

Table S1 Activity coefficients of M4 cellulose model in ionic liquids calculated by COSMO-RS at 90 °C

	F	Ac	Fm	C6H5CO2	Cl	C2H6PO4	C4H10SO4	C8H18PO4	E2PO4	MeSO3	Br	tol-SO3	EtSO4	MeSO4	SCN	HSO4	BF4	CCN3	CF3SO3	PF6	BC4N4	FeCl4	Tf2N	PB6								
bbbbN	0.12	0.30	0.34	0.38	0.39	0.42	0.41	0.41	0.42	0.49	0.51	0.56	0.57	0.57	0.57	0.59	0.62	0.63	0.63	0.64	0.66	0.72	0.72	0.75	0.75	0.82	0.83	0.89	0.91	1.03		
bbbbP	0.13	0.31	0.35	0.40	0.41	0.43	0.43	0.42	0.43	0.50	0.53	0.57	0.58	0.58	0.58	0.60	0.63	0.64	0.64	0.64	0.65	0.67	0.73	0.73	0.75	0.76	0.82	0.84	0.89	0.91	1.02	
bbboP	0.13	0.31	0.35	0.39	0.40	0.43	0.42	0.42	0.43	0.50	0.52	0.56	0.58	0.58	0.58	0.59	0.62	0.63	0.64	0.63	0.64	0.66	0.71	0.72	0.75	0.75	0.82	0.83	0.90	0.91	1.02	
becep	0.13	0.37	0.42	0.47	0.46	0.43	0.48	0.47	0.49	0.59	0.62	0.65	0.68	0.68	0.68	0.73	0.79	0.72	0.68	0.74	0.77	0.84	0.93	0.88	0.92	0.86	0.94	0.99	0.93	0.94	1.10	
Cl4rHxP	0.14	0.33	0.36	0.41	0.42	0.42	0.44	0.45	0.45	0.51	0.53	0.58	0.60	0.60	0.60	0.60	0.64	0.65	0.67	0.65	0.65	0.67	0.70	0.74	0.77	0.77	0.85	0.84	0.94	0.95	1.05	
MpPyr	0.14	0.39	0.44	0.49	0.50	0.53	0.51	0.48	0.52	0.63	0.66	0.68	0.70	0.70	0.70	1.16	0.82	0.75	0.70	0.78	0.81	0.87	0.98	0.92	0.92	0.89	0.97	0.98	0.93	0.94	1.07	
BmPyr	0.15	0.38	0.43	0.47	0.49	0.51	0.49	0.47	0.50	0.61	0.64	0.66	0.68	0.68	0.68	0.74	0.78	0.73	0.69	0.75	0.78	0.83	0.93	0.88	0.88	0.86	0.93	0.94	0.91	0.93	1.05	
Bmmim	0.17	0.42	0.47	0.51	0.53	0.54	0.52	0.50	0.53	0.64	0.69	0.69	0.70	0.70	0.70	0.77	0.86	0.75	0.70	0.77	0.80	0.89	0.96	0.87	0.98	0.86	0.90	1.06	0.90	0.92	1.11	
1e2mPy	0.19	0.48	0.54	0.58	0.59	0.61	0.58	0.54	0.59	0.73	0.80	0.77	0.78	0.78	0.78	0.89	1.04	0.83	0.75	0.87	0.91	1.06	1.12	0.99	1.17	0.95	0.99	1.26	0.95	0.96	1.22	
1b4mPy	0.21	0.47	0.52	0.56	0.58	0.59	0.56	0.53	0.57	0.68	0.75	0.72	0.73	0.73	0.73	0.82	0.91	0.78	0.73	0.81	0.84	0.93	0.99	0.89	1.02	0.88	0.90	1.10	0.89	0.92	1.11	
EtOEmim	0.22	0.49	0.55	0.58	0.61	0.61	0.58	0.55	0.60	0.72	0.80	0.75	0.76	0.76	0.76	0.86	0.97	0.81	0.75	0.84	0.88	0.99	1.05	0.94	1.07	0.91	0.94	1.14	0.91	0.93	1.13	
1Hx4mPy	0.22	0.45	0.50	0.54	0.57	0.57	0.54	0.52	0.56	0.65	0.72	0.69	0.70	0.70	0.70	0.77	0.86	0.75	0.71	0.77	0.79	0.87	0.93	0.83	0.96	0.84	0.85	1.03	0.87	0.87	0.90	1.07
Pmmim	0.25	0.56	0.63	0.65	0.69	0.68	0.64	0.59	0.65	0.80	0.89	0.81	0.83	0.83	0.83	0.72	1.06	0.86	0.78	0.92	0.96	1.09	1.17	1.01	1.14	0.97	0.97	1.18	0.90	0.93	1.11	
Hxnmim	0.25	0.51	0.57	0.59	0.64	0.62	0.60	0.57	0.61	0.72	0.81	0.74	0.75	0.75	0.75	0.77	0.92	0.79	0.74	0.82	0.85	0.94	1.00	0.88	0.99	0.87	0.86	1.04	0.84	0.89	1.03	
Emim	0.26	0.59	0.67	0.69	0.73	0.72	0.67	0.62	0.69	0.85	0.95	0.86	0.88	0.88	0.88	1.04	1.15	0.91	0.81	0.97	1.03	1.18	1.27	1.09	1.22	1.02	1.03	1.26	0.92	0.96	1.15	
Denmim	0.26	0.48	0.53	0.56	0.60	0.59	0.57	0.55	0.58	0.67	0.74	0.70	0.70	0.70	0.70	0.76	0.82	0.75	0.72	0.76	0.78	0.84	0.89	0.79	0.90	0.81	0.80	0.94	0.81	0.86	0.97	
Bmim	0.26	0.55	0.61	0.63	0.68	0.66	0.63	0.59	0.64	0.77	0.86	0.79	0.80	0.80	0.80	0.92	1.00	0.84	0.77	0.88	0.92	1.02	1.11	0.96	1.07	0.93	0.93	1.11	0.87	0.91	1.07	
Hpmim	0.26	0.51	0.56	0.59	0.64	0.62	0.59	0.56	0.60	0.71	0.79	0.73	0.74	0.74	0.74	0.84	0.89	0.78	0.74	0.81	0.84	0.91	0.97	0.85	0.96	0.86	0.85	1.01	0.83	0.88	1.01	
Oemim	0.26	0.50	0.55	0.58	0.62	0.61	0.58	0.56	0.59	0.69	0.77	0.72	0.72	0.72	0.72	0.96	0.86	0.77	0.73	0.79	0.82	0.88	0.94	0.83	0.94	0.84	0.83	0.98	0.82	0.87	1.00	
Mmim	0.26	0.65	0.73	0.75	0.78	0.78	0.72	0.65	0.74	0.93	1.04	0.92	0.95	0.95	0.95	0.80	1.29	0.97	0.84	1.06	1.13	1.33	1.43	1.22	1.35	1.11	1.12	1.37	0.95	0.98	1.19	
BFy	0.27	0.56	0.63	0.64	0.70	0.68	0.64	0.59	0.65	0.79	0.90	0.80	0.81	0.81	0.81	0.94	1.05	0.85	0.78	0.90	0.94	1.07	1.14	0.98	1.13	0.94	0.94	1.18	0.89	0.92	1.12	
Bznmim	0.28	0.60	0.67	0.69	0.75	0.72	0.67	0.62	0.69	0.85	0.96	0.85	0.86	0.86	0.86	1.02	1.14	0.90	0.81	0.96	1.01	1.15	1.22	1.04	1.23	0.99	0.98	1.29	0.92	0.94	1.20	
OHEmim	0.43	0.89	1.00	0.96	1.06	1.00	0.91	0.80	0.92	1.17	1.32	1.09	1.15	1.15	1.15	1.42	1.47	1.12	0.95	1.23	1.33	1.52	1.67	1.38	1.43	1.22	1.16	1.38	0.92	0.98	1.10	
MeOEtPyr	0.57	1.02	1.14	1.06	1.26	1.09	0.99	0.87	1.00	1.28	1.52	1.15	1.20	1.20	1.50	1.50	1.50	1.16	1.00	1.29	1.38	1.56	1.72	1.32	1.41	1.21	1.02	1.31	0.79	0.90	0.96	
b-N	1.96	2.23	2.45	1.84	2.72	1.91	1.68	1.42	1.70	2.20	2.78	1.67	1.74	1.74	2.35	1.78	1.57	1.57	1.30	1.82	1.98	1.87	2.53	1.53	1.34	1.42	0.87	1.04	0.49	0.75	0.56	

Table S2 Activity coefficients of p-coumaryl alcohol lignin model in ionic liquids calculated by COSMO-RS at 90 °C

	F	Ac	Fm	Cl	C6H5CO2	C2H6PO4	C4H10SO4	E2FO4	C8H18FO4	MeSO3	tol-SO3	NO3	CF3CO2	CF3CO3	Den	EtSO4	MeSO4	C4H9SO5	C8H17SO4	HSO4	SCN	Br	CCN3	BF4	CF3SO3	BC4N4	PF6	PB6	T2N	FeCl4
bbbbN	0.001	0.04	0.06	0.08	0.10	0.10	0.10	0.11	0.11	0.16	0.26	0.31	0.33	0.33	0.39	0.39	0.39	0.40	0.44	0.45	0.49	0.51	0.66	0.73	0.75	0.88	1.15	1.33	1.34	1.36
bbbP	0.001	0.04	0.06	0.08	0.10	0.11	0.11	0.12	0.12	0.17	0.27	0.32	0.34	0.34	0.40	0.40	0.41	0.42	0.46	0.47	0.50	0.53	0.68	0.74	0.76	0.89	1.15	1.34	1.35	1.37
bbboP	0.002	0.04	0.06	0.09	0.11	0.12	0.12	0.12	0.13	0.18	0.29	0.34	0.36	0.36	0.42	0.43	0.43	0.44	0.49	0.48	0.53	0.52	0.72	0.78	0.75	0.95	1.23	1.45	1.46	1.49
beecP	0.002	0.05	0.06	0.09	0.11	0.12	0.12	0.12	0.12	0.18	0.28	0.35	0.35	0.35	0.44	0.41	0.43	0.42	0.43	0.53	0.56	0.62	0.72	0.79	0.86	0.93	1.16	1.23	1.22	1.24
BmPyrr	0.002	0.05	0.07	0.10	0.11	0.12	0.12	0.13	0.12	0.19	0.29	0.36	0.36	0.36	0.45	0.43	0.45	0.44	0.45	0.55	0.57	0.64	0.72	0.81	0.86	0.91	1.18	1.22	1.24	1.25
MpPyrr	0.002	0.05	0.07	0.10	0.12	0.12	0.12	0.13	0.12	0.20	0.29	0.37	0.37	0.37	0.46	0.44	0.46	0.44	0.45	0.57	0.59	0.66	0.74	0.84	0.89	0.93	1.21	1.22	1.23	1.25
C14trHxP	0.002	0.06	0.08	0.11	0.14	0.14	0.15	0.16	0.16	0.22	0.35	0.41	0.45	0.45	0.52	0.52	0.53	0.54	0.61	0.58	0.65	0.53	0.89	0.96	0.77	1.17	1.52	1.80	1.80	1.86
Bmmim	0.002	0.05	0.07	0.10	0.12	0.13	0.12	0.13	0.13	0.20	0.30	0.37	0.36	0.36	0.49	0.44	0.45	0.44	0.45	0.55	0.59	0.69	0.78	0.79	0.86	1.00	1.12	1.27	1.20	1.21
1e2mPy	0.003	0.06	0.09	0.12	0.14	0.14	0.13	0.14	0.14	0.22	0.32	0.42	0.40	0.40	0.57	0.47	0.50	0.47	0.46	0.63	0.69	0.80	0.90	0.86	0.95	1.15	1.17	1.32	1.20	1.22
1b4mPy	0.004	0.06	0.09	0.12	0.14	0.14	0.14	0.15	0.14	0.22	0.32	0.39	0.39	0.39	0.52	0.46	0.48	0.46	0.47	0.57	0.62	0.75	0.82	0.80	0.88	1.04	1.11	1.27	1.20	1.20
EtOEmim	0.004	0.07	0.09	0.12	0.14	0.15	0.14	0.15	0.15	0.23	0.33	0.41	0.40	0.40	0.55	0.47	0.50	0.47	0.48	0.60	0.66	0.80	0.85	0.83	0.91	1.07	1.14	1.27	1.21	1.21
1Hx4mPy	0.004	0.06	0.08	0.12	0.14	0.14	0.14	0.15	0.14	0.21	0.31	0.38	0.38	0.38	0.51	0.45	0.46	0.45	0.48	0.55	0.60	0.72	0.80	0.77	0.84	1.02	1.09	1.28	1.22	1.21
BPy	0.01	0.08	0.11	0.15	0.16	0.17	0.16	0.17	0.16	0.26	0.36	0.46	0.43	0.43	0.60	0.51	0.54	0.51	0.51	0.66	0.71	0.90	0.91	0.88	0.94	1.12	1.16	1.27	1.21	1.19
Pmmim	0.01	0.08	0.11	0.15	0.16	0.17	0.16	0.17	0.16	0.26	0.36	0.47	0.44	0.44	0.60	0.52	0.55	0.51	0.50	0.68	0.72	0.89	0.90	0.91	0.97	1.11	1.19	1.25	1.21	1.20
Hxmim	0.01	0.08	0.10	0.14	0.16	0.16	0.16	0.17	0.16	0.24	0.35	0.43	0.42	0.42	0.55	0.49	0.51	0.49	0.50	0.61	0.66	0.81	0.84	0.82	0.87	1.03	1.12	1.23	1.21	1.19
Bnmim	0.01	0.08	0.11	0.15	0.16	0.17	0.16	0.17	0.16	0.26	0.36	0.45	0.43	0.43	0.58	0.51	0.53	0.50	0.51	0.65	0.69	0.86	0.87	0.87	0.93	1.07	1.16	1.23	1.21	1.19
Hpmim	0.01	0.08	0.10	0.14	0.16	0.16	0.16	0.17	0.17	0.24	0.35	0.42	0.42	0.42	0.54	0.49	0.51	0.49	0.51	0.60	0.65	0.79	0.82	0.82	0.86	1.02	1.11	1.23	1.23	1.20
Ocmim	0.01	0.08	0.10	0.14	0.16	0.16	0.16	0.17	0.17	0.24	0.35	0.42	0.42	0.42	0.54	0.49	0.50	0.49	0.51	0.59	0.64	0.77	0.82	0.81	0.84	1.01	1.11	1.24	1.24	1.21
Emim	0.01	0.09	0.12	0.16	0.17	0.18	0.17	0.18	0.17	0.28	0.38	0.50	0.46	0.46	0.64	0.55	0.58	0.53	0.51	0.73	0.77	0.95	0.95	0.97	1.02	1.16	1.24	1.27	1.22	1.21
Demim	0.01	0.08	0.10	0.14	0.16	0.16	0.16	0.17	0.17	0.24	0.35	0.41	0.42	0.42	0.53	0.49	0.50	0.49	0.52	0.58	0.63	0.74	0.81	0.80	0.81	1.01	1.11	1.26	1.27	1.23
Bzmim	0.01	0.09	0.12	0.16	0.17	0.18	0.17	0.18	0.17	0.27	0.38	0.49	0.45	0.45	0.64	0.54	0.57	0.52	0.52	0.70	0.76	0.96	0.97	0.92	0.99	1.21	1.18	1.34	1.20	1.21
Mmim	0.01	0.09	0.13	0.18	0.19	0.20	0.18	0.19	0.18	0.31	0.41	0.56	0.50	0.50	0.72	0.59	0.64	0.57	0.53	0.83	0.87	1.04	1.04	1.07	1.11	1.25	1.32	1.30	1.24	1.23
OHEmim	0.02	0.16	0.21	0.26	0.28	0.28	0.26	0.27	0.25	0.41	0.50	0.71	0.63	0.63	0.84	0.71	0.76	0.66	0.61	0.97	1.00	1.32	1.10	1.18	1.22	1.24	1.35	1.20	1.22	1.19
MeOEPyrr	0.03	0.22	0.28	0.34	0.37	0.35	0.32	0.34	0.31	0.48	0.57	0.78	0.72	0.72	0.92	0.76	0.82	0.72	0.68	1.02	1.08	1.52	1.13	1.15	1.21	1.22	1.22	1.09	1.16	1.05
b-N	0.51	0.83	0.95	1.01	0.93	0.85	0.77	0.80	0.71	1.03	0.99	1.40	1.23	1.23	1.22	1.21	1.31	1.08	1.00	1.65	1.41	2.78	1.16	1.38	1.42	1.03	1.10	0.68	1.03	0.71