

**Supporting information for manuscript:**

**Optimising an artificial neural network for predicting the melting point of ionic liquids**

**Table I.** Experimental melting point values for the imidazolium salts studied.<sup>25,36</sup>

Entry	Cation			Anion, Y <sup>-</sup>	Experimental melting point /K
	R <sub>1</sub>	R <sub>2</sub>	R <sub>3</sub>		
1	Me	Me	Me	MeOSO <sub>3</sub>	389
2	Me	Me	Me	NTf <sub>2</sub> <sup>a</sup>	330
3	Me	Me	Et	Br	414
4	Me	Me	Et	Cl	454
5	Me	Me	Et	EtOSO <sub>3</sub>	340
6	Me	Me	Et	MeOSO <sub>3</sub>	346
7	Me	Me	Et	NTf <sub>2</sub> <sup>a</sup>	298
8	Me	Me	Et	PF <sub>6</sub>	469
9	Me	Me	Et	N(SO <sub>2</sub> CF <sub>2</sub> CF <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	298
10	Me	Me	<sup>n</sup> Pr	Cl	411
11	Me	Me	<sup>n</sup> Pr	NTf <sub>2</sub> <sup>a</sup>	284
12	Me	Me	<sup>n</sup> Pr	PF <sub>6</sub>	351
13	Me	Me	<sup>n</sup> Pr	N(SO <sub>2</sub> CF <sub>2</sub> CF <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	307
14	Me	Me	<sup>n</sup> Bu	BF <sub>4</sub>	310
15	Me	Me	<sup>n</sup> Bu	Cl	362
16	Me	Me	Pentyl	OTf <sup>b</sup>	312
17	Me	Me	Hexyl	NTf <sub>2</sub> <sup>a</sup>	268
18	Me	H	Me	Br	449
19	Me	H	Me	BF <sub>3</sub> CF <sub>3</sub>	288
20	Me	H	Me	CF <sub>3</sub> CO <sub>2</sub>	392
21	Me	H	Me	Cl	399
22	Me	H	Me	ClO <sub>4</sub>	337
23	Me	H	Me	MeOSO <sub>3</sub>	316
24	Me	H	Me	NO <sub>3</sub>	357
25	Me	H	Me	NTf <sub>2</sub> <sup>a</sup>	295
26	Me	H	Me	CF <sub>3</sub> CF <sub>2</sub> OSO <sub>3</sub>	288
27	Me	H	Et	AlCl <sub>4</sub>	282
28	Me	H	Et	BF <sub>3</sub> CF <sub>3</sub>	254
29	Me	H	Et	BF <sub>3</sub> CF <sub>2</sub> CF <sub>3</sub>	272
30	Me	H	Et	BF <sub>3</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> CF <sub>3</sub>	281
31	Me	H	Et	BF <sub>3</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> CF <sub>3</sub>	253
32	Me	H	Et	BF <sub>4</sub>	286

**Table I (cont'd).** Experimental melting point values for the imidazolium salts studied

Entry	Cation			Anion, Y <sup>-</sup>	Experimental melting point /K
	R <sub>1</sub>	R <sub>2</sub>	R <sub>3</sub>		
33	Me	H	Et	Br	352
34	Me	H	Et	N(SO <sub>2</sub> CF <sub>2</sub> CF <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	272
35	Me	H	Et	CF <sub>3</sub> CF <sub>2</sub> SO <sub>3</sub>	254
36	Me	H	Et	CF <sub>3</sub> CO <sub>2</sub>	259
37	Me	H	Et	Cl	358
38	Me	H	Et	ClO <sub>4</sub>	280
39	Me	H	Et	CTf <sub>3</sub> <sup>c</sup>	312
40	Me	H	Et	I	352
41	Me	H	Et	MeOSO <sub>3</sub>	196
42	Me	H	Et	N(CF <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	269
43	Me	H	Et	N(CN) <sub>2</sub>	252
44	Me	H	Et	NO <sub>2</sub>	328
45	Me	H	Et	NO <sub>3</sub>	311
46	Me	H	Et	NTf <sub>2</sub> <sup>a</sup>	256
47	Me	H	Et	OTf <sup>b</sup>	264
48	Me	H	Et	OTs <sup>d</sup>	303
49	Me	H	Et	PF <sub>6</sub>	333
50	Me	H	Et	SCN	267
51	Me	H	Et	TFMSTFA <sup>e</sup>	272
52	Me	H	Allyl	Cl	328
53	Me	H	<sup>n</sup> Pr	BF <sub>3</sub> CF <sub>3</sub>	252
54	Me	H	<sup>n</sup> Pr	BF <sub>4</sub>	256
55	Me	H	<sup>n</sup> Pr	Cl	335
56	Me	H	<sup>n</sup> Pr	MeOSO <sub>3</sub>	181
57	Me	H	<sup>n</sup> Pr	OctyloSO <sub>3</sub>	306
58	Me	H	<sup>n</sup> Pr	PF <sub>6</sub>	313
59	Me	H	<sup>n</sup> Bu	AlCl <sub>4</sub>	263
60	Me	H	<sup>n</sup> Bu	BF <sub>4</sub>	202
61	Me	H	<sup>n</sup> Bu	Br	350
62	Me	H	<sup>n</sup> Bu	CF <sub>3</sub> (CF <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> SO <sub>3</sub>	293
63	Me	H	<sup>n</sup> Bu	Cl	340
64	Me	H	<sup>n</sup> Bu	I	201

**Table I (cont'd).** Experimental melting point values for the imidazolium salts studied

Entry	Cation			Anion, Y <sup>-</sup>	Experimental melting point /K
	R <sub>1</sub>	R <sub>2</sub>	R <sub>3</sub>		
65	Me	H	<sup>n</sup> Bu	MeOSO <sub>3</sub>	298
66	Me	H	<sup>n</sup> Bu	N(CN) <sub>2</sub>	267
67	Me	H	<sup>n</sup> Bu	NO <sub>3</sub>	303
68	Me	H	<sup>n</sup> Bu	NTf <sub>2</sub> <sup>a</sup>	271
69	Me	H	<sup>n</sup> Bu	OctylOSO <sub>3</sub>	306
70	Me	H	<sup>n</sup> Bu	OTf <sup>b</sup>	286
71	Me	H	<sup>n</sup> Bu	PF <sub>6</sub>	283
72	Me	H	Pentyl	OTf <sup>b</sup>	312
73	Me	H	Hexyl	BF <sub>4</sub>	191
74	Me	H	Hexyl	Br	221
75	Me	H	Hexyl	Cl	188
76	Me	H	Hexyl	NO <sub>3</sub>	196
77	Me	H	Hexyl	NTf <sub>2</sub> <sup>a</sup>	266
78	Me	H	Hexyl	OTf <sup>b</sup>	294
79	Me	H	Hexyl	PF <sub>6</sub>	199
80	Me	H	Benzyl	BF <sub>4</sub>	350
81	Me	H	Benzyl	Cl	343
82	Me	H	Benzyl	PF <sub>6</sub>	409
83	Me	H	Octyl	BF <sub>4</sub>	185
84	Me	H	Octyl	Cl	218
85	Me	H	Octyl	CTf <sub>3</sub> <sup>c</sup>	265
86	Me	H	Octyl	NO <sub>3</sub>	221
87	Me	H	Octyl	NTf <sub>2</sub> <sup>a</sup>	265
88	Me	H	Octyl	OTf <sup>b</sup>	265
89	Me	H	Octyl	PF <sub>6</sub>	203
90	Me	H	Nonyl	PF <sub>6</sub>	287
91	Me	H	Decyl	Cl	311
92	Me	H	Dodecyl	Cl	369
93	Et	H	Et	MeOSO <sub>3</sub>	191
94	Et	H	Et	NTf <sub>2</sub> <sup>a</sup>	287
95	Et	H	Et	PF <sub>6</sub>	343
96	Pentyl	H	Pentyl	NTf <sub>2</sub> <sup>a</sup>	243
97	H	H	Me	Cl	348

<sup>a</sup> Bis{(trifluoromethyl)sulfonyl}amide

<sup>b</sup> Trifluoromethanesulfonate

<sup>c</sup> Tris(trifluoromethanesulfonyl)methanide

<sup>d</sup> Tosylate

<sup>e</sup> *N*-(trifluoromethylsulfonyl)trifluoroacetamide