

A COSMO-RS Based Guide to Analyze/Quantify the Polarity of Ionic Liquids and their Mixtures with Organic Cosolvents

José Palomar,^{*a} José S. Torrecilla,^b Jesús Lemus,^a Víctor R. Ferro,^a Francisco Rodríguez.^b

Table S1. Nomenclature.

| Cation | Abbreviation |
|---|---------------------------------|
| Ammonium | NH ₄ |
| N-Ethylammonium | NEtH ₃ |
| N-Buthylammonium | NBuH ₃ |
| N,N-Dimethylammonium | NMe ₂ H ₂ |
| N,N-Diethylammonium | NEt ₂ H ₂ |
| N,N,N-Tributhylammonium | NBu ₃ H |
| N,N,N,N-Tetraethylammonium | NEt ₄ |
| N,N,N,N-Tetrapropylammonium | NPr ₄ |
| N,N,N,N-Tetrabutylammonium | NBu ₄ |
| N,N,N,N-Tetrapentylammonium | NPe ₄ |
| N,N,N,N-Tetrahexylammonium | NHx ₄ |
| Tetrabutylphosphonium | PBu ₄ |
| Tributyloctylphosphonium | PBu ₃ Oct |
| Trioctylbutylphosphonium | PMeOc ₃ |
| 1-Methyl-3-Ethyl-imidazolium | Emim |
| 1-Methyl-3-Propyl-imidazolium | Pmim |
| 1-Methyl-3-Butyl-imidazolium | Bmim |
| 1-Methyl-3-Hexyl-imidazolium | Hmim |
| 1-Methyl-3-Octyl-imidazolium | Omim |
| 1-Methyl-3-2-Methoxyethyl-imidazolium | MeOmim |
| 1-Methyl-3-2-Hydroxyethyl-imidazolium | EtOHmim |
| 1-Methyl-3-Benzyl-imidazolium | Bzmim |
| 1,2-Methyl-3-Butyl-imidazolium | Bmmim |
| 1,2-Methyl-3-Octyl-imidazolium | Ommim |
| 1-Propyl-pyridinium | 1Prpyr |
| 1-Butyl-pyridinium | 1Bupyr |
| 1-Methyl-4-Propyl-pyridinium | 1Me4Prpyr |
| 1-Methyl-4-Butyl-pyridinium | 1Me4Bupyr |
| Anion | Abbreviation |
| Trifluoroacetate | F3C-CO ₂ |
| Chloride | Cl |
| Nitrate | NO ₃ |
| Thiocyanate | SCN |
| N,N-Dicarbonate-N,N-Dimethylammonium | Me2N-CO ₂ |
| Methanecarbonate | H3C-CO ₂ |
| Bromide | Br |
| Benzylcarbonate | H5C6-CO ₂ |
| 2-(cyclohexylamino)-ethanesulfonate | CHES |
| 2-[N,N-bis(2-hydroxyethyl)amino]ethanesulfonate | BES |
| Hydrogen sulfate | HSO ₄ |
| Perchlorate | ClO ₄ |
| Bis(trifluoromethanesulfonyl)imide | Tf ₂ N |
| Dicyanamide | (NC) ₂ N |
| Tetrafluoroborate | BF ₄ |
| Hexafluorophosphate | PF ₆ |
| Trifluoromethanesulfonate | TfO |
| Methanesulfonate | CH ₃ SO ₃ |

Table S2. $S_{\sigma\text{-profile}}$ parameters (S1-S10) for cations.

| | S1 | S2 | S3 | S4 | S5 | S6 | S7 | S8 | S9 | S10 |
|-----------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| NH4 | 0,023 | 0,028 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 |
| NEtH3 | 0,012 | 0,021 | 0,008 | 0,028 | 0,021 | 0,004 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 |
| NBuH3 | 0,012 | 0,021 | 0,007 | 0,024 | 0,049 | 0,020 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 |
| NMe2H2 | 0,009 | 0,013 | 0,016 | 0,042 | 0,016 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 |
| NEt2H2 | 0,007 | 0,011 | 0,011 | 0,058 | 0,042 | 0,007 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 |
| NBu3H | 0,003 | 0,005 | 0,010 | 0,066 | 0,136 | 0,057 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 |
| NEt4 | 0,000 | 0,000 | 0,011 | 0,098 | 0,067 | 0,010 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 |
| NPr4 | 0,000 | 0,000 | 0,009 | 0,088 | 0,122 | 0,042 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 |
| NBut4 | 0,000 | 0,000 | 0,008 | 0,081 | 0,177 | 0,074 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 |
| NPe4 | 0,000 | 0,000 | 0,009 | 0,076 | 0,228 | 0,107 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 |
| NHx4 | 0,000 | 0,000 | 0,009 | 0,075 | 0,274 | 0,139 | 0,001 | 0,000 | 0,000 | 0,000 |
| PBu4 | 0,000 | 0,000 | 0,011 | 0,077 | 0,179 | 0,081 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 |
| PBu3Oct | 0,000 | 0,000 | 0,011 | 0,076 | 0,225 | 0,114 | 0,001 | 0,000 | 0,000 | 0,000 |
| PMeOc3 | 0,000 | 0,000 | 0,012 | 0,075 | 0,286 | 0,161 | 0,002 | 0,000 | 0,000 | 0,000 |
| Emim | 0,000 | 0,002 | 0,026 | 0,070 | 0,053 | 0,011 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 |
| Pmim | 0,000 | 0,002 | 0,025 | 0,068 | 0,068 | 0,018 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 |
| Bmim | 0,000 | 0,002 | 0,026 | 0,065 | 0,082 | 0,027 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 |
| Hmim | 0,000 | 0,002 | 0,025 | 0,065 | 0,106 | 0,043 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 |
| Omim | 0,000 | 0,002 | 0,025 | 0,064 | 0,128 | 0,060 | 0,001 | 0,000 | 0,000 | 0,000 |
| MeOmim | 0,000 | 0,002 | 0,029 | 0,078 | 0,063 | 0,012 | 0,005 | 0,004 | 0,001 | 0,000 |
| EtOHmim | 0,000 | 0,006 | 0,033 | 0,071 | 0,041 | 0,010 | 0,004 | 0,005 | 0,003 | 0,000 |
| Bzmim | 0,000 | 0,002 | 0,026 | 0,079 | 0,057 | 0,040 | 0,001 | 0,000 | 0,000 | 0,000 |
| Bmmim | 0,000 | 0,000 | 0,019 | 0,077 | 0,090 | 0,029 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 |
| Ommim | 0,000 | 0,000 | 0,020 | 0,077 | 0,133 | 0,062 | 0,001 | 0,000 | 0,000 | 0,000 |
| 1Prpyr | 0,000 | 0,000 | 0,031 | 0,062 | 0,070 | 0,013 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 |
| 1Bupyr | 0,000 | 0,000 | 0,031 | 0,060 | 0,084 | 0,021 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 |
| 1Me4Prpyr | 0,000 | 0,000 | 0,025 | 0,070 | 0,085 | 0,016 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 |
| 1Me4Bupyr | 0,000 | 0,000 | 0,024 | 0,068 | 0,100 | 0,023 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 |

Table S3. $S_{\sigma\text{-profile}}$ parameters (S1-S10) for anions.

| | S1 | S2 | S3 | S4 | S5 | S6 | S7 | S8 | S9 | S10 |
|----------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| F3C-CO2 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,002 | 0,040 | 0,027 | 0,012 | 0,029 | 0,002 |
| Cl | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,046 | 0,007 |
| NO3 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,002 | 0,005 | 0,007 | 0,035 | 0,028 | 0,001 |
| SCN | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,004 | 0,026 | 0,041 | 0,016 | 0,000 |
| Me2N-CO2 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,030 | 0,031 | 0,012 | 0,010 | 0,017 | 0,022 |
| H3C-CO2 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,001 | 0,015 | 0,020 | 0,007 | 0,006 | 0,018 | 0,023 |
| Br | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,059 | 0,000 |
| H5C6-CO2 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,014 | 0,025 | 0,030 | 0,040 | 0,006 | 0,021 | 0,015 |
| CHES | 0,000 | 0,000 | 0,004 | 0,013 | 0,078 | 0,046 | 0,013 | 0,020 | 0,050 | 0,001 |
| BES | 0,000 | 0,003 | 0,004 | 0,019 | 0,059 | 0,038 | 0,019 | 0,029 | 0,044 | 0,001 |
| HSO4 | 0,000 | 0,003 | 0,003 | 0,002 | 0,002 | 0,004 | 0,011 | 0,044 | 0,027 | 0,000 |
| CIO4 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,005 | 0,026 | 0,064 | 0,000 | 0,000 |
| Tf2N | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,001 | 0,017 | 0,099 | 0,046 | 0,040 | 0,000 | 0,000 |
| (NC)2N | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,002 | 0,026 | 0,020 | 0,030 | 0,024 | 0,000 |
| BF4 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,018 | 0,072 | 0,000 | 0,000 |
| PF6 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,093 | 0,020 | 0,000 | 0,000 |
| TfO | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,003 | 0,050 | 0,017 | 0,048 | 0,008 | 0,000 |
| CH3SO3 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,012 | 0,015 | 0,009 | 0,006 | 0,016 | 0,048 | 0,001 |

Table S4. $S_{\sigma\text{-profile}}$ parameters (S1-S10) for solvent compounds.

| | S1 | S2 | S3 | S4 | S5 | S6 | S7 | S8 | S9 | S10 |
|--|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| 1,1,1,3,3,3-Hexafluoro-2-propanol | 0,002 | 0,007 | 0,009 | 0,003 | 0,015 | 0,097 | 0,006 | 0,004 | 0,000 | 0,000 |
| 1,1,1,-trichloroethane | 0,000 | 0,000 | 0,001 | 0,021 | 0,035 | 0,069 | 0,006 | 0,000 | 0,000 | 0,000 |
| 1,2-butanediol | 0,000 | 0,003 | 0,007 | 0,014 | 0,055 | 0,027 | 0,009 | 0,011 | 0,008 | 0,000 |
| 1,2-dichloroethane | 0,000 | 0,000 | 0,003 | 0,029 | 0,019 | 0,034 | 0,033 | 0,000 | 0,000 | 0,000 |
| 1,2-dichlorobenzene | 0,000 | 0,000 | 0,001 | 0,028 | 0,034 | 0,082 | 0,012 | 0,000 | 0,000 | 0,000 |
| 1,2-dimethoxybenzene | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,047 | 0,053 | 0,038 | 0,030 | 0,008 | 0,003 | 0,000 |
| 1,2-propanediol | 0,000 | 0,003 | 0,008 | 0,016 | 0,043 | 0,020 | 0,008 | 0,010 | 0,009 | 0,000 |
| 1,3-butanediol | 0,000 | 0,004 | 0,004 | 0,014 | 0,061 | 0,026 | 0,007 | 0,008 | 0,009 | 0,000 |
| 1-butanol | 0,000 | 0,003 | 0,004 | 0,006 | 0,064 | 0,036 | 0,004 | 0,006 | 0,006 | 0,000 |
| 1-decanol | 0,000 | 0,003 | 0,004 | 0,004 | 0,131 | 0,088 | 0,006 | 0,005 | 0,006 | 0,000 |
| 1-heptanol | 0,000 | 0,003 | 0,004 | 0,004 | 0,087 | 0,053 | 0,005 | 0,005 | 0,006 | 0,000 |
| 1-hexanol | 0,000 | 0,003 | 0,004 | 0,004 | 0,087 | 0,053 | 0,005 | 0,005 | 0,006 | 0,000 |
| 1-methylnapthalene | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,037 | 0,051 | 0,063 | 0,033 | 0,000 | 0,000 | 0,000 |
| 1-nonanol | 0,000 | 0,003 | 0,004 | 0,004 | 0,120 | 0,079 | 0,005 | 0,005 | 0,006 | 0,000 |
| 1-octanol | 0,000 | 0,003 | 0,004 | 0,004 | 0,109 | 0,071 | 0,005 | 0,005 | 0,006 | 0,000 |
| 1-pentanol | 0,000 | 0,003 | 0,004 | 0,004 | 0,076 | 0,045 | 0,004 | 0,005 | 0,006 | 0,000 |
| 1-propanol | 0,000 | 0,003 | 0,004 | 0,006 | 0,051 | 0,028 | 0,004 | 0,005 | 0,006 | 0,000 |
| 1-undecanol | 0,000 | 0,003 | 0,004 | 0,004 | 0,142 | 0,097 | 0,006 | 0,005 | 0,006 | 0,000 |
| 2,2,2-trichloroethanol | 0,000 | 0,004 | 0,005 | 0,017 | 0,033 | 0,066 | 0,008 | 0,006 | 0,001 | 0,000 |
| 2,2,3,3-tetrafluoro-1-propanol | 0,000 | 0,004 | 0,015 | 0,018 | 0,010 | 0,058 | 0,019 | 0,007 | 0,002 | 0,000 |
| 2,3-butanediol | 0,000 | 0,002 | 0,006 | 0,019 | 0,051 | 0,025 | 0,007 | 0,011 | 0,009 | 0,000 |
| 2-chloroethanol | 0,000 | 0,004 | 0,004 | 0,023 | 0,024 | 0,019 | 0,023 | 0,006 | 0,004 | 0,000 |
| 2-cyanoethanol | 0,000 | 0,005 | 0,006 | 0,031 | 0,022 | 0,012 | 0,016 | 0,018 | 0,004 | 0,000 |
| 2-phenylethanol | 0,000 | 0,003 | 0,004 | 0,028 | 0,057 | 0,036 | 0,030 | 0,005 | 0,005 | 0,000 |
| 2-propanol | 0,000 | 0,002 | 0,004 | 0,007 | 0,048 | 0,029 | 0,004 | 0,005 | 0,006 | 0,000 |
| 2-Propyn-1-ol | 0,000 | 0,004 | 0,009 | 0,019 | 0,015 | 0,019 | 0,023 | 0,007 | 0,004 | 0,000 |
| Acetone | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,022 | 0,044 | 0,016 | 0,006 | 0,014 | 0,001 | 0,000 |
| Acetonitrile | 0,000 | 0,000 | 0,003 | 0,025 | 0,020 | 0,009 | 0,012 | 0,013 | 0,001 | 0,000 |
| Acetophenone | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,041 | 0,043 | 0,053 | 0,009 | 0,013 | 0,002 | 0,000 |
| Allyl alcohol | 0,000 | 0,003 | 0,004 | 0,019 | 0,031 | 0,022 | 0,012 | 0,006 | 0,006 | 0,000 |
| Benzene | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,017 | 0,046 | 0,040 | 0,020 | 0,000 | 0,000 | 0,000 |
| Benzilalcohol | 0,000 | 0,003 | 0,004 | 0,032 | 0,039 | 0,038 | 0,024 | 0,006 | 0,005 | 0,000 |
| Benzonitrile | 0,000 | 0,000 | 0,001 | 0,035 | 0,035 | 0,049 | 0,014 | 0,011 | 0,000 | 0,000 |
| Butane-1,3-diol | 0,000 | 0,004 | 0,004 | 0,014 | 0,061 | 0,026 | 0,007 | 0,008 | 0,009 | 0,000 |
| CCl4 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,012 | 0,038 | 0,085 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 |
| chlorobenzene | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,032 | 0,026 | 0,036 | 0,017 | 0,000 | 0,000 | 0,000 |
| chloroform | 0,000 | 0,001 | 0,007 | 0,006 | 0,028 | 0,072 | 0,004 | 0,000 | 0,000 | 0,000 |
| Cis-decalin | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,097 | 0,082 | 0,002 | 0,000 | 0,000 | 0,000 |
| Cycloheptanol | 0,000 | 0,002 | 0,004 | 0,004 | 0,084 | 0,036 | 0,003 | 0,005 | 0,006 | 0,000 |
| Cyclopentanol | 0,000 | 0,002 | 0,004 | 0,006 | 0,065 | 0,035 | 0,004 | 0,005 | 0,007 | 0,000 |
| Dichloromethane | 0,000 | 0,000 | 0,007 | 0,010 | 0,018 | 0,032 | 0,018 | 0,000 | 0,000 | 0,000 |
| diethylehter | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,005 | 0,061 | 0,035 | 0,003 | 0,006 | 0,003 | 0,000 |
| Diethyleneglycol | 0,000 | 0,001 | 0,007 | 0,029 | 0,059 | 0,016 | 0,010 | 0,013 | 0,011 | 0,000 |
| diisopropylehter | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,007 | 0,088 | 0,057 | 0,003 | 0,003 | 0,005 | 0,000 |
| DMSO | 0,000 | 0,000 | 0,002 | 0,039 | 0,035 | 0,013 | 0,003 | 0,005 | 0,014 | 0,001 |
| Ethanol | 0,000 | 0,003 | 0,004 | 0,008 | 0,039 | 0,019 | 0,004 | 0,005 | 0,007 | 0,000 |
| Glycerol | 0,000 | 0,004 | 0,008 | 0,033 | 0,029 | 0,011 | 0,011 | 0,014 | 0,011 | 0,000 |
| Glycol | 0,000 | 0,005 | 0,010 | 0,020 | 0,014 | 0,018 | 0,023 | 0,006 | 0,005 | 0,000 |
| Hexafluorobenzene | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,023 | 0,038 | 0,100 | 0,001 | 0,000 | 0,000 | 0,000 |
| Hexene | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,008 | 0,077 | 0,054 | 0,013 | 0,001 | 0,000 | 0,000 |
| Mesitylene | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,017 | 0,075 | 0,060 | 0,026 | 0,000 | 0,000 | 0,000 |

Supplementary Material for PCCP

This journal is © The Owner Societies 2010

| | | | | | | | | | | |
|--------------------------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| Methanol | 0,000 | 0,003 | 0,004 | 0,008 | 0,027 | 0,010 | 0,004 | 0,005 | 0,007 | 0,000 |
| Methylacetate | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,032 | 0,042 | 0,012 | 0,009 | 0,016 | 0,002 | 0,000 |
| Methylbutane | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,001 | 0,070 | 0,061 | 0,002 | 0,000 | 0,000 | 0,000 |
| n-butylacetate | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,025 | 0,086 | 0,035 | 0,009 | 0,016 | 0,002 | 0,000 |
| nitrobenzene | 0,000 | 0,000 | 0,001 | 0,039 | 0,032 | 0,044 | 0,026 | 0,008 | 0,000 | 0,000 |
| nitroethane | 0,000 | 0,000 | 0,002 | 0,032 | 0,027 | 0,010 | 0,027 | 0,009 | 0,000 | 0,000 |
| nitromethane | 0,000 | 0,000 | 0,008 | 0,025 | 0,013 | 0,006 | 0,027 | 0,009 | 0,000 | 0,000 |
| N-methylacetamide | 0,000 | 0,002 | 0,005 | 0,024 | 0,042 | 0,021 | 0,003 | 0,006 | 0,013 | 0,000 |
| N-methylformamide | 0,000 | 0,003 | 0,005 | 0,022 | 0,029 | 0,015 | 0,003 | 0,008 | 0,011 | 0,000 |
| o-xylene | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,022 | 0,059 | 0,048 | 0,027 | 0,000 | 0,000 | 0,000 |
| Pentane | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,001 | 0,072 | 0,063 | 0,001 | 0,000 | 0,000 | 0,000 |
| Phenol | 0,000 | 0,006 | 0,002 | 0,027 | 0,025 | 0,035 | 0,029 | 0,006 | 0,000 | 0,000 |
| Propane-1,3-diol | 0,000 | 0,004 | 0,004 | 0,015 | 0,050 | 0,016 | 0,007 | 0,008 | 0,009 | 0,000 |
| p-Xylene | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,020 | 0,062 | 0,051 | 0,027 | 0,000 | 0,000 | 0,000 |
| Pyridine | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,033 | 0,024 | 0,045 | 0,005 | 0,005 | 0,004 | 0,000 |
| Sulfolane | 0,000 | 0,000 | 0,002 | 0,052 | 0,039 | 0,006 | 0,009 | 0,029 | 0,003 | 0,000 |
| Tetralin | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,016 | 0,080 | 0,052 | 0,028 | 0,000 | 0,000 | 0,000 |
| Toluene | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,024 | 0,047 | 0,042 | 0,027 | 0,000 | 0,000 | 0,000 |
| Water | 0,000 | 0,006 | 0,010 | 0,004 | 0,002 | 0,003 | 0,004 | 0,005 | 0,008 | 0,001 |

Table S5. $S_{\sigma\text{-profile}}$ parameters (S1-S10) for mixtures of ILs with solvents.

| | | S0 | S1 | S2 | S3 | S4 | S5 | S6 | S7 | S8 | S9 |
|--------------|--------------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| ACN+BmimBF4 | 0 | 0,000 | 0,000 | 0,003 | 0,025 | 0,020 | 0,009 | 0,012 | 0,013 | 0,001 | 0,000 |
| | 0,1 | 0,000 | 0,000 | 0,005 | 0,029 | 0,027 | 0,011 | 0,012 | 0,018 | 0,001 | 0,000 |
| | 0,3 | 0,000 | 0,001 | 0,010 | 0,037 | 0,039 | 0,014 | 0,014 | 0,030 | 0,001 | 0,000 |
| | 0,5 | 0,000 | 0,001 | 0,014 | 0,045 | 0,051 | 0,018 | 0,015 | 0,042 | 0,001 | 0,000 |
| | 0,7 | 0,000 | 0,001 | 0,019 | 0,053 | 0,064 | 0,022 | 0,016 | 0,054 | 0,000 | 0,000 |
| | 0,9 | 0,000 | 0,002 | 0,023 | 0,061 | 0,076 | 0,025 | 0,017 | 0,066 | 0,000 | 0,000 |
| | 1 | 0,000 | 0,002 | 0,026 | 0,065 | 0,082 | 0,027 | 0,018 | 0,072 | 0,000 | 0,000 |
| | DMF+BmimBF4 | 0 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,031 | 0,050 | 0,014 | 0,003 | 0,008 | 0,010 |
| 0,1 | 0,000 | 0,000 | 0,003 | 0,034 | 0,053 | 0,016 | 0,004 | 0,015 | 0,009 | 0,000 | |
| 0,3 | 0,000 | 0,001 | 0,008 | 0,041 | 0,060 | 0,018 | 0,007 | 0,028 | 0,007 | 0,000 | |
| 0,5 | 0,000 | 0,001 | 0,013 | 0,048 | 0,066 | 0,021 | 0,010 | 0,040 | 0,005 | 0,000 | |
| 0,7 | 0,000 | 0,002 | 0,023 | 0,068 | 0,089 | 0,029 | 0,017 | 0,068 | 0,003 | 0,000 | |
| 0,9 | 0,000 | 0,002 | 0,023 | 0,062 | 0,079 | 0,026 | 0,016 | 0,066 | 0,001 | 0,000 | |
| 1 | 0,000 | 0,002 | 0,026 | 0,065 | 0,082 | 0,027 | 0,018 | 0,072 | 0,000 | 0,000 | |
| MeOH+BmimBF4 | 0 | 0,000 | 0,003 | 0,004 | 0,008 | 0,027 | 0,010 | 0,004 | 0,005 | 0,007 | 0,000 |
| | 0,1 | 0,000 | 0,003 | 0,006 | 0,014 | 0,033 | 0,011 | 0,005 | 0,012 | 0,006 | 0,000 |
| | 0,3 | 0,000 | 0,003 | 0,011 | 0,025 | 0,044 | 0,015 | 0,008 | 0,025 | 0,005 | 0,000 |
| | 0,5 | 0,000 | 0,003 | 0,015 | 0,036 | 0,055 | 0,018 | 0,011 | 0,039 | 0,003 | 0,000 |
| | 0,7 | 0,000 | 0,002 | 0,019 | 0,048 | 0,066 | 0,022 | 0,014 | 0,052 | 0,002 | 0,000 |
| | 0,9 | 0,000 | 0,002 | 0,023 | 0,059 | 0,077 | 0,025 | 0,016 | 0,066 | 0,001 | 0,000 |
| | 1 | 0,000 | 0,002 | 0,026 | 0,065 | 0,082 | 0,027 | 0,018 | 0,072 | 0,000 | 0,000 |
| | ACN+BmimPF6 | 0 | 0,000 | 0,000 | 0,003 | 0,025 | 0,020 | 0,009 | 0,012 | 0,013 | 0,001 |
| 0,1 | | 0,000 | 0,000 | 0,005 | 0,029 | 0,027 | 0,011 | 0,020 | 0,013 | 0,001 | 0,000 |
| 0,3 | | 0,000 | 0,001 | 0,010 | 0,037 | 0,039 | 0,014 | 0,036 | 0,015 | 0,001 | 0,000 |
| 0,5 | | 0,000 | 0,001 | 0,014 | 0,045 | 0,051 | 0,018 | 0,053 | 0,016 | 0,001 | 0,000 |
| 0,7 | | 0,000 | 0,001 | 0,019 | 0,053 | 0,064 | 0,022 | 0,069 | 0,018 | 0,000 | 0,000 |
| 0,9 | | 0,000 | 0,002 | 0,023 | 0,061 | 0,076 | 0,025 | 0,085 | 0,019 | 0,000 | 0,000 |
| 1 | | 0,000 | 0,002 | 0,026 | 0,065 | 0,082 | 0,027 | 0,093 | 0,020 | 0,000 | 0,000 |
| DMF+BmimPF6 | | 0 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,031 | 0,050 | 0,014 | 0,003 | 0,008 | 0,010 |
| | 0,1 | 0,000 | 0,000 | 0,003 | 0,034 | 0,053 | 0,016 | 0,012 | 0,009 | 0,009 | 0,000 |
| | 0,3 | 0,000 | 0,001 | 0,008 | 0,041 | 0,060 | 0,018 | 0,030 | 0,012 | 0,007 | 0,000 |
| | 0,5 | 0,000 | 0,001 | 0,013 | 0,048 | 0,066 | 0,021 | 0,048 | 0,014 | 0,005 | 0,000 |
| | 0,7 | 0,000 | 0,001 | 0,018 | 0,055 | 0,073 | 0,023 | 0,066 | 0,016 | 0,003 | 0,000 |
| | 0,9 | 0,000 | 0,002 | 0,023 | 0,062 | 0,079 | 0,026 | 0,084 | 0,019 | 0,001 | 0,000 |
| | 1 | 0,000 | 0,002 | 0,026 | 0,065 | 0,082 | 0,027 | 0,093 | 0,020 | 0,000 | 0,000 |
| | MeOH+BmimPF6 | 0 | 0,000 | 0,003 | 0,004 | 0,008 | 0,027 | 0,010 | 0,004 | 0,005 | 0,007 |
| 0,1 | | 0,000 | 0,003 | 0,006 | 0,014 | 0,033 | 0,011 | 0,013 | 0,006 | 0,006 | 0,000 |
| 0,3 | | 0,000 | 0,003 | 0,011 | 0,025 | 0,044 | 0,015 | 0,031 | 0,009 | 0,005 | 0,000 |
| 0,5 | | 0,000 | 0,003 | 0,015 | 0,036 | 0,055 | 0,018 | 0,049 | 0,012 | 0,003 | 0,000 |
| 0,7 | | 0,000 | 0,002 | 0,019 | 0,048 | 0,066 | 0,022 | 0,067 | 0,015 | 0,002 | 0,000 |
| 0,9 | | 0,000 | 0,002 | 0,023 | 0,059 | 0,077 | 0,026 | 0,084 | 0,018 | 0,001 | 0,000 |
| 1 | | 0,000 | 0,002 | 0,026 | 0,065 | 0,082 | 0,027 | 0,093 | 0,020 | 0,000 | 0,000 |
| EtOH+BmimBF4 | | 0 | 0,000 | 0,003 | 0,004 | 0,008 | 0,039 | 0,019 | 0,004 | 0,005 | 0,007 |
| | 0,1 | 0,000 | 0,002 | 0,007 | 0,013 | 0,043 | 0,020 | 0,005 | 0,012 | 0,006 | 0,000 |

Supplementary Material for PCCP

This journal is © The Owner Societies 2010

| | | | | | | | | | | | |
|--------------------|------------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| | 0,3 | 0,000 | 0,002 | 0,011 | 0,025 | 0,052 | 0,022 | 0,008 | 0,025 | 0,005 | 0,000 |
| | 0,5 | 0,000 | 0,002 | 0,015 | 0,036 | 0,060 | 0,023 | 0,011 | 0,039 | 0,003 | 0,000 |
| | 0,7 | 0,000 | 0,002 | 0,019 | 0,048 | 0,069 | 0,025 | 0,014 | 0,052 | 0,002 | 0,000 |
| | 0,9 | 0,000 | 0,002 | 0,023 | 0,059 | 0,078 | 0,026 | 0,016 | 0,066 | 0,001 | 0,000 |
| | 1 | 0,000 | 0,002 | 0,026 | 0,065 | 0,082 | 0,027 | 0,018 | 0,072 | 0,000 | 0,000 |
| H2O+BmimBF4 | 0 | 0,000 | 0,006 | 0,010 | 0,004 | 0,002 | 0,003 | 0,004 | 0,005 | 0,008 | 0,001 |
| | 0,1 | 0,000 | 0,006 | 0,012 | 0,010 | 0,010 | 0,005 | 0,005 | 0,012 | 0,008 | 0,001 |
| | 0,3 | 0,000 | 0,005 | 0,015 | 0,022 | 0,026 | 0,010 | 0,008 | 0,025 | 0,006 | 0,000 |
| | 0,5 | 0,000 | 0,004 | 0,018 | 0,034 | 0,042 | 0,015 | 0,011 | 0,039 | 0,004 | 0,000 |
| | 0,7 | 0,000 | 0,003 | 0,021 | 0,047 | 0,058 | 0,020 | 0,014 | 0,052 | 0,003 | 0,000 |
| | 0,9 | 0,000 | 0,002 | 0,024 | 0,059 | 0,074 | 0,025 | 0,016 | 0,066 | 0,001 | 0,000 |
| | 1 | 0,000 | 0,002 | 0,026 | 0,065 | 0,082 | 0,027 | 0,018 | 0,072 | 0,000 | 0,000 |

| | | S0 | S1 | S2 | S3 | S4 | S5 | S6 | S7 | S8 | S9 |
|------------------------|-------------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|
| ACN+HmimTfN | 0 | 0,000 | 0,000 | 0,003 | 0,025 | 0,020 | 0,009 | 0,012 | 0,013 | 0,001 | 0,000 |
| | 0,1 | 0,000 | 0,000 | 0,005 | 0,029 | 0,031 | 0,022 | 0,015 | 0,015 | 0,001 | 0,000 |
| | 0,3 | 0,000 | 0,001 | 0,010 | 0,037 | 0,051 | 0,049 | 0,022 | 0,021 | 0,001 | 0,000 |
| | 0,5 | 0,000 | 0,001 | 0,014 | 0,045 | 0,072 | 0,076 | 0,029 | 0,026 | 0,001 | 0,000 |
| | 0,72 | 0,000 | 0,001 | 0,019 | 0,054 | 0,095 | 0,105 | 0,036 | 0,032 | 0,000 | 0,000 |
| | 0,9 | 0,000 | 0,002 | 0,023 | 0,062 | 0,113 | 0,129 | 0,043 | 0,037 | 0,000 | 0,000 |
| | 1 | 0,000 | 0,002 | 0,025 | 0,066 | 0,124 | 0,143 | 0,046 | 0,040 | 0,000 | 0,000 |
| ACN+BmimTfN | 0 | 0,000 | 0,000 | 0,003 | 0,025 | 0,020 | 0,009 | 0,012 | 0,013 | 0,001 | 0,000 |
| | 0,11 | 0,000 | 0,000 | 0,006 | 0,029 | 0,029 | 0,022 | 0,016 | 0,015 | 0,001 | 0,000 |
| | 0,3 | 0,000 | 0,001 | 0,010 | 0,037 | 0,044 | 0,044 | 0,022 | 0,021 | 0,001 | 0,000 |
| | 0,5 | 0,000 | 0,001 | 0,014 | 0,046 | 0,060 | 0,068 | 0,029 | 0,026 | 0,001 | 0,000 |
| | 0,7 | 0,000 | 0,001 | 0,019 | 0,054 | 0,076 | 0,091 | 0,036 | 0,031 | 0,000 | 0,000 |
| | 0,88 | 0,000 | 0,002 | 0,023 | 0,061 | 0,090 | 0,113 | 0,042 | 0,036 | 0,000 | 0,000 |
| | 1 | 0,000 | 0,002 | 0,026 | 0,066 | 0,100 | 0,127 | 0,046 | 0,040 | 0,000 | 0,000 |
| DCM+BmimTfN | 0 | 0,000 | 0,000 | 0,003 | 0,025 | 0,020 | 0,009 | 0,012 | 0,013 | 0,001 | 0,000 |
| | 0,09 | 0,000 | 0,000 | 0,005 | 0,029 | 0,027 | 0,019 | 0,015 | 0,015 | 0,001 | 0,000 |
| | 0,32 | 0,000 | 0,001 | 0,010 | 0,038 | 0,046 | 0,046 | 0,023 | 0,021 | 0,001 | 0,000 |
| | 0,5 | 0,000 | 0,001 | 0,014 | 0,046 | 0,060 | 0,068 | 0,029 | 0,026 | 0,001 | 0,000 |
| | 0,67 | 0,000 | 0,001 | 0,018 | 0,053 | 0,074 | 0,088 | 0,035 | 0,031 | 0,000 | 0,000 |
| | 1 | 0,000 | 0,002 | 0,026 | 0,066 | 0,100 | 0,127 | 0,046 | 0,040 | 0,000 | 0,000 |
| TFE(OH)+HmimTfO | 0 | 0,000 | 0,006 | 0,005 | 0,019 | 0,009 | 0,052 | 0,010 | 0,008 | 0,001 | 0,000 |
| | 0,12 | 0,000 | 0,005 | 0,008 | 0,024 | 0,021 | 0,057 | 0,011 | 0,012 | 0,002 | 0,000 |
| | 0,3 | 0,000 | 0,004 | 0,011 | 0,032 | 0,039 | 0,065 | 0,012 | 0,020 | 0,003 | 0,000 |
| | 0,52 | 0,000 | 0,004 | 0,016 | 0,043 | 0,061 | 0,074 | 0,014 | 0,028 | 0,005 | 0,000 |
| | 0,67 | 0,000 | 0,003 | 0,019 | 0,049 | 0,076 | 0,080 | 0,015 | 0,034 | 0,006 | 0,000 |
| | 1 | 0,000 | 0,002 | 0,025 | 0,065 | 0,109 | 0,094 | 0,017 | 0,048 | 0,008 | 0,000 |
| TFE(OH)+HmimTfN | 0 | 0,000 | 0,006 | 0,005 | 0,019 | 0,009 | 0,052 | 0,010 | 0,008 | 0,001 | 0,000 |
| | 0,09 | 0,000 | 0,005 | 0,007 | 0,023 | 0,019 | 0,060 | 0,013 | 0,010 | 0,001 | 0,000 |
| | 0,34 | 0,000 | 0,004 | 0,012 | 0,035 | 0,048 | 0,083 | 0,022 | 0,018 | 0,001 | 0,000 |
| | 0,5 | 0,000 | 0,004 | 0,015 | 0,042 | 0,066 | 0,097 | 0,028 | 0,024 | 0,001 | 0,000 |
| | 0,69 | 0,000 | 0,003 | 0,019 | 0,051 | 0,088 | 0,115 | 0,035 | 0,030 | 0,000 | 0,000 |
| | 0,91 | 0,000 | 0,002 | 0,023 | 0,061 | 0,113 | 0,135 | 0,043 | 0,037 | 0,000 | 0,000 |
| | 1 | 0,000 | 0,002 | 0,025 | 0,066 | 0,124 | 0,143 | 0,046 | 0,040 | 0,000 | 0,000 |
| PCB+BmimPF6 | 0 | 0,000 | 0,000 | 0,001 | 0,045 | 0,029 | 0,015 | 0,017 | 0,020 | 0,001 | 0,000 |
| | 0,1 | 0,000 | 0,000 | 0,004 | 0,047 | 0,034 | 0,016 | 0,024 | 0,020 | 0,001 | 0,000 |
| | 0,3 | 0,000 | 0,001 | 0,009 | 0,051 | 0,045 | 0,018 | 0,040 | 0,020 | 0,001 | 0,000 |
| | 0,5 | 0,000 | 0,001 | 0,013 | 0,055 | 0,056 | 0,021 | 0,055 | 0,020 | 0,000 | 0,000 |
| | 0,7 | 0,000 | 0,001 | 0,018 | 0,059 | 0,066 | 0,024 | 0,070 | 0,020 | 0,000 | 0,000 |
| | 0,9 | 0,000 | 0,002 | 0,023 | 0,063 | 0,077 | 0,026 | 0,086 | 0,020 | 0,000 | 0,000 |
| | 1 | 0,000 | 0,002 | 0,026 | 0,065 | 0,082 | 0,027 | 0,093 | 0,020 | 0,000 | 0,000 |
| TEG+BmimPF6 | 0 | 0,000 | 0,008 | 0,008 | 0,031 | 0,123 | 0,029 | 0,013 | 0,032 | 0,014 | 0,000 |
| | 0,1 | 0,000 | 0,007 | 0,009 | 0,035 | 0,119 | 0,029 | 0,021 | 0,030 | 0,013 | 0,000 |

Supplementary Material for PCCP

This journal is © The Owner Societies 2010

| | | | | | | | | | | |
|------------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| 0,3 | 0,000 | 0,006 | 0,013 | 0,041 | 0,111 | 0,029 | 0,037 | 0,028 | 0,010 | 0,000 |
| 0,5 | 0,000 | 0,005 | 0,017 | 0,048 | 0,103 | 0,028 | 0,053 | 0,026 | 0,007 | 0,000 |
| 0,7 | 0,000 | 0,004 | 0,020 | 0,055 | 0,095 | 0,028 | 0,069 | 0,023 | 0,004 | 0,000 |
| 0,9 | 0,000 | 0,002 | 0,024 | 0,062 | 0,087 | 0,028 | 0,085 | 0,021 | 0,001 | 0,000 |
| 1 | 0,000 | 0,002 | 0,026 | 0,065 | 0,082 | 0,027 | 0,093 | 0,020 | 0,000 | 0,000 |