5.67	-28.58	-4.42	-4.30	-9.68	3.42	1.73	-42.23	-3.65	-38.61	0.03
$[C_3C_1im]Cl$	-39.12	-5.72	-28.54	-4.86	-3.68	-8.93	3.35	1.81	-42.40	-3.76	-38.68	0.03
$[C_6C_1im]Cl$	-40.25	-5.77	-28.34	-6.14	-1.77	-7.31	3.26	2.12	-42.72	-3.97	-38.78	0.03
$[C_8C_1im]Cl$	-40.89	-5.77	-28.20	-6.93	-0.86	-6.59	3.23	2.33	-42.88	-4.08	-38.83	0.03

$[C_{10}C_1im]Cl$	-41.50	-5.77	-28.06	-7.66	-0.18	-6.06	3.18	2.53	-43.05	-4.20	-38.88	0.03
$[C_4C_1pip]Cl$	-40.30	-6.09	-28.63	-5.57	-6.37	-9.99	1.57	2.06	-45.43	-4.74	-40.72	0.03
o-$[C_4C_1py]Cl$	-40.12	-5.98	-28.59	-5.55	-4.82	-9.17	2.24	2.01	-44.24	-4.32	-39.96	0.04
p-$[C_4C_1py]Cl$	-40.14	-5.95	-28.55	-5.64	-3.80	-8.55	2.69	2.04	-43.66	-4.23	-39.46	0.04
$[C_4C_1pyrr]Cl$	-39.95	-6.01	-28.64	-5.30	-6.59	-10.22	1.58	1.98	-45.27	-4.59	-40.70	0.03
[Ch]Cl	-37.88	-5.36	-29.12	-3.41	-4.89	-10.25	3.81	1.65	-38.57	-3.11	-35.49	0.02
$[N_{4444}]Cl$	-42.93	-6.42	-28.42	-8.09	-4.68	-8.53	1.11	2.74	-47.17	-5.94	-41.25	0.02
$[P_{4444}]Cl$	-42.95	-6.38	-28.40	-8.17	-4.47	-8.35	1.12	2.76	-47.15	-5.93	-41.24	0.02

Figure S1. Plot of partition coefficient, Log P, predicted using COSMO-RS versus experimentally calculated distribution coefficient, K_D, at 298.15 K.