

Electronic Supplementary Information to "Anion effects on the cytotoxicity of ionic liquids"

Stefan Stolte and Johannes Ranke

June 13, 2006

Table 1: All fitted EC₅₀ values and their confidence intervals (conf). The definitions of mtype, sigma, b, and c are given in the documentation of the R package drfit: <http://cran.r-project.org/src/contrib/Descriptions/drfit.html>

	mtype	EC ₅₀	log EC ₅₀	conf	unit	sigma	b	c
Na BF ₄	inactive	>4000			μM			
Na (CN) ₂ N	linlogit	14000	4.15	0.09	μM	0.11	0.24	-2.8e-05
Na SbF ₆	linlogit	200	2.31	0.047	μM	0.086	1.4	-0.00016
Na SCN	inactive	>20000			μM			
Na HSO ₄	linlogit	7800	3.89	0.026	μM	0.049	0.34	-4.9e-05
Na CH ₃ OSO ₃	inactive	>10000			μM			
Na C ₈ H ₁₇ OSO ₃	linlogit	3000	3.48	0.077	μM	0.23	2.5	0.00094
Na CH ₃ SO ₃	inactive	>20000			μM			
Na CF ₃ SO ₃	inactive	>10000			μM			
Na Tos	linlogit	17000	4.22	0.063	μM	0.099	1.2	-4.1e-05
Na F	linlogit	1200	3.07	0.034	μM	0.1	0.57	-0.00049
Na Cl	inactive	>5000			μM			
Na Br	inactive	>5000			μM			
Na I	inactive	>5000			μM			
Li BBDB	linlogit	13	1.13	0.11	μM	0.15	1.1	-0.0023
Li BOB	logit	760	2.88	0.071	μM	0.11	0.42	
Li N(SO ₂ CF ₃) ₂	linlogit	2200	3.33	0.11	μM	0.16	1	-5.2e-05
Li Cl	linlogit	>5000			μM			
C ₂ MIM BF ₄	linlogit	3400	3.53	0.075	μM	0.13	0.43	-7.9e-05
C ₂ MIM BBDB	linlogit	10	1.00	0.06	μM	0.093	1.1	-0.0082
C ₂ MIM BOB	linlogit	860	2.93	0.049	μM	0.14	2.9	-0.00037
C ₂ MIM PF ₆	logit	8400	3.92	0.041	μM	0.13	0.086	
C ₂ MIM (C ₂ F ₅) ₃ PF ₃	no fit	<100			μM			
C ₂ MIM (C ₂ F ₅) ₂ P(O)O	linlogit	680	2.83	0.065	μM	0.22	3.4	0.00054
C ₂ MIM C ₂ H ₅ OSO ₃	linlogit	8500	3.93	0.059	μM	0.16	5.9	-3.5e-05
C ₂ MIM Cl	linlogit	7200	3.86	0.048	μM	0.12	-0.11	-6.2e-05
C ₄ MIM BF ₄	linlogit	1700	3.22	0.025	μM	0.15	0.55	-0.00038
C ₄ MIM (CN) ₂ N	linlogit	1400	3.15	0.071	μM	0.15	2.7	0.00061
C ₄ MIM N(CF ₃) ₂	linlogit	150	2.19	0.082	μM	0.21	2.2	-0.00038
C ₄ MIM N(SO ₂ CF ₃) ₂	linlogit	480	2.68	0.036	μM	0.19	3.9	0.0019
C ₄ MIM PF ₆	linlogit	1300	3.10	0.028	μM	0.089	3.1	1.7e-05
C ₄ MIM C ₂ F ₅) ₃ PF ₃	no fit	<100			μM			
C ₄ MIM SbF ₆	probit	180	2.26	0.035	μM	0.015	0.27	
C ₄ MIM SCN	linlogit	2600	3.42	0.049	μM	0.097	1.8	-1.2e-05
C ₄ MIM HSO ₄	linlogit	1900	3.29	0.042	μM	0.079	1.7	4.3e-05
C ₄ MIM CH ₃ OSO ₃	logit	1700	3.24	0.11	μM	0.21	0.29	
C ₄ MIM C ₈ H ₁₇ OSO ₃	linlogit	1700	3.23	0.052	μM	0.2	4.6	0.0015
C ₄ MIM H ₃ CO(CH ₂) ₂ OSO ₃	linlogit	1100	3.05	0.025	μM	0.17	22	5.6e-06
C ₄ MIM H ₃ C(OCH ₂ CH ₂)OSO ₃	linlogit	1400	3.16	0.081	μM	0.19	2.4	0.00054
C ₄ MIM CH ₃ SO ₃	linlogit	3200	3.51	0.099	μM	0.16	1.5	0.00013
C ₄ MIM CF ₃ SO ₃	linlogit	1000	3.02	0.028	μM	0.12	3.3	0.00041
C ₄ MIM Tos	linlogit	1900	3.29	0.077	μM	0.21	2.4	0.00081
C ₄ MIM Cl	linlogit	3600	3.55	0.071	μM	0.17	1.9	0.00068
C ₄ MIM Br	linlogit	2700	3.43	0.079	μM	0.12	2	0.00055
C ₄ MIM I	linlogit	3000	3.48	0.049	μM	0.097	1.8	7.2e-05
C ₄ MIM Co(CO) ₄	linlogit	280	2.44	0.053	μM	0.14	3.6	-0.00094
C ₆ MIM BF ₄	linlogit	960	2.98	0.11	μM	0.3	2	0.0043
C ₆ MIM (CF ₃ SO ₂) ₃ C	linlogit	3300	3.51	0.087	μM	0.19	2.6	-0.00018
C ₆ MIM N(SO ₂ CF ₃) ₂	linlogit	180	2.24	0.062	μM	0.29	2.3	0.0093
C ₆ MIM PF ₆	linlogit	810	2.91	0.19	μM	0.42	1.7	0.0086
C ₆ MIM (C ₂ F ₅) ₃ PF ₃	no fit	<100			μM			
C ₆ MIM (C ₃ F ₇) ₃ PF ₃	no fit	<50			μM			
C ₆ MIM Cl	linlogit	720	2.86	0.098	μM	0.37	2.1	0.0037
C ₈ MIM Cl	linlogit	100	2.01	0.055	μM	0.19	2.1	0.06290
C ₈ MIM N(SO ₂ CF ₃) ₂	probit	38	1.58	0.11	μM	0.21	0.56	
C ₁₀ MIM Cl	linlogit	22	1.34	0.042	μM	0.11	2.1	0.07690