

Table S1. Calculated values of $S_{\sigma\text{-profile}}$ (1-8) parameters for the studied solvents and experimental SP and SPP parameters (ref. 10 and 11)

Solvents	SPP Exp	SP Exp	S (1)	S(2)	S(3)	S(4)	S(5)	S(6)	S(7)	S(8)
Perfluorohexane	0.214	0.339	0.0000	0.0003	0.0043	0.0919	0.1302	0.0000	0.0000	0.0000
Methylbuthane	0.479	0.581	0.0000	0.0000	0.0009	0.0698	0.0606	0.0015	0.0000	0.0000
Pentane	0.507	0.594	0.0000	0.0000	0.0007	0.0721	0.0630	0.0015	0.0000	0.0000
Hexane	0.519	0.616	0.0000	0.0000	0.0007	0.0832	0.0713	0.0018	0.0000	0.0000
Octane	0.542	0.650	0.0000	0.0000	0.0007	0.1049	0.0890	0.0023	0.0000	0.0000
Nonane	0.552	0.660	0.0000	0.0000	0.0007	0.1158	0.0976	0.0027	0.0000	0.0000
cyclohexane	0.557	0.683	0.0000	0.0000	0.0000	0.0697	0.0603	0.0012	0.0000	0.0000
n-decane	0.562	0.669	0.0000	0.0000	0.0007	0.1268	0.1038	0.0004	0.0000	0.0000
Undecane	0.563		0.0000	0.0000	0.0007	0.1377	0.1156	0.0032	0.0000	0.0000
Mesitylene	0.576	0.775	0.0000	0.0000	0.0174	0.0748	0.0600	0.0259	0.0001	0.0000
Hexadecane	0.578	0.704	0.0000	0.0000	0.0007	0.1921	0.1595	0.0046	0.0000	0.0000
Pentadecane	0.578	0.700	0.0000	0.0000	0.0007	0.1812	0.1505	0.0043	0.0000	0.0000
cycloheptane	0.582		0.0000	0.0000	0.0002	0.0788	0.0684	0.0013	0.0000	0.0000
cyclooctane	0.590		0.0000	0.0000	0.0002	0.0610	0.0535	0.0016	0.0000	0.0000
Cis-decalin	0.601	0.7527	0.0000	0.0000	0.0002	0.0968	0.0820	0.0017	0.0000	0.0000
p-Xylene	0.617		0.0000	0.0000	0.0199	0.0620	0.0511	0.0266	0.0000	0.0000
1-methylpiperidine	0.622		0.0040	0.0825	0.0529	0.0027	0.0014	0.0026	0.0014	0.0000
Hexafluorobenzene	0.629	0.623	0.0000	0.0000	0.0235	0.0378	0.1004	0.0012	0.0000	0.0000
CCl4	0.632	0.7677	0.0000	0.0000	0.0117	0.0380	0.0846	0.0000	0.0000	0.0000
N-butylbenzene	0.639		0.0000	0.0000	0.0210	0.0857	0.0641	0.0278	0.0000	0.0000
o-xylene	0.641	0.838	0.0000	0.0000	0.0217	0.0585	0.0484	0.0275	0.0000	0.0000
Toluene	0.655	0.782	0.0000	0.0000	0.0241	0.0470	0.0421	0.0274	0.0000	0.0000
diisopropylehter	0.663		0.0000	0.0000	0.0029	0.0838	0.0569	0.0033	0.0029	0.0048
N-methylcyclohexanamine	0.664		0.0000	0.0018	0.0071	0.0867	0.0590	0.0031	0.0020	0.0025
Benzene	0.667	0.793	0.0000	0.0000	0.0165	0.0463	0.0402	0.0195	0.0000	0.0000
Tetralin	0.668	0.838	0.0000	0.0000	0.0164	0.0801	0.0515	0.0277	0.0000	0.0000
diethylehter	0.694	0.6167	0.0000	0.0000	0.0054	0.0614	0.0354	0.0035	0.0058	0.0030
1,4-dioxane	0.701	0.737	0.0000	0.0000	0.0291	0.0529	0.0127	0.0067	0.0119	0.0071
1-methylnapthalene	0.726	0.908	0.0000	0.0000	0.0369	0.0513	0.0631	0.0332	0.0000	0.0000
N-butylamine	0.730	0.6892	0.0000	0.0038	0.0118	0.0646	0.0394	0.0035	0.0032	0.0023
1-undecanol	0.748	0.728	0.0031	0.0042	0.0042	0.1420	0.0969	0.0059	0.0054	0.0063
1-decanol	0.765	0.722	0.0031	0.0042	0.0042	0.1309	0.0878	0.0057	0.0052	0.0064
1-nonanol	0.770	0.717	0.0031	0.0042	0.0042	0.1201	0.0794	0.0054	0.0054	0.0063
n-butylacetate	0.784		0.0000	0.0000	0.0249	0.0858	0.0354	0.0090	0.0160	0.0022
1-octanol	0.785	0.710	0.0021	0.0049	0.0029	0.1089	0.0726	0.0039	0.0078	0.0028
Methylacetate	0.785	0.645	0.0000	0.0000	0.0323	0.0422	0.0117	0.0090	0.0161	0.0019
chloroform	0.786	0.7833	0.0011	0.0068	0.0055	0.0281	0.0715	0.0036	0.0000	0.0000
Pyrrolidine	0.794		0.0026	0.0081	0.0632	0.0304	0.0030	0.0032	0.0020	0.0031
1-heptanol	0.795	0.706	0.0031	0.0042	0.0042	0.0873	0.0533	0.0046	0.0052	0.0064
1-hexanol	0.810	0.698	0.0031	0.0042	0.0042	0.0873	0.0533	0.0046	0.0052	0.0064
1-pentanol	0.817	0.687	0.0031	0.0042	0.0042	0.0762	0.0445	0.0043	0.0054	0.0062
chlorobenzene	0.824	0.8329	0.0000	0.0003	0.0315	0.0260	0.0363	0.0171	0.0000	0.0000
1-butanol	0.837	0.674	0.0025	0.0044	0.0056	0.0638	0.0357	0.0043	0.0057	0.0061
1-chlorobutane	0.837	0.693	0.0000	0.0000	0.0147	0.0624	0.0367	0.0238	0.0001	0.0000
Pyrrole	0.838		0.0046	0.0041	0.0226	0.0191	0.0213	0.0263	0.0078	0.0000
Cycloheptanol	0.841	0.770	0.0018	0.0045	0.0042	0.0839	0.0357	0.0033	0.0054	0.0061
1-propanol	0.847	0.658	0.0025	0.0044	0.0060	0.0513	0.0280	0.0041	0.0055	0.0062
2-propanol	0.848	0.633	0.0023	0.0044	0.0072	0.0484	0.0294	0.0037	0.0049	0.0065
1,1,1,-trichloroethane	0.850	0.7371	0.0000	0.0006	0.0211	0.0353	0.0695	0.0065	0.0000	0.0000
Ethanol	0.853	0.633	0.0025	0.0044	0.0075	0.0385	0.0192	0.0041	0.0053	0.0065
1,2-dimethoxybenzene	0.854		0.0000	0.0001	0.0471	0.0533	0.0376	0.0297	0.0080	0.0031
Methanol	0.857	0.608	0.0033	0.0042	0.0078	0.0270	0.0096	0.0037	0.0050	0.0069
Cyclopentanol	0.865		0.0017	0.0042	0.0065	0.0654	0.0349	0.0044	0.0049	0.0066
Allyl alcohol	0.875	0.705	0.0027	0.0044	0.0192	0.0310	0.0222	0.0125	0.0059	0.0056

Dichloromethane	0.876	0.761	0.0000	0.0067	0.0096	0.0182	0.0321	0.0177	0.0000	0.0000
Acetone	0.881	0.651	0.0000	0.0000	0.0218	0.0444	0.0157	0.0062	0.0138	0.0009
Benzilalcohol	0.886	0.861	0.0028	0.0040	0.0316	0.0392	0.0380	0.0241	0.0058	0.0047
1,2-dichloroethane	0.890	0.771	0.0000	0.0030	0.0292	0.0187	0.0341	0.0328	0.0000	0.0000
1-methylpyrrole	0.890		0.0000	0.0002	0.0339	0.0376	0.0218	0.0239	0.0083	0.0000
2-phenylethanol	0.890		0.0032	0.0042	0.0281	0.0572	0.0355	0.0296	0.0052	0.0054
nitroethane	0.894	0.7057	0.0000	0.0018	0.0322	0.0274	0.0104	0.0268	0.0091	0.0000
Acetonitrile	0.895	0.645	0.0000	0.0032	0.0248	0.0203	0.0088	0.0119	0.0125	0.0012
chloroacetonitrile	0.896		0.0001	0.0159	0.0112	0.0139	0.0298	0.0146	0.0045	0.0000
N-methylacetamide	0.897		0.0024	0.0049	0.0239	0.0420	0.0208	0.0035	0.0063	0.0127
1,2-butanediol	0.899		0.0034	0.0074	0.0141	0.0553	0.0267	0.0086	0.0105	0.0084
2,3-butanediol	0.904		0.0025	0.0062	0.0194	0.0506	0.0252	0.0073	0.0109	0.0087
Acetophenone	0.904	0.848	0.0000	0.0001	0.0414	0.0434	0.0525	0.0093	0.0125	0.0021
nitromethane	0.907	0.7096	0.0000	0.0081	0.0252	0.0128	0.0062	0.0267	0.0094	0.0000
2,2,2-trifluoroethanol	0.908	0.543	0.0047	0.0068	0.0156	0.0111	0.0542	0.0079	0.0067	0.0015
1,2-dichlorobenzene	0.911	0.869	0.0000	0.0009	0.0282	0.0338	0.0824	0.0123	0.0000	0.0000
2-Propinol	0.915		0.0042	0.0090	0.0194	0.0147	0.0187	0.0232	0.0066	0.0040
Propinol	0.915		0.0042	0.0090	0.0194	0.0147	0.0187	0.0232	0.0066	0.0040
N-methylformamide	0.920		0.0033	0.0054	0.0221	0.0293	0.0147	0.0033	0.0084	0.0108
Pyridine	0.922	0.842	0.0000	0.0001	0.0331	0.0240	0.0447	0.0054	0.0047	0.0039
1,2-propanediol	0.926		0.0035	0.0076	0.0156	0.0428	0.0196	0.0084	0.0105	0.0086
1,3-butanediol	0.944		0.0042	0.0038	0.0139	0.0607	0.0256	0.0070	0.0081	0.0092
2,2,2-trichloroethanol	0.960		0.0043	0.0048	0.0169	0.0328	0.0661	0.0083	0.0063	0.0013
Benzonitrile	0.960	0.851	0.0000	0.0014	0.0354	0.0346	0.0494	0.0137	0.0107	0.0004
Water	0.962		0.0063	0.0101	0.0035	0.0021	0.0028	0.0041	0.0052	0.0083
nitrobenzene	0.968	0.891	0.0000	0.0012	0.0387	0.0323	0.0435	0.0260	0.0076	0.0000
DMSO	1.000	0.8295	0.0000	0.0020	0.0390	0.0348	0.0127	0.0028	0.0055	0.0148
Sulfolane	1.003		0.0000	0.0020	0.0518	0.0390	0.0056	0.0093	0.0295	0.0026
1,1,1,3,3,3-Hexafluoro-2-propanol	1.007		0.0024	0.0070	0.0085	0.0028	0.0147	0.0971	0.0064	0.0041
1,3-Hexadiene			0.00000	0.00000	0.01761	0.05270	0.05091	0.02346	0.00144	0.00000
1,3-trans-Pentadiene			0.00000	0.00000	0.01874	0.04829	0.03889	0.02243	0.00044	0.00000
1,4-Pentadiene			0.00000	0.00000	0.01988	0.04796	0.03674	0.02253	0.00088	0.00000
Bromotrichloromethane CBrCl ₃			0.00000	0.00012	0.01290	0.03717	0.08896	0.00008	0.00000	0.00000
Dibromodifluoromethane CBr ₂ F ₂			0.00000	0.00015	0.01084	0.03235	0.07898	0.00004	0.00000	0.00000
Diiodomethane CH ₂ Cl ₂			0.00000	0.00967	0.01604	0.02711	0.05057	0.02198	0.00000	0.00000
Hexene			0.00000	0.00000	0.00751	0.07717	0.05368	0.01303	0.00113	0.00000
n-heptane	0.635		0.0000	0.0000	0.0007	0.0940	0.0801	0.0021	0.0000	0.0000
n-undecane	0.678		0.0000	0.0000	0.0007	0.1377	0.1156	0.0032	0.0000	0.0000
Perfluorocyclohexane C ₆ F ₁₂			0.00000	0.00000	0.00602	0.07390	0.11444	0.00000	0.00000	0.00000
Perfluoropentane C ₅ F ₁₂			0.00000	0.00035	0.00425	0.07972	0.11542	0.00000	0.00000	0.00000
Tetradecane	0.696		0.0000	0.0000	0.0007	0.1703	0.1415	0.0041	0.0000	0.0000
Tridecane	0.690		0.0000	0.0000	0.0007	0.1595	0.1329	0.0038	0.0000	0.0000