Supplementary Material for PCCP

Appendix A

Electronic Supplementary Information form "Shape Factors in equations of State. Part II. Repulsion phenomena in multicomponent chain fluids" By N.F. Carnahan and E.A. Müller.

Raw simulation data for mixtures of spheres (1) and homonuclear tangent freely-jointed hard sphere chains (2).

In the tables, *m* is the number of hard sphere segments of the chains, *d* is the ratio of the diameter of a single sphere (monomer) of the chains with respect to the diameter of the "solvent" sphere, $d = \sigma_2/\sigma_1$; N(1) is the total number of spheres used in the simulation, N(2) is the number of chains used, x(2) is the mole fraction of chains in the simulation box , x(2) = N(2)/(N(1)+N(2)); $\phi(2)$ is the volume fraction of the chains in the simulation box; y (in other contexts referred to as η) is the packing fraction; err(y) is the standard deviation of the results. Actual errors on the standard deviations are smaller than this number. *Z* is the compressibility factor, $Z = PV/NkT$. Note that *Z* is actually a calculated property requiring the P/kT ratio (fixed in the simulation) and the density (an output of the simulation).

Mixtures (*m*=3)

m	*d*	N(1)	N(2)	x(2)	ϕ (2)	y	err(y)	*Z*
3	1	250	50	0.1667	0.3750	0.0675	0.0004	1.03
3	1	250	50	0.1667	0.3750	0.1615	0.0040	2.16
3	1	250	50	0.1667	0.3750	0.2278	0.0047	3.07
3	1	250	50	0.1667	0.3750	0.2865	0.0046	4.26
3	1	250	50	0.1667	0.3750	0.3466	0.0047	6.04
3	1	250	50	0.1667	0.3750	0.4064	0.0035	8.59
3	1	250	50	0.1667	0.3750	0.4529	0.0039	11.56
3	1	250	50	0.1667	0.3750	0.4836	0.0029	14.44
3	1	250	50	0.1667	0.3750	0.5093	0.0036	17.13
3	1	500	5	0.0099	0.0291	0.0533	0.0002	1.00
3	1	500	5	0.0099	0.0291	0.1436	0.0031	1.86
3	1	500	5	0.0099	0.0291	0.2105	0.0035	2.54
3	1	500	5	0.0099	0.0291	0.2709	0.0038	3.45
3	1	500	5	0.0099	0.0291	0.3331	0.0039	4.81
3	1	500	5	0.0099	0.0291	0.3937	0.0034	6.78
3	1	500	5	0.0099	0.0291	0.4416	0.0029	9.07
3	1	500	5	0.0099	0.0291	0.4752	0.0035	11.24
3	1	500	5	0.0099	0.0291	0.5011	0.0026	13.32
3	1	50	100	0.6667	0.8571	0.0856	0.0021	1.43
3	1	50	100	0.6667	0.8571	0.1914	0.0053	3.19
3	1	50	100	0.6667	0.8571	0.2561	0.0058	4.77
3	1	50	100	0.6667	0.8571	0.3118	0.0053	6.86
3	1	50	100	0.6667	0.8571	0.3691	0.0049	9.93
3	1	50	100	0.6667	0.8571	0.4195	0.0030	14.56
3	1	50	100	0.6667	0.8571	0.4659	0.0033	19.67
3	1	50	100	0.6667	0.8571	0.4938	0.0028	24.74

Mixtures (*m*=4)

m	*d*	N(1)	N(2)	x(2)	ϕ (2)	y	err(y)	*Z*
4	1	250	50	0.1667	0.4444	0.1682	0.0039	2.34
4	1	250	50	0.1667	0.4444	0.2345	0.0045	3.35
4	1	250	50	0.1667	0.4444	0.2936	0.0044	4.68
4	1	250	50	0.1667	0.4444	0.3516	0.0040	6.70
4	1	250	50	0.1667	0.4444	0.4086	0.0043	9.61
4	1	250	50	0.1667	0.4444	0.4560	0.0031	12.92
4	1	250	50	0.1667	0.4444	0.4868	0.0028	16.14
4	1	500	5	0.0099	0.0385	0.1446	0.0031	1.86
4	1	500	5	0.0099	0.0385	0.2108	0.0043	2.56
4	1	500	5	0.0099	0.0385	0.2709	0.0040	3.48
4	1	500	5	0.0099	0.0385	0.3326	0.0035	4.86
4	1	500	5	0.0099	0.0385	0.3940	0.0023	6.84
4	1	500	5	0.0099	0.0385	0.4421	0.0031	9.15
4	1	500	5	0.0099	0.0385	0.4760	0.0034	11.33
4	1	500	5	0.0099	0.0385	0.5012	0.0030	13.45
4	1	50	100	0.6667	0.8889	0.0968	0.0029	1.62
4	1	50	100	0.6667	0.8889	0.2022	0.0050	3.88
4	1	50	100	0.6667	0.8889	0.2642	0.0046	5.94
4	1	50	100	0.6667	0.8889	0.3191	0.0044	8.61
4	1	50	100	0.6667	0.8889	0.3756	0.0042	12.55
4	1	50	100	0.6667	0.8889	0.4276	0.0021	18.37
4	1	50	100	0.6667	0.8889	0.4662	0.0013	25.27
4	0.25	250	50	0.1667	0.1667	0.0203	0.0002	1.09
4	0.25	250	50	0.1667	0.1667	0.0380	0.0006	1.16
4	0.25	250	50	0.1667	0.1667	0.1292	0.0032	1.71
4	0.25	250	50	0.1667	0.1667	0.1927	0.0044	2.29
4	0.25	250	50	0.1667	0.1667	0.2528	0.0046	3.06
4	0.25	250	50	0.1667	0.1667	0.3145	0.0055	4.21
4	0.25	250	50	0.1667	0.1667	0.3756	0.0051	5.88

Mixtures (*m*=4) (cont.)

m	*d*	N(1)	N(2)	x(2)	ϕ (2)	y	err(y)	*Z*
4	0.25	500	5	0.0099	0.0099	0.0026	0.0001	1.01
4	0.25	500	5	0.0099	0.0099	0.0235	0.0003	1.10
4	0.25	500	5	0.0099	0.0099	0.0434	0.0007	1.20
4	0.25	500	5	0.0099	0.0099	0.1418	0.0033	1.83
4	0.25	500	5	0.0099	0.0099	0.2076	0.0038	2.50
4	0.25	500	5	0.0099	0.0099	0.2686	0.0042	3.38
4	0.25	500	5	0.0099	0.0099	0.3313	0.0039	4.70
4	0.25	500	5	0.0099	0.0099	0.3919	0.0037	6.62
4	0.25	500	5	0.0099	0.0099	0.4408	0.0037	8.83
4	0.25	50	100	0.6667	0.6667	0.0094	0.0001	1.04
4	0.25	50	100	0.6667	0.6667	0.0264	0.0003	1.11
4	0.25	50	100	0.6667	0.6667	0.0748	0.0018	1.31
4	0.25	50	100	0.6667	0.6667	0.1198	0.0034	1.64
4	0.25	50	100	0.6667	0.6667	0.1682	0.0050	2.04
4	0.25	50	100	0.6667	0.6667	0.2226	0.0059	2.65
4	0.25	50	100	0.6667	0.6667	0.2791	0.0068	3.52
4	0.25	50	100	0.6667	0.6667	0.3272	0.0067	4.50
4	0.5	250	50	0.1667	0.2857	0.0217	0.0002	1.11
4	0.5	250	50	0.1667	0.2857	0.0402	0.0001	1.19
4	0.5	250	50	0.1667	0.2857	0.1311	0.0035	1.83
4	0.5	250	50	0.1667	0.2857	0.1927	0.0041	2.49
4	0.5	250	50	0.1667	0.2857	0.2502	0.0056	3.36
4	0.5	250	50	0.1667	0.2857	0.3092	0.0044	4.66
4	0.5	250	50	0.1667	0.2857	0.3674	0.0052	6.53
4	0.5	250	50	0.1667	0.2857	0.4159	0.0033	8.66
4	0.5	500	5	0.0099	0.0196	0.0236	0.0003	1.11
4	0.5	500	5	0.0099	0.0196	0.0435	0.0008	1.20
4	0.5	500	5	0.0099	0.0196	0.1416	0.0033	1.84
4	0.5	500	5	0.0099	0.0196	0.2071	0.0042	2.52
4	0.5	500	5	0.0099	0.0196	0.2685	0.0029	3.40
4	0.5	500	5	0.0099	0.0196	0.3318	0.0044	4.71
4	0.5	500	5	0.0099	0.0196	0.3916	0.0028	6.65
4	0.5	500	5	0.0099	0.0196	0.4398	0.0028	8.94
4	0.5	500	5	0.0099	0.0196	0.4736	0.0029	11.00

Mixtures (*m*=4) (cont.)

m	*d*	N(1)	N(2)	x(2)	ϕ (2)	y	err(y)	*Z*
4	0.5	50	100	0.6667	0.8000	0.0292	0.0004	1.19
4	0.5	50	100	0.6667	0.8000	0.0973	0.0027	1.79
4	0.5	50	100	0.6667	0.8000	0.1447	0.0037	2.41
4	0.5	50	100	0.6667	0.8000	0.1911	0.0057	3.20
4	0.5	50	100	0.6667	0.8000	0.2397	0.0027	4.37
4	0.5	50	100	0.6667	0.8000	0.2900	0.0027	6.02
4	0.5	50	100	0.6667	0.8000	0.3317	0.0030	7.89
4	2	250	50	0.1667	0.6154	0.0525	0.0003	1.23
4	2	250	50	0.1667	0.6154	0.1050	0.0027	1.54
4	2	250	50	0.1667	0.6154	0.1622	0.0038	1.99
4	2	250	50	0.1667	0.6154	0.2300	0.0026	2.81
4	2	250	50	0.1667	0.6154	0.3056	0.0034	4.23
4	2	250	50	0.1667	0.6154	0.3317	0.0054	4.87
4	2	250	50	0.1667	0.6154	0.4064	0.0017	7.94
4	2	500	5	0.0099	0.0741	0.0304	0.0004	1.13
4	2	500	5	0.0099	0.0741	0.0551	0.1148	1.24
4	2	500	5	0.0099	0.0741	0.1246	0.0029	1.65
4	2	500	5	0.0099	0.0741	0.1694	0.0037	2.02
4	2	500	5	0.0099	0.0741	0.2428	0.0041	2.82
4	2	500	5	0.0099	0.0741	0.3071	0.0030	3.90
4	2	500	5	0.0099	0.0741	0.3710	0.3710	5.53
4	2	50	100	0.6667	0.9412	0.1266	0.0037	2.24
4	2	50	100	0.6667	0.9412	0.1783	0.1783	3.18
4	2	50	100	0.6667	0.9412	0.2137	0.0047	3.98
4	2	50	100	0.6667	0.9412	0.2387	0.0030	4.75
4	2	50	100	0.6667	0.9412	0.3971	0.0046	14.28

Mixtures (*m*=5)

m	*d*	N(1)	N(2)	x(2)	ϕ (2)	y	err(y)	*Z*
5	1	250	50	0.1667	0.5000	0.0810	0.0026	1.08
5	1	250	50	0.1667	0.5000	0.1748	0.0040	2.50
5	1	250	50	0.1667	0.5000	0.2409	0.0048	3.62
5	1	250	50	0.1667	0.5000	0.2985	0.0042	5.12
5	1	250	50	0.1667	0.5000	0.3563	0.0043	7.35
5	1	250	50	0.1667	0.5000	0.4154	0.0021	10.50
5	1	250	50	0.1667	0.5000	0.4572	0.0012	14.32
5	1	250	50	0.1667	0.5000	0.4899	0.0019	17.81
5	1	500	5	0.0099	0.0476	0.0551	0.0026	0.99
5	1	500	5	0.0099	0.0476	0.1448	0.0032	1.88
5	1	500	5	0.0099	0.0476	0.2118	0.0040	2.57
5	1	500	5	0.0099	0.0476	0.2721	0.0040	3.50
5	1	500	5	0.0099	0.0476	0.3354	0.0042	4.87
5	1	500	5	0.0099	0.0476	0.3958	0.0036	6.88
5	1	500	5	0.0099	0.0476	0.4428	0.0032	9.22
5	1	500	5	0.0099	0.0476	0.4753	0.0030	11.45
5	1	500	5	0.0099	0.0476	0.5020	0.0030	13.55
5	1	50	100	0.6667	0.9091	0.0955	0.0033	2.01
5	1	50	100	0.6667	0.9091	0.2095	0.0043	4.58
5	1	50	100	0.6667	0.9091	0.2710	0.0044	7.08
5	1	50	100	0.6667	0.9091	0.3241	0.0047	10.37
5	1	50	100	0.6667	0.9091	0.3777	0.0043	15.25
5	1	50	100	0.6667	0.9091	0.4313	0.0022	22.26

Pure Chains

m	*d*	N(1)	N(2)	x(2)	ϕ (2)	y	err(y)	*Z*
3	1	0	200	1.0000	1.0000	0.0875	0.0026	1.80
3	1	0	200	1.0000	1.0000	0.2016	0.0041	3.90
3	1	0	200	1.0000	1.0000	0.2635	0.0045	5.96
3	1	0	200	1.0000	1.0000	0.3186	0.0042	8.63
3	1	0	200	1.0000	1.0000	0.3732	0.0032	12.63
3	1	0	200	1.0000	1.0000	0.4267	0.0007	18.41
4	1	0	200	1.0000	1.0000	0.0989	0.0028	2.12
4	1	0	200	1.0000	1.0000	0.2127	0.0040	4.92
4	1	0	200	1.0000	1.0000	0.2728	0.0038	7.68
4	1	0	200	1.0000	1.0000	0.3254	0.0035	11.26
4	1	0	200	1.0000	1.0000	0.3780	0.0022	16.62
4	1	0	200	1.0000	1.0000	0.4311	0.0016	24.29
5	1	0	200	1.0000	1.0000	0.1064	0.0031	2.46
5	1	0	200	1.0000	1.0000	0.2189	0.0036	5.98
5	1	0	200	1.0000	1.0000	0.2524	0.0035	7.78
5	1	0	200	1.0000	1.0000	0.2783	0.0034	9.41
5	1	0	200	1.0000	1.0000	0.3295	0.0029	13.90
5	1	0	200	1.0000	1.0000	0.3823	0.0023	20.54
5	1	0	200	1.0000	1.0000	0.4111	0.0020	25.48