



SUPPLEMENTARY MATERIAL TO
**Prediction of excess molar volumes of selected binary mixtures
from refractive index data**

JELENA M. VUKSANOVIĆ, DIVNA M. BAJIĆ, GORICA R. IVANIŠ, EMILA M.
ŽIVKOVIĆ, IVONA R. RADOVIĆ, SLOBODAN P. ŠERBANOVIĆ
and MIRJANA LJ. KJEVČANIN*

*Faculty of Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Karnegijeva 4,
11120 Belgrade, Serbia*

J. Serb. Chem. Soc. 79 (6) (2014) 707–718

TABLE S-I. Results, $PD_{\max}$ (%), of the V^E prediction of the binary liquid mixtures; hv – high value (above 100 %)

T / K	Model	Model					
		L–L	D–G	Eyk	A–B	New	Ost
Acetone (1) + 1-propanol (2)							
288.15	I	58.23	62.03	58.57	32.11	70.07	41.19
	II	54.42	67.13	60.66	31.74	86.13	46.86
	III	58.06	61.85	58.40	32.13	69.86	62.14
293.15	I	58.86	61.61	58.72	32.57	67.51	39.40
	II	54.15	66.64	60.25	32.21	85.37	45.88
	III	58.73	61.47	58.59	32.59	67.34	60.80
298.15	I	68.52	71.02	68.32	30.76	75.86	45.72
	II	63.04	76.39	69.53	30.39	96.46	53.29
	III	68.40	70.89	68.19	30.77	75.71	69.47
303.15	I	84.17	84.88	82.33	24.88	88.58	55.27
	II	76.14	90.85	83.25	24.47	h _v ¹	64.34
	III	84.05	84.75	82.21	24.89	88.43	82.41
308.15	I	98.42	98.38	96.29	21.36	h _v	64.73
	II	89.04	h _v	96.57	20.99	h _v	75.35
	III	98.32	98.27	96.18	21.36	99.90	94.72
313.15	I	h _v	h _v	h _v	18.24	h _v	95.71
	II	h _v	h _v	h _v	18.08	h _v	h _v
	III	h _v	h _v	h _v	18.24	h _v	h _v
318.15	I	h _v	h _v	h _v	32.37	h _v	h _v
	II	h _v	h _v	h _v	32.60	h _v	h _v
	III	h _v	h _v	h _v	32.36	h _v	h _v
323.15	I	h _v	h _v	h _v	41.44	h _v	h _v

* Corresponding author. E-mail: mirjana@tmf.bg.ac.rs

TABLE S-I. Continued

T / K	Model	Model					
		L-L	D-G	Eyk	A-B	New	Ost
Acetone (1) + 1-propanol (2)							
323.15	II	hv	hv	hv	42.06	hv	hv
	III	hv	hv	hv	41.42	hv	hv
Acetone (1) + 1,2 propanediol (2)							
288.15	I	12.66	11.12	12.20	55.17	8.98	19.11
	II	11.81	9.38	9.91	54.72	11.62	15.31
	III	13.20	11.51	12.66	55.22	9.23	11.56
293.15	I	12.23	10.17	11.73	55.09	7.17	19.36
	II	10.92	7.39	8.35	54.64	9.87	15.54
	III	12.92	10.79	12.30	55.14	7.68	10.85
298.15	I	10.43	8.55	9.89	54.64	6.45	18.08
	II	9.35	7.17	7.62	54.17	10.97	14.12
	III	11.06	9.00	10.50	54.69	6.81	9.07
303.15	I	8.33	6.80	7.98	53.94	6.47	16.02
	II	7.68	7.04	6.99	53.46	12.88	11.92
	III	8.78	7.29	8.44	54.00	6.46	7.38
308.15	I	6.73	6.33	6.47	53.37	6.58	14.37
	II	6.77	7.82	6.52	52.87	15.58	10.12
	III	7.20	6.32	6.88	53.43	6.57	6.46
313.15	I	7.42	7.74	7.59	52.38	8.67	11.92
	II	7.67	10.83	8.53	51.85	20.57	8.76
	III	7.38	7.70	7.55	52.45	8.30	7.85
318.15	I	10.41	9.29	10.33	54.67	7.94	18.28
	II	8.27	6.30	6.99	54.19	10.91	14.44
	III	10.96	9.90	10.90	54.73	8.40	10.27
323.15	I	12.00	11.16	12.06	54.20	9.58	18.65
	II	9.67	7.11	8.04	53.73	11.46	14.93
	III	12.52	11.74	12.60	54.26	10.27	12.23
Acetone (1) + 1,3 propanediol (2)							
288.15	I	11.90	15.44	13.03	40.60	21.01	5.20
	II	14.99	23.89	19.35	39.95	37.20	9.69
	III	10.93	14.36	12.02	40.69	19.72	14.65
293.15	I	12.29	15.67	13.33	39.98	21.05	5.37
	II	15.40	24.21	19.73	39.32	37.35	9.65
	III	11.30	14.57	12.30	40.07	19.73	14.79
298.15	I	12.25	15.46	13.19	39.71	20.61	5.73
	II	15.48	24.08	19.66	39.06	37.03	9.19
	III	11.24	14.35	12.15	39.80	19.28	14.48
303.15	I	11.65	14.71	12.50	40.31	19.67	5.88
	II	14.93	23.43	19.04	39.66	36.25	8.11
	III	10.63	13.58	11.44	40.40	18.32	13.63
308.15	I	11.77	14.68	12.53	39.87	19.42	6.76

TABLE S-I. Continued

<i>T</i> / K	Model	Model					
		L–L	D–G	Eyk	A–B	New	Ost
Acetone (1) + 1,3 propanediol (2)							
308.15	II	15.11	23.45	19.12	39.22	36.08	7.81
	III	10.73	13.53	11.46	39.96	18.06	13.50
313.15	I	10.60	13.00	11.02	38.63	17.30	9.83
	II	13.62	21.43	17.36	38.01	33.31	8.85
	III	10.01	11.89	10.35	38.71	15.98	11.78
318.15	I	11.42	13.73	11.78	38.15	17.94	10.74
	II	14.59	22.36	18.29	37.62	34.21	9.96
	III	10.80	12.59	11.12	38.24	16.59	12.43
323.15	I	13.24	14.85	13.56	37.47	18.62	12.99
	II	15.63	23.26	19.24	36.96	34.93	12.40
	III	12.82	14.14	12.97	37.56	17.25	13.96
Butyl lactate (1) + 1-propanol (2)							
288.15	I	11.49	10.99	11.71	56.15	11.08	17.21
	II	18.60	12.26	14.63	56.34	9.19	14.11
	III	11.55	11.02	11.77	56.16	11.12	11.81
293.15	I	11.30	10.89	11.52	56.07	10.96	16.81
	II	17.93	12.07	21.38	56.26	9.44	14.11
	III	11.36	10.93	11.58	56.09	11.00	11.71
298.15	I	11.82	11.49	12.07	56.47	11.63	17.69
	II	18.48	12.64	14.99	56.65	9.27	14.83
	III	11.88	11.52	12.14	56.48	11.67	12.33
303.15	I	12.91	12.73	13.26	56.93	13.11	19.43
	II	19.78	13.84	16.11	57.11	10.33	16.14
	III	12.97	12.76	13.32	56.95	13.14	13.64
308.15	I	10.73	11.01	11.28	56.35	11.14	17.18
	II	17.37	12.16	13.94	56.53	9.78	14.15
	III	10.78	11.04	11.31	56.37	11.18	11.85
313.15	I	9.42	14.03	9.93	56.04	9.58	16.13
	II	16.00	10.81	12.46	56.22	9.73	12.88
	III	9.45	9.64	9.96	56.05	9.63	10.42
318.15	I	8.41	8.55	8.90	55.89	8.96	15.52
	II	15.02	9.81	11.78	56.07	9.27	12.42
	III	8.45	8.59	8.94	55.90	8.94	9.37
323.15	I	7.37	7.50	7.87	55.60	8.25	14.51
	II	13.61	8.79	10.46	55.79	9.98	11.32
	III	7.41	7.54	7.91	55.61	8.22	8.33
Butyl lactate (1) + 1,2-propanediol (2)							
288.15	I	29.96	26.52	27.99	44.36	22.24	26.70
	II	28.88	26.24	27.45	44.33	22.77	27.19
	III	29.95	26.51	27.98	44.35	22.23	24.74
293.15	I	31.59	28.50	29.80	43.67	24.25	28.53

TABLE S-I. Continued

T / K	Model	Model					
		L-L	D-G	Eyk	A-B	New	Ost
Butyl lactate (1) + 1,2-propanediol (2)							
293.15	II	30.42	28.24	29.24	43.65	25.18	29.10
	III	31.58	28.49	29.79	43.67	24.24	26.87
	298.15	I	34.22	31.50	32.62	43.31	27.78
II		32.93	31.27	32.04	43.29	28.94	31.99
III		34.21	31.50	32.61	43.31	27.78	30.02
303.15	I	35.25	32.78	33.77	42.80	29.42	32.39
	II	33.83	32.56	33.16	42.78	30.77	33.16
	III	35.25	32.78	33.76	42.80	29.41	31.39
308.15	I	37.13	34.29	35.42	42.06	30.93	33.84
	II	35.47	34.10	34.74	42.04	32.51	34.80
	III	37.12	34.29	35.42	42.06	30.92	32.68
313.15	I	41.20	39.05	39.84	41.97	36.15	38.13
	II	39.44	38.92	39.16	41.96	38.18	39.20
	III	41.20	39.05	39.84	41.97	36.15	37.71
318.15	I	47.13	45.87	46.22	42.34	44.24	44.23
	II	45.21	45.79	45.52	42.33	46.62	45.45
	III	47.13	45.86	46.21	42.34	44.24	44.88
323.15	I	48.73	47.87	48.01	40.86	46.84	45.76
	II	46.68	47.85	47.29	40.86	49.51	47.11
	III	48.72	47.87	48.00	40.86	46.83	47.03
Butyl lactate (1) + 1,3-propanediol (2)							
288.15	I	23.81	16.71	20.02	59.06	6.79	13.55
	II	23.60	16.47	19.80	59.03	6.51	18.92
	III	23.27	15.56	19.12	58.95	5.54	18.34
293.15	I	23.09	15.98	19.31	58.92	6.07	12.84
	II	22.86	15.73	19.08	58.90	5.99	18.45
	III	22.52	14.76	18.35	58.81	5.50	17.83
298.15	I	22.56	15.47	18.81	58.91	5.80	12.36
	II	22.33	15.20	18.56	58.89	5.72	18.21
	III	21.97	14.17	17.79	58.79	5.28	17.55
303.15	I	21.61	14.50	17.86	58.61	5.37	11.40
	II	21.36	14.22	17.60	58.59	5.30	17.53
	III	20.99	13.12	16.78	58.49	4.98	16.82
308.15	I	20.90	13.82	17.19	58.41	4.58	10.76
	II	20.64	13.53	16.92	58.38	4.49	17.13
	III	20.26	12.37	16.06	58.28	4.51	16.39
313.15	I	20.48	13.46	16.81	58.31	4.43	10.45
	II	20.21	13.16	16.54	58.28	4.35	17.04
	III	19.82	11.94	15.64	58.17	4.32	16.26
318.15	I	18.99	11.88	15.29	57.91	3.70	8.86
	II	18.70	11.56	15.00	57.88	3.73	15.81

TABLE S-I. Continued

T / K	Model	Model					
		L–L	D–G	Eyk	A–B	New	Ost
Butyl lactate (1) + 1,3-propanediol (2)							
318.15	III	18.28	10.25	14.03	57.77	4.97	14.98
323.15	I	19.98	14.28	17.04	55.21	10.71	11.89
	II	19.72	13.99	16.77	55.17	11.03	17.57
	III	19.19	12.61	15.72	55.05	13.08	16.75
NMP (1) + ethanol (2)							
288.15	I	29.72	21.25	22.46	44.87	24.20	19.47
	II	15.71	17.62	15.79	45.65	26.24	19.27
	III	29.21	20.83	21.93	44.92	23.84	20.60
293.15	I	29.18	21.04	21.77	45.13	24.39	19.94
	II	16.03	14.41	15.83	45.90	25.73	18.90
	III	28.68	20.63	21.25	45.18	24.03	20.75
298.15	I	27.11	19.77	20.01	45.64	23.92	20.63
	II	16.55	16.44	15.59	46.40	23.96	17.59
	III	26.64	19.37	19.61	45.69	23.72	20.33
303.15	I	27.61	19.94	20.29	45.24	40.21	20.01
	II	15.93	16.48	15.21	46.00	24.18	17.60
	III	27.13	19.54	19.89	45.28	23.32	20.05
308.15	I	24.53	17.26	16.99	46.58	26.57	22.78
	II	18.21	17.18	17.42	47.30	20.57	17.52
	III	24.10	17.04	16.66	46.62	26.44	21.23
313.15	I	27.65	19.99	20.47	45.64	23.37	20.23
	II	16.04	16.42	15.09	46.40	24.20	17.31
	III	27.17	19.58	20.06	45.69	23.29	19.38
318.15	I	28.36	19.93	20.74	45.79	34.96	19.61
	II	15.41	16.16	14.80	46.52	24.68	17.01
	III	27.89	19.53	20.33	45.83	22.74	18.15
323.15	I	35.37	24.40	26.68	44.21	23.12	19.01
	II	15.33	20.14	17.35	44.98	30.26	20.90
	III	34.82	23.94	26.11	44.26	22.75	20.29
NMP (1) + 1-propanol (2)							
288.15	I	17.85	12.78	13.11	50.16	14.61	15.95
	II	15.53	13.32	14.02	50.80	15.36	13.59
	III	17.61	12.68	13.01	50.18	14.73	12.53
293.15	I	17.07	12.35	12.54	50.71	15.87	17.00
	II	16.22	13.66	14.34	51.34	14.81	13.39
	III	16.83	12.29	12.48	50.73	15.98	13.56
298.15	I	16.43	12.46	12.66	51.34	17.31	18.72
	II	17.03	14.12	14.90	51.95	14.89	13.75
	III	16.21	12.40	12.60	51.36	15.50	14.58
303.15	I	16.89	12.68	12.87	51.83	18.52	20.09
	II	17.62	14.51	15.31	52.44	15.17	14.19

TABLE S-I. Continued

<i>T</i> / K	Model	Model					
		L–L	D–G	Eyk	A–B	New	Ost
NMP (1) + 1-propanol (2)							
303.15	III	16.67	12.62	12.82	51.85	18.83	15.11
308.15	I	16.79	14.20	14.33	52.37	20.36	21.60
	II	18.79	15.76	16.35	52.96	16.71	15.51
	III	16.60	14.14	14.27	52.39	20.66	16.52
313.15	I	16.64	13.68	13.84	52.62	21.02	22.16
	II	18.6	15.21	15.78	53.21	16.06	14.99
	III	16.45	13.61	13.78	52.64	21.32	15.44
318.15	I	15.59	11.86	12.14	53.50	24.23	24.83
	II	20.49	14.24	15.98	54.06	14.06	13.90
	III	15.42	11.81	12.09	53.52	24.50	17.47
323.15	I	14.87	13.55	13.39	54.78	28.89	28.53
	II	23.28	17.33	19.22	55.30	15.23	16.91
	III	14.76	13.65	13.34	54.80	29.13	21.48
NMP (1) + 1,3-propanediol (2)							
288.15	I	31.71	44.71	38.53	40.00	62.56	44.31
	II	24.19	41.34	33.98	40.33	64.31	46.46
	III	31.30	44.24	38.10	40.04	61.99	49.69
293.15	I	33.27	46.50	40.22	39.49	64.69	45.78
	II	25.85	43.15	35.70	39.82	66.37	47.88
	III	32.86	46.04	39.79	39.53	64.13	51.59
298.15	I	31.60	44.53	38.38	39.90	62.33	43.48
	II	24.45	41.34	34.05	40.21	64.04	45.53
	III	31.22	44.09	37.97	39.94	61.80	49.51
303.15	I	30.34	43.06	37.00	40.13	60.60	41.71
	II	23.48	40.02	32.86	40.43	62.31	43.71
	III	29.98	42.64	36.62	40.17	60.09	47.97
308.15	I	29.05	41.56	35.60	40.34	58.83	39.94
	II	22.50	38.69	31.66	40.62	60.54	41.87
	III	28.71	41.17	35.24	40.38	58.36	46.41
313.15	I	32.97	46.03	39.82	38.65	64.09	44.14
	II	26.52	43.16	35.91	38.93	65.66	46.00
	III	32.60	45.62	39.44	38.68	63.59	51.14
318.15	I	30.13	42.57	36.59	39.37	59.96	40.43
	II	24.94	39.93	33.26	39.63	61.63	42.26
	III	29.81	42.20	36.24	39.41	59.50	47.48
323.15	I	34.94	48.21	41.90	37.53	66.59	45.72
	II	28.85	45.50	38.20	37.79	68.10	47.48
	III	34.59	47.81	41.53	37.57	66.10	53.42
NMP (1) + glycerol (2)							
288.15	I	14.04	17.76	15.26	49.62	27.29	19.76
	II	14.15	17.99	15.43	49.59	27.60	19.82

TABLE S-I. Continued

<i>T</i> / K	Model	Model					
		L–L	D–G	Eyk	A–B	New	Ost
NMP (1) + glycerol (2)							
288.15	III	13.95	17.54	15.07	49.66	26.93	20.58
293.15	I	13.89	18.79	16.10	48.31	29.49	20.72
	II	14.03	19.08	16.37	48.27	29.89	20.80
	III	13.79	18.55	15.87	48.35	29.11	21.65
298.15	I	12.82	18.05	15.38	48.25	29.19	19.85
	II	12.99	18.40	15.71	48.20	29.69	19.95
	III	12.73	17.82	15.16	48.27	28.81	21.24
303.15	I	12.30	18.09	15.40	47.95	29.77	19.96
	II	12.50	18.50	15.78	47.90	30.36	20.12
	III	12.21	17.85	15.18	47.98	29.38	21.73
308.15	I	12.69	18.09	15.64	49.01	29.93	19.87
	II	13.03	18.57	15.99	48.95	30.63	20.05
	III	12.49	17.85	15.43	49.05	29.54	21.82
313.15	I	12.55	17.76	15.50	49.32	29.92	19.62
	II	12.92	18.29	15.89	49.26	30.74	19.84
	III	12.34	17.53	15.28	49.36	29.53	21.76
318.15	I	12.65	17.85	15.59	50.10	29.35	19.32
	II	13.05	18.34	16.01	50.03	30.26	19.53
	III	12.44	17.62	15.37	50.14	28.95	21.37
323.15	I	10.63	15.91	13.43	49.92	26.99	17.22
	II	11.04	16.51	13.88	49.84	28.00	17.45
	III	10.43	15.61	13.22	49.95	26.61	19.37
PEG200 (1) + 1,3-propanediol (2)							
288.15	I	37.93	36.43	37.50	60.85	34.18	38.38
	II	41.87	37.02	39.13	60.91	30.47	36.18
	III	37.95	36.45	37.52	60.85	34.21	36.44
293.15	I	37.69	36.12	37.21	60.77	33.77	38.13
	II	41.57	36.70	38.83	60.83	30.11	35.97
	III	37.71	36.14	37.23	60.78	33.79	36.08
298.15	I	37.90	36.30	37.40	60.91	33.90	38.36
	II	41.70	36.87	38.98	60.96	30.31	36.24
	III	37.92	36.32	37.42	60.91	33.93	36.24
303.15	I	38.36	36.80	37.88	61.06	34.46	38.92
	II	42.09	37.35	39.43	61.11	30.92	36.84
	III	38.38	36.82	37.90	61.06	34.48	36.75
308.15	I	37.73	36.04	37.18	60.88	33.52	38.23
	II	41.42	36.59	38.71	60.94	30.03	36.18
	III	37.75	36.06	37.20	60.89	33.55	35.92
313.15	I	39.51	38.06	39.08	61.55	35.87	40.30
	II	43.10	38.57	40.57	61.60	32.38	38.28
	III	39.53	38.08	39.10	61.55	35.89	38.04

TABLE S-I. Continued

T / K	Model	Model					
		L–L	D–G	Eyk	A–B	New	Ost
PEG200 (1) + 1,3-propanediol (2)							
318.15	I	36.33	34.38	35.62	60.37	31.49	36.68
	II	39.90	34.90	37.11	60.42	28.08	34.70
	III	36.35	34.40	35.64	60.37	31.52	34.12
323.15	I	37.55	35.75	36.92	60.94	33.08	38.14
	II	41.07	36.25	38.39	60.99	29.67	36.17
	III	37.57	35.77	36.94	60.94	33.10	35.56
328.15	I	36.43	34.46	35.71	60.52	31.55	36.94
	II	39.92	34.97	37.17	60.57	28.18	35.00
	III	36.45	34.48	35.73	60.52	31.57	34.19
333.15	I	34.12	31.83	33.23	59.67	28.48	34.45
	II	37.63	32.37	34.71	59.72	25.15	32.52
	III	34.14	31.86	33.25	59.67	28.51	31.41
PEG400 (1) + 1,3-propanediol (2)							
288.15	I	26.09	23.69	24.72	56.10	21.29	24.80
	II	29.85	24.21	26.24	56.17	18.94	23.14
	III	26.16	23.74	24.77	56.11	21.36	23.47
293.15	I	27.23	24.22	25.90	56.86	21.70	25.41
	II	30.91	24.80	27.45	56.92	19.01	23.60
	III	27.29	24.29	25.96	56.87	21.77	23.83
298.15	I	28.01	25.11	26.74	57.06	22.46	26.43
	II	31.64	25.69	28.27	57.12	19.83	24.44
	III	28.06	25.17	26.80	57.07	22.52	24.53
303.15	I	31.18	28.73	30.17	58.50	25.23	30.22
	II	34.73	29.28	31.65	58.56	22.50	28.24
	III	31.23	28.79	30.22	58.51	25.30	28.24
308.15	I	33.54	31.51	32.76	59.39	28.57	33.12
	II	37.00	32.01	34.19	59.44	25.26	31.18
	III	33.59	31.56	32.81	59.39	28.63	31.20
313.15	I	40.08	38.52	39.58	62.21	36.20	40.34
	II	43.64	38.95	41.00	62.25	32.59	38.26
	III	40.12	38.56	39.62	62.21	36.25	38.46
318.15	I	45.88	45.25	45.90	64.27	44.18	47.23
	II	49.37	45.62	47.26	64.31	40.55	45.16
	III	45.91	45.28	45.93	64.28	44.22	45.63
323.15	I	48.38	48.15	48.62	65.09	47.64	50.22
	II	51.81	48.50	49.96	65.13	44.01	48.17
	III	48.40	48.18	48.65	65.10	47.68	48.72
328.15	I	48.07	47.75	48.26	65.16	47.10	49.87
	II	51.49	48.10	49.59	65.20	43.50	47.84
	III	48.10	47.78	48.29	65.16	47.14	48.27
333.15	I	50.49	50.57	50.90	65.98	50.47	52.78

TABLE S-I. Continued

T / K	Model	Model					
		L-L	D-G	Eyk	A-B	New	Ost
PEG400 (1) + 1,3-propanediol (2)							
333.15	II	53.89	50.93	52.24	66.01	46.89	50.76
	III	50.52	50.60	50.93	65.98	50.51	51.28
Pyridine (1) + 1-propanol (2)							
288.15	I	21.11	19.27	9.45	57.46	68.66	51.44
	II	34.16	26.65	29.70	58.21	16.99	21.35
	III	20.98	19.42	9.52	57.47	68.84	47.60
293.15	I	21.30	19.07	9.43	57.54	68.99	51.58
	II	33.93	26.41	29.48	58.28	17.06	21.30
	III	21.16	19.22	9.49	57.55	69.17	47.57
298.15	I	22.24	17.82	9.01	57.20	68.11	50.67
	II	32.87	25.22	28.35	57.95	16.13	20.21
	III	22.11	17.97	9.08	57.21	68.30	46.43
303.15	I	22.79	17.21	9.46	57.11	68.07	50.41
	II	32.27	24.55	27.73	57.85	16.14	19.90
	III	22.66	17.36	9.52	57.13	68.26	46.02
308.15	I	31.96	9.75	7.88	54.01	56.76	40.87
	II	24.54	16.01	19.22	54.88	9.69	12.55
	III	31.77	9.81	7.71	54.02	57.01	35.37
313.15	I	34.23	7.59	8.30	53.42	55.76	39.74
	II	23.04	14.67	17.64	54.29	8.04	11.13
	III	34.04	7.68	8.12	53.44	56.02	33.93
318.15	I	39.38	5.71	11.96	52.06	50.34	35.13
	II	19.06	11.97	13.82	52.99	7.28	9.56
	III	39.17	5.82	11.74	52.09	50.63	28.66
323.15	I	17.46	24.99	12.74	59.82	80.44	59.94
	II	37.86	31.35	34.07	60.43	22.78	27.99
	III	17.36	25.09	12.79	59.83	80.56	55.35
Pyridine (1) + 1,2-propanediol (2)							
288.15	I	15.59	14.61	13.91	47.44	19.23	16.61
	II	15.75	13.82	14.25	48.05	16.41	13.74
	III	15.45	14.61	13.85	47.46	19.24	17.40
293.15	I	15.97	14.47	14.26	47.16	18.67	16.22
	II	15.31	13.58	14.03	47.77	17.22	13.94
	III	15.84	14.43	14.20	47.18	18.69	16.97
298.15	I	16.11	13.80	13.63	46.65	16.39	14.41
	II	14.29	12.50	12.52	47.26	17.25	13.52
	III	15.96	13.74	13.57	46.68	16.40	14.98
303.15	I	17.45	14.33	14.36	46.09	16.37	14.44
	II	12.82	12.58	12.59	46.70	18.73	14.71
	III	17.29	14.21	14.25	46.11	16.38	14.98
308.15	I	20.66	16.18	16.06	44.59	16.31	14.47

TABLE S-I. Continued

T / K	Model	Model					
		L–L	D–G	Eyk	A–B	New	Ost
Pyridine (1) + 1,2-propanediol (2)							
308.15	II	12.75	13.05	12.71	45.21	23.11	16.45
	III	20.43	16.05	15.94	44.61	16.33	14.99
313.15	I	24.68	19.18	19.29	42.99	16.57	14.12
	II	11.70	14.34	12.71	43.64	28.75	19.59
	III	24.42	18.96	19.08	43.02	16.55	15.78
318.15	I	28.06	22.66	22.78	41.54	18.73	15.91
	II	12.35	16.68	14.34	42.20	33.62	23.46
	III	27.77	22.34	22.49	41.58	18.64	17.65
323.15	I	38.32	34.87	34.19	37.62	31.26	24.24
	II	14.73	27.73	21.55	38.35	47.20	35.36
	III	37.97	34.47	33.82	37.66	30.78	28.93
Pyridine (1) + 1,3-propanediol (2)							
288.15	I	10.62	11.41	11.06	52.18	12.50	11.78
	II	20.12	11.45	14.84	52.71	13.42	11.13
	III	10.55	11.35	11.00	52.21	12.41	11.72
293.15	I	10.71	11.47	11.13	51.59	12.98	11.22
	II	18.96	10.80	13.70	52.12	14.47	11.41
	III	10.65	11.40	11.06	51.62	12.75	11.75
298.15	I	9.42	10.41	9.69	51.28	11.92	9.43
	II	17.08	9.06	11.66	51.80	14.06	10.27
	III	9.36	10.22	9.63	51.31	11.68	10.11
303.15	I	8.38	9.35	8.61	50.91	10.80	7.88
	II	15.71	7.25	9.38	51.42	14.26	9.19
	III	8.21	9.15	8.43	50.94	10.57	9.05
308.15	I	8.07	9.11	8.16	50.35	11.67	7.41
	II	13.75	6.62	7.82	50.87	15.07	9.31
	III	7.84	8.86	7.98	50.40	11.23	8.65
313.15	I	8.62	10.39	8.86	49.53	13.91	8.37
	II	11.44	7.34	6.48	50.05	16.84	10.65
	III	8.37	10.00	8.65	49.57	13.44	9.92
318.15	I	7.59	10.16	8.34	49.02	14.07	7.95
	II	9.76	6.74	5.37	49.54	18.08	10.18
	III	7.33	9.76	7.97	49.07	13.51	9.78
323.15	I	9.20	13.14	10.47	47.27	19.58	10.47
	II	5.54	8.59	5.50	47.80	23.75	13.85
	III	8.81	12.61	9.99	47.33	18.91	13.26
Pyridine (1) + glycerol (2)							
288.15	I	10.76	13.75	11.04	36.84	26.84	18.91
	II	10.34	11.65	9.65	37.07	26.20	19.43
	III	10.88	13.11	10.85	36.91	26.05	17.84
293.15	I	10.48	14.14	11.15	36.97	27.53	19.21

TABLE S-I. Continued

<i>T</i> / K	Model	Model					
		L–L	D–G	Eyk	A–B	New	Ost
Pyridine (1) + glycerol (2)							
293.15	II	10.07	11.97	9.61	37.23	26.77	19.63
	III	10.61	13.47	10.94	37.04	26.70	18.33
298.15	I	10.16	16.07	12.06	36.23	29.86	21.08
	II	9.75	13.77	10.45	36.44	28.99	21.41
	III	10.28	15.37	11.71	36.30	28.99	20.39
303.15	I	9.93	16.35	12.05	36.04	30.32	21.20
	II	9.43	14.14	10.54	36.25	29.36	21.46
	III	9.95	15.62	11.71	36.12	29.41	20.71
308.15	I	8.76	17.19	12.49	36.70	31.67	21.98
	II	7.99	15.03	10.10	36.93	30.63	22.18
	III	8.75	16.40	11.76	36.78	30.70	21.70
313.15	I	7.49	16.85	12.07	37.75	31.60	21.50
	II	6.81	14.78	9.80	37.98	30.52	21.64
	III	7.53	16.03	11.31	37.84	30.59	21.43
318.15	I	6.25	15.87	11.03	39.28	30.83	20.35
	II	5.42	13.88	8.87	39.49	29.71	20.44
	III	6.10	15.03	10.25	39.37	29.78	20.49
323.15	I	4.69	15.03	10.12	40.78	30.21	19.33
	II	3.65	13.13	8.07	40.98	29.08	19.38
	III	4.45	14.15	9.30	40.88	29.13	19.69
Benzene (1) + PEG200 (2)							
288.15	I	52.13	54.66	54.24	68.05	57.78	57.42
	II	58.48	55.56	56.76	68.15	51.75	53.71
	III	52.15	54.69	54.26	68.06	57.81	57.14
293.15	I	48.68	49.94	49.99	66.65	51.38	52.13
	II	54.69	51.08	52.57	66.77	46.37	48.93
	III	48.71	49.93	50.02	66.65	51.42	51.65
298.15	I	44.54	44.54	45.06	64.76	44.32	46.23
	II	50.24	45.92	47.71	64.90	40.27	43.48
	III	44.59	44.59	45.11	64.76	44.38	45.52
303.15	I	40.52	39.31	40.29	63.16	37.48	40.57
	II	45.96	40.91	43.01	63.33	34.28	38.22
	III	40.58	39.37	40.35	63.17	37.56	39.60
308.15	I	37.88	35.74	37.07	62.04	32.69	36.70
	II	42.96	37.45	39.75	62.22	30.17	34.69
	III	37.95	35.83	37.15	62.05	32.79	35.50
313.15	I	35.62	32.69	34.32	61.05	28.58	33.41
	II	40.36	34.46	36.94	61.24	26.66	31.72
	III	35.71	32.79	34.41	61.06	28.70	31.98
318.15	I	32.70	28.92	30.88	59.92	23.67	29.45
	II	37.17	30.78	33.48	60.12	22.29	28.03

TABLE S-I. Continued

T / K	Model	Model					
		L-L	D-G	Eyk	A-B	New	Ost
Benzene (1) + PEG200 (2)							
318.15	III	32.81	29.04	30.99	59.94	23.82	27.75
323.15	I	31.67	27.38	29.52	59.46	21.46	27.81
	II	35.77	29.20	31.99	59.65	20.47	26.62
	III	31.79	27.52	29.65	59.48	21.63	25.92
328.15	I	29.34	24.37	26.78	58.61	17.52	24.72
	II	33.17	26.22	29.18	58.79	16.94	23.74
	III	29.48	24.53	26.92	58.62	17.71	22.53
333.15	I	20.35	13.68	16.81	55.37	9.09	13.87
	II	24.22	15.82	19.41	55.59	8.67	13.14
	III	20.56	13.92	17.03	55.39	9.04	11.06
Benzene (1) + PEG400 (2)							
288.15	I	22.04	18.62	20.26	52.66	14.40	18.63
	II	27.90	20.86	23.44	52.93	13.31	17.21
	III	22.14	18.70	20.33	52.67	14.50	17.77
293.15	I	19.35	15.00	16.93	51.54	9.76	14.76
	II	24.91	17.34	20.20	51.82	9.16	13.59
	III	19.46	15.09	17.02	51.55	9.86	13.71
298.15	I	15.86	11.02	13.26	50.01	7.40	10.57
	II	21.18	13.46	16.27	50.30	7.33	9.63
	III	16.00	11.13	13.37	50.03	7.41	9.36
303.15	I	14.17	8.83	11.22	49.46	6.68	8.31
	II	19.17	11.22	14.16	49.75	6.67	7.59
	III	14.33	8.96	11.34	49.48	6.69	7.21
308.15	I	13.61	8.25	10.71	49.15	7.30	7.93
	II	18.12	10.53	13.50	49.42	7.29	7.70
	III	13.74	8.38	10.84	49.17	7.30	7.35
313.15	I	13.99	8.51	10.98	49.26	6.40	8.48
	II	18.00	10.63	13.58	49.52	6.46	8.21
	III	14.12	8.57	11.12	49.28	6.41	7.11
318.15	I	14.02	8.16	10.50	49.44	5.96	8.12
	II	17.88	9.96	12.95	49.69	6.06	7.92
	III	14.22	8.22	10.65	49.46	5.87	6.66
323.15	I	13.63	7.44	9.82	49.47	6.63	7.41
	II	17.19	9.11	12.14	49.70	6.46	7.28
	III	13.84	7.51	9.99	49.49	6.43	6.06
328.15	I	12.06	5.78	7.87	48.85	7.72	5.76
	II	15.37	7.34	10.12	49.08	7.00	5.69
	III	12.29	5.86	8.05	48.88	7.43	4.77
333.15	I	12.73	7.93	9.67	49.14	9.13	8.16
	II	15.51	9.32	11.24	49.35	8.84	8.18
	III	12.92	8.01	9.74	49.17	8.86	7.32

TABLE S-I. Continued

<i>T</i> / K	Model	Model					
		L–L	D–G	Eyk	A–B	New	Ost
Toluene (1) + PEG200 (2)							
288.15	I	29.73	27.03	28.83	64.72	23.14	28.36
	II	37.96	29.94	33.26	65.03	19.44	25.25
	III	29.82	27.13	28.93	64.73	23.26	26.95
293.15	I	21.01	17.44	19.29	61.46	13.02	18.25
	II	29.43	19.94	23.88	61.83	10.67	15.79
	III	21.13	17.56	19.40	61.47	13.17	16.93
298.15	I	16.90	12.79	15.02	59.75	8.87	13.38
	II	25.09	15.42	19.17	60.14	7.05	11.20
	III	17.04	12.93	15.15	59.77	8.96	11.76
303.15	I	14.06	9.21	11.74	58.43	8.01	9.66
	II	21.40	11.94	15.49	58.83	6.93	7.73
	III	14.21	9.37	11.89	58.45	7.95	7.87
308.15	I	12.23	6.78	9.54	57.90	6.74	7.17
	II	19.80	9.54	13.49	58.28	6.12	5.45
	III	12.41	6.96	9.70	57.92	6.69	5.32
313.15	I	12.16	5.35	8.44	57.83	6.03	5.69
	II	19.29	8.41	13.00	58.20	6.00	4.32
	III	12.34	5.50	8.63	57.85	5.88	4.26
318.15	I	10.51	2.69	6.46	57.21	8.23	3.17
	II	17.32	6.19	10.91	57.58	8.58	1.87
	III	10.70	2.86	6.66	57.24	7.96	2.55
323.15	I	11.37	3.38	7.23	57.46	8.09	4.00
	II	17.72	6.77	11.43	57.81	8.44	2.69
	III	11.57	3.60	7.44	57.49	7.83	2.18
328.15	I	7.84	2.31	3.22	56.18	13.08	1.88
	II	13.97	2.48	7.38	56.53	12.85	2.87
	III	8.07	2.06	3.46	56.20	12.76	5.20
333.15	I	5.57	16.62	11.46	51.04	31.80	16.01
	II	3.11	12.68	6.90	51.44	30.75	16.85
	III	5.24	16.25	11.12	51.08	31.35	21.05
Toluene (1) + PEG400 (2)							
288.15	I	22.21	20.74	21.56	52.68	20.73	20.97
	II	26.00	21.90	23.14	52.92	20.57	20.58
	III	22.24	20.77	21.59	52.69	20.67	20.45
293.15	I	20.15	18.25	19.24	51.10	19.51	18.40
	II	22.86	19.54	20.92	51.36	19.66	17.92
	III	20.17	18.27	19.27	51.12	19.36	17.64
298.15	I	15.45	13.41	14.02	49.27	19.87	14.12
	II	18.24	14.14	15.85	49.54	19.79	14.41
	III	15.50	13.35	14.06	49.29	19.61	14.66
303.15	I	10.73	10.97	9.82	48.69	19.53	12.19

TABLE S-I. Continued

<i>T</i> / K	Model	Model					
		L–L	D–G	Eyk	A–B	New	Ost
Toluene (1) + PEG400 (2)							
303.15	II	14.92	10.44	11.02	48.97	19.30	12.67
	III	10.80	10.86	9.80	48.71	19.27	13.07
308.15	I	9.60	9.05	7.81	48.42	17.65	10.11
	II	13.70	8.41	9.32	48.69	17.34	10.55
	III	9.75	8.90	7.74	48.45	17.38	11.07
	I	9.00	7.10	6.74	48.49	15.31	8.01
	II	12.84	6.77	8.60	48.75	14.95	8.40
	III	9.12	6.96	6.81	48.52	15.05	9.03
318.15	I	9.67	6.06	6.38	49.48	12.85	6.28
	II	13.74	5.82	8.56	49.73	12.42	6.41
	III	9.86	6.02	6.47	49.51	12.60	6.77
	I	10.11	7.16	7.17	49.31	13.03	7.33
	II	13.83	6.85	9.04	49.55	12.26	7.29
	III	10.22	7.11	7.21	49.34	12.79	7.66
328.15	I	9.05	7.89	7.34	48.72	15.98	8.07
	II	12.07	7.59	7.82	48.95	15.10	8.03
	III	9.17	7.83	7.29	48.74	15.72	9.53
	I	7.55	13.36	9.80	45.66	26.50	14.21
	II	8.91	11.59	8.83	45.90	25.51	14.45
	III	7.46	13.06	9.59	45.69	26.11	17.43