

Supporting information

Liquid-Liquid Equilibria for Benzene / Thiophene + Cyclohexane/ Hexadecane + Deep Eutectic Solvents: Data and Correlation

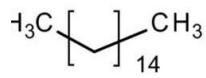
Hemayat Shekaari*, Mohammed Taghi Zafarani-Moattar, Behrouz Mohammadi

Department of Physical Chemistry, University of Tabriz, Tabriz, Iran

Corresponding author: Hemayatt@yahoo.com

Table S1. Chemicals used in this work

Component	IUPAC name	Structure	Provenance	CA S Reg. No.	Purity * (mass fractio n)	Purification method	Water content t ** (mass fractio n purity)
Choline chloride	2-Hydroxy-N,N,N-trimethylethanaminium chloride		Merck	67-48-1	≥ 99	Recrystallization	≤ 0.5 %
Monoethylene Glycol	ethane-1,2-diol		Shazand Petrochemical Co.	107 - 21-	≥ 99.8	NA	≤ 0.08 %
Diethylene Glycol	2,2'-Oxydi(ethan-1-ol)		Shazand Petrochemical al Co.	111 - 46-	≥ 99.8	NA	≤ 0.05 %
Triethylene Glycol	2,2'-[1,2-Ethanediylbis(oxy)]diethanol		Shazand Petrochemical al Co.	112 - 27-	> 99	NA	≤ 0.05 %
Monoethanolamine	2-Aminoethanol		Shazand Petrochemical al Co.	141 - 43-	≥ 99	NA	≤ 0.2 %
Diethanolamine	2,2'-Iminodiethanol		Shazand Petrochemical al Co.	111 - 42-	≥ 98.5	NA	≤ 0.15 %
Triethanolamine	2,2',2"-Nitrilotri(ethan-1-ol)		Shazand Petrochemical al Co.	102 - 71- -	≥ 99	NA	≤ 0.2 %
Benzene	cyclohexa-1,3,5-triene		Merck	71-43-2	≥ 99.5	NA	NA
Thiophene	Thiophene		Merck	- 02- 1	≥ 99	NA	NA
Cyclohexane	Cyclohexane		Merck	- 110 - 82- 7	≥ 99	NA	≤ 0.01 %

n-Hexadecane	n-Hexadecane		Merck	544	-	≥ 99	NA	NA
				76-	3			

* As stated by the supplier

** Metrohm Karl-Fischer Titrator (915 KF Ti-Touch) have been used to determination of water content.

Table S2. Experimental LLE data, in mass fraction, for the ternary systems including {n-hexadecane or cyclohexane (1) + benzene (2) + DES} at atmospheric pressure and $T = 298.15$ and 308.15 K. solute including distribution coefficient (β), and selectivity (S) values.^a

Aliphatic rich phase		DES rich phase			
x_1	x_2	x_1	x_2	β	S
n-Hexadecane					
DES 1 (298.15 K)					
0.9622	0.0378	0.0176	0.0368	0.9733	53.2425
0.9052	0.0948	0.0139	0.0365	0.3854	25.1733
0.8559	0.1441	0.0121	0.0363	0.2523	17.8686
0.6914	0.3086	0.0083	0.0359	0.1163	9.6499
0.6382	0.3618	0.0073	0.0357	0.0987	8.5727
0.4059	0.5941	0.0046	0.0351	0.0591	5.2456
0.2098	0.7902	0.0028	0.0344	0.0435	3.2808
DES 1 (308.15 K)					
0.9622	0.0378	0.0182	0.0368	0.9731	51.5063
0.9052	0.0948	0.0143	0.0365	0.3853	24.4741
0.8559	0.1441	0.0127	0.0364	0.2527	17.0646
0.6914	0.3086	0.0085	0.0359	0.1163	9.4255
0.6382	0.3618	0.0075	0.0358	0.0989	8.3639
0.4059	0.5941	0.0040	0.0349	0.0587	5.9955
0.2098	0.7902	0.0020	0.0339	0.0429	4.5260
DES 2 (298.15 K)					
0.9599	0.0401	0.0180	0.0368	0.9190	49.0626
0.9136	0.0864	0.0148	0.0366	0.4233	26.0571
0.8763	0.1237	0.0133	0.0365	0.2948	19.4672
0.7543	0.2457	0.0101	0.0361	0.1469	10.9533
0.6663	0.3337	0.0083	0.0359	0.1076	8.5990
0.4482	0.5518	0.0052	0.0352	0.0638	5.5394

0.2405	0.7595	0.0026	0.0343	0.0451	4.1950
DES 2 (308.15 K)					
0.9599	0.0401	0.0192	0.0369	0.9203	46.1170
0.9136	0.0864	0.0154	0.0366	0.4240	25.1038
0.8763	0.1237	0.0143	0.0365	0.2952	18.1508
0.7543	0.2457	0.0101	0.0361	0.1469	10.9533
0.6663	0.3337	0.0085	0.0359	0.1076	8.3990
0.4482	0.5518	0.0050	0.0352	0.0637	5.7492
0.2405	0.7595	0.0028	0.0344	0.0453	3.9117
DES 3 (298.15 K)					
0.9494	0.0506	0.0186	0.0369	0.7295	37.3016
0.9129	0.0871	0.0148	0.0366	0.4201	25.8401
0.8584	0.1416	0.0127	0.0364	0.2571	17.4076
0.7117	0.2883	0.0091	0.0360	0.1247	9.7282
0.6688	0.3312	0.0083	0.0359	0.1084	8.6984
0.3893	0.6107	0.0046	0.0351	0.0575	4.8935
0.2307	0.7693	0.0026	0.0343	0.0445	3.9730
DES 3 (308.15 K)					
0.9494	0.0506	0.0180	0.0368	0.7283	38.4567
0.9129	0.0871	0.0146	0.0366	0.4201	26.1860
0.8584	0.1416	0.0121	0.0363	0.2566	18.2278
0.7117	0.2883	0.0087	0.0359	0.1245	10.1502
0.6688	0.3312	0.0075	0.0358	0.1080	9.5756
0.3893	0.6107	0.0038	0.0348	0.0570	5.8752
0.2307	0.7693	0.0020	0.0339	0.0441	5.1108
DES 4 (298.15 K)					
0.9577	0.0423	0.0178	0.0368	0.8704	46.8661
0.9189	0.0811	0.0152	0.0367	0.4517	27.2427
0.8589	0.1411	0.0123	0.0363	0.2575	18.0090
0.6705	0.3295	0.0079	0.0358	0.1088	9.1863
0.5516	0.4484	0.0064	0.0355	0.0792	6.8720

0.3753	0.6247	0.0044	0.0350	0.0561	4.8132
0.2604	0.7396	0.0030	0.0345	0.0466	4.0685
DES 4 (308.15 K)					
0.9577	0.0423	0.0177	0.0253	0.5977	32.3339
0.9189	0.0811	0.0146	0.0250	0.3086	19.4507
0.8589	0.1411	0.0118	0.0248	0.1756	12.7481
0.6705	0.3295	0.0083	0.0243	0.0738	5.9667
0.5516	0.4484	0.0067	0.0240	0.0535	4.3903
0.3753	0.6247	0.0045	0.0235	0.0376	3.1039
0.2604	0.7396	0.0030	0.0229	0.0309	2.7124
DES 5 (298.15 K)					
0.9501	0.0499	0.0181	0.0296	0.5929	31.0825
0.8824	0.1176	0.0130	0.0292	0.2487	16.8384
0.8515	0.1485	0.0121	0.0291	0.1960	13.8473
0.7118	0.2882	0.0087	0.0286	0.0994	8.1274
0.5931	0.4069	0.0063	0.0282	0.0694	6.4959
0.3525	0.6475	0.0034	0.0273	0.0422	4.4178
0.2323	0.7677	0.0022	0.0268	0.0349	3.7149
DES 5 (308.15 K)					
0.9501	0.0499	0.0163	0.0223	0.4466	26.0053
0.8824	0.1176	0.0122	0.0219	0.1863	13.4654
0.8515	0.1485	0.0112	0.0218	0.1471	11.1506
0.7118	0.2882	0.0079	0.0214	0.0742	6.6884
0.5931	0.4069	0.0057	0.0209	0.0513	5.3170
0.3525	0.6475	0.0028	0.0199	0.0308	3.9180
0.2323	0.7677	0.0016	0.0191	0.0248	3.6466
DES 6 (298.15 K)					
0.9649	0.0351	0.0194	0.0154	0.4391	21.8638
0.9098	0.0902	0.0147	0.0150	0.1665	10.2962
0.8423	0.1577	0.0120	0.0148	0.0935	6.5750
0.7336	0.2664	0.0090	0.0143	0.0538	4.3668

0.5295	0.4705	0.0059	0.0138	0.0293	2.6285
0.3713	0.6287	0.0039	0.0132	0.0211	1.9837
0.2325	0.7675	0.0026	0.0126	0.0164	1.4893
DES 6 (308.15 K)					
0.9649	0.0351	0.0186	0.0111	0.3158	16.4089
0.9098	0.0902	0.0131	0.0106	0.1177	8.1549
0.8423	0.1577	0.0106	0.0103	0.0656	5.2134
0.7336	0.2664	0.0081	0.0099	0.0373	3.3956
0.5295	0.4705	0.0053	0.0094	0.0199	1.9872
0.3713	0.6287	0.0035	0.0088	0.0140	1.4694
0.2325	0.7675	0.0024	0.0082	0.0106	1.0483
DES 7 (298.15 K)					
0.9657	0.0343	0.0200	0.0442	1.2875	62.1715
0.9039	0.0961	0.0147	0.0439	0.4563	28.0826
0.8566	0.1434	0.0123	0.0436	0.3041	21.1483
0.7108	0.2892	0.0090	0.0433	0.1496	11.8728
0.6399	0.3601	0.0072	0.0429	0.1192	10.6426
0.3833	0.6167	0.0040	0.0422	0.0684	6.5761
0.1840	0.8160	0.0016	0.0408	0.0501	5.7715
DES 7 (308.15 K)					
0.9657	0.0343	0.0196	0.0398	1.1607	57.2695
0.9039	0.0961	0.0141	0.0394	0.4102	26.3518
0.8566	0.1434	0.0115	0.0392	0.2732	20.3386
0.7108	0.2892	0.0083	0.0388	0.1342	11.4319
0.6399	0.3601	0.0070	0.0386	0.1071	9.8465
0.3833	0.6167	0.0032	0.0375	0.0607	7.3083
0.1840	0.8160	0.0014	0.0363	0.0445	5.8747
DES 8 (298.15 K)					
0.9544	0.0456	0.0188	0.0441	0.9684	49.1109
0.9098	0.0902	0.0153	0.0439	0.4870	28.9983
0.8650	0.1350	0.0133	0.0437	0.3240	21.0628

0.7289	0.2711	0.0090	0.0433	0.1596	12.9876
0.5622	0.4378	0.0062	0.0427	0.0976	8.8851
0.4098	0.5902	0.0042	0.0423	0.0716	7.0099
0.2849	0.7151	0.0026	0.0416	0.0581	6.3871
DES 8 (308.15 K)					
0.9544	0.0456	0.0174	0.0397	0.8701	47.6899
0.9098	0.0902	0.0141	0.0394	0.4372	28.2681
0.8650	0.1350	0.0119	0.0393	0.2908	21.1295
0.7289	0.2711	0.0087	0.0388	0.1431	11.9368
0.5622	0.4378	0.0060	0.0384	0.0876	8.2539
0.4098	0.5902	0.0042	0.0379	0.0642	6.2934
0.2849	0.7151	0.0026	0.0372	0.0520	5.7229
DES 9 (298.15 K)					
0.9633	0.0367	0.0193	0.0325	0.8867	44.2179
0.8940	0.1060	0.0136	0.0321	0.3030	19.8607
0.8121	0.1879	0.0105	0.0318	0.1693	13.1050
0.7175	0.2825	0.0087	0.0315	0.1117	9.1926
0.5722	0.4278	0.0063	0.0311	0.0728	6.5660
0.3922	0.6078	0.0036	0.0304	0.0500	5.4895
0.2317	0.7683	0.0020	0.0295	0.0384	4.4864
DES 9 (308.15 K)					
0.9633	0.0367	0.0189	0.0275	0.7495	38.2250
0.8940	0.1060	0.0138	0.0271	0.2560	16.5752
0.8121	0.1879	0.0105	0.0267	0.1423	11.0435
0.7175	0.2825	0.0089	0.0266	0.0940	7.5820
0.5722	0.4278	0.0059	0.0260	0.0608	5.8606
0.3922	0.6078	0.0040	0.0255	0.0419	4.1482
0.2317	0.7683	0.0024	0.0247	0.0321	3.1307
DES 10 (298.15 K)					
0.9645	0.0355	0.0193	0.0253	0.7137	35.7394
0.9182	0.0818	0.0152	0.0251	0.3070	18.5926

0.8949	0.1051	0.0142	0.0250	0.2376	14.9905
0.7348	0.2652	0.0085	0.0243	0.0917	7.9366
0.5172	0.4828	0.0053	0.0237	0.0491	4.7558
0.3844	0.6156	0.0042	0.0234	0.0380	3.5112
0.2466	0.7534	0.0028	0.0228	0.0303	2.6931
DES 10 (308.15 K)					
0.9645	0.0355	0.0192	0.0225	0.6330	31.7350
0.9182	0.0818	0.0149	0.0222	0.2711	16.6494
0.8949	0.1051	0.0138	0.0221	0.2103	13.6617
0.7348	0.2652	0.0095	0.0216	0.0814	6.3176
0.5172	0.4828	0.0057	0.0209	0.0433	3.9077
0.3844	0.6156	0.0047	0.0206	0.0335	2.7153
0.2466	0.7534	0.0028	0.0199	0.0264	2.3554
DES 11 (298.15 K)					
0.9489	0.0511	0.0181	0.0282	0.5513	28.8826
0.9120	0.0880	0.0146	0.0279	0.3172	19.8203
0.8634	0.1366	0.0124	0.0277	0.2030	14.0966
0.7335	0.2665	0.0091	0.0273	0.1023	8.2547
0.6245	0.3755	0.0069	0.0269	0.0717	6.4684
0.4129	0.5871	0.0038	0.0261	0.0445	4.8779
0.1790	0.8210	0.0014	0.0247	0.0301	3.8812
DES 11 (308.15 K)					
0.9489	0.0511	0.0167	0.0231	0.4518	25.6563
0.9120	0.0880	0.0138	0.0228	0.2593	17.1578
0.8634	0.1366	0.0118	0.0226	0.1657	12.0999
0.7335	0.2665	0.0085	0.0222	0.0832	7.1893
0.6245	0.3755	0.0065	0.0218	0.0581	5.5684
0.4129	0.5871	0.0036	0.0210	0.0357	4.1473
0.1790	0.8210	0.0014	0.0196	0.0239	3.0937
DES 12 (298.15 K)					
0.9599	0.0401	0.0206	0.0219	0.5463	25.4631

0.9235	0.0765	0.0171	0.0216	0.2830	15.2918
0.8573	0.1427	0.0130	0.0213	0.1494	9.8617
0.7528	0.2472	0.0101	0.0209	0.0847	6.3409
0.4811	0.5189	0.0053	0.0201	0.0388	3.4964
0.4045	0.5955	0.0043	0.0198	0.0333	3.1001
0.2600	0.7400	0.0028	0.0192	0.0259	2.4381
DES 12 (308.15 K)					
0.9599	0.0401	0.0178	0.0160	0.3991	21.4887
0.9235	0.0765	0.0149	0.0157	0.2057	12.7414
0.8573	0.1427	0.0116	0.0154	0.1079	7.9796
0.7528	0.2472	0.0090	0.0151	0.0609	5.0694
0.4811	0.5189	0.0047	0.0142	0.0273	2.7757
0.4045	0.5955	0.0039	0.0140	0.0234	2.4042
0.2600	0.7400	0.0026	0.0133	0.0180	1.8252

Cyclohexane

DES 1 (298.15 K)					
0.8912	0.1088	0.0021	0.0030	0.0273	11.7930
0.8267	0.1733	0.0020	0.0029	0.0168	6.9622
0.7409	0.2591	0.0019	0.0028	0.0109	4.2352
0.5416	0.4584	0.0018	0.0028	0.0060	1.7780
0.3494	0.6506	0.0018	0.0028	0.0042	0.8431
0.2224	0.7776	0.0017	0.0027	0.0035	0.4574
0.1160	0.8840	0.0016	0.0026	0.0030	0.2141
DES 1 (308.15 K)					
0.8838	0.1162	0.0022	0.0028	0.0238	9.5467
0.8158	0.1842	0.0021	0.0027	0.0145	5.6276
0.7264	0.2736	0.0020	0.0026	0.0094	3.4127
0.5232	0.4768	0.0018	0.0024	0.0049	1.4387
0.3327	0.6673	0.0017	0.0022	0.0034	0.6586
0.2098	0.7902	0.0016	0.0021	0.0027	0.3525
0.1086	0.8914	0.0015	0.0020	0.0022	0.1621

DES 2 (298.15 K)					
0.8912	0.1088	0.0017	0.0020	0.0182	9.6547
0.8267	0.1733	0.0016	0.0019	0.0110	5.6799
0.7409	0.2591	0.0015	0.0018	0.0071	3.4432
0.5416	0.4584	0.0014	0.0017	0.0037	1.4599
0.3494	0.6506	0.0013	0.0016	0.0024	0.6439
0.2224	0.7776	0.0012	0.0015	0.0019	0.3478
0.1160	0.8840	0.0011	0.0014	0.0016	0.1621
DES 2 (308.15 K)					
0.9369	0.0631	0.0022	0.0013	0.0202	8.5314
0.8142	0.1858	0.0018	0.0010	0.0053	2.3664
0.7304	0.2696	0.0017	0.0009	0.0034	1.4829
0.5148	0.4852	0.0015	0.0008	0.0016	0.5406
0.3382	0.6618	0.0014	0.0006	0.0010	0.2367
0.1980	0.8020	0.0013	0.0005	0.0006	0.0942
0.1341	0.8659	0.0012	0.0004	0.0005	0.0538
DES 3 (298.15 K)					
0.9125	0.0875	0.0021	0.0016	0.0178	7.5832
0.7985	0.2015	0.0019	0.0014	0.0070	2.9348
0.6905	0.3095	0.0018	0.0013	0.0043	1.6350
0.5100	0.4900	0.0017	0.0013	0.0026	0.7887
0.3847	0.6153	0.0016	0.0012	0.0020	0.4688
0.1865	0.8135	0.0015	0.0011	0.0013	0.1677
0.0820	0.9180	0.0014	0.0010	0.0011	0.0644
DES 3 (308.15 K)					
0.9125	0.0875	0.0019	0.0014	0.0162	7.7238
0.7985	0.2015	0.0017	0.0013	0.0063	3.0025
0.6905	0.3095	0.0016	0.0012	0.0039	1.6725
0.5100	0.4900	0.0015	0.0011	0.0022	0.7613
0.3847	0.6153	0.0014	0.0010	0.0016	0.4505
0.1865	0.8135	0.0012	0.0008	0.0010	0.1461

0.0820	0.9180	0.0011	0.0007	0.0008	0.0552
DES 4 (298.15 K)					
0.9298	0.0702	0.0024	0.0012	0.0171	6.7190
0.8351	0.1649	0.0021	0.0011	0.0064	2.6034
0.7324	0.2676	0.0019	0.0009	0.0034	1.3174
0.4969	0.5031	0.0017	0.0008	0.0015	0.4574
0.3319	0.6681	0.0015	0.0006	0.0010	0.2071
0.2201	0.7799	0.0015	0.0006	0.0007	0.1101
0.1148	0.8852	0.0013	0.0004	0.0004	0.0354
DES 4 (308.15 K)					
0.9298	0.0702	0.0022	0.0011	0.0161	6.7615
0.8351	0.1649	0.0018	0.0008	0.0051	2.3439
0.7324	0.2676	0.0017	0.0008	0.0029	1.2672
0.4969	0.5031	0.0015	0.0006	0.0011	0.3853
0.3319	0.6681	0.0013	0.0004	0.0005	0.1354
0.2201	0.7799	0.0012	0.0003	0.0004	0.0654
0.1148	0.8852	0.0011	0.0002	0.0002	0.0240
DES 5 (298.15 K)					
0.8983	0.1017	0.0021	0.0013	0.0132	5.7515
0.7844	0.2156	0.0019	0.0012	0.0056	2.2904
0.7001	0.2999	0.0018	0.0011	0.0038	1.4409
0.5201	0.4799	0.0018	0.0011	0.0024	0.6982
0.4050	0.5950	0.0017	0.0011	0.0018	0.4299
0.2093	0.7907	0.0015	0.0009	0.0012	0.1594
0.1171	0.8829	0.0015	0.0008	0.0010	0.0776
DES 5 (308.15 K)					
0.8983	0.1017	0.0018	0.0011	0.0111	5.6884
0.7844	0.2156	0.0015	0.0009	0.0043	2.1906
0.7001	0.2999	0.0015	0.0008	0.0028	1.3659
0.5201	0.4799	0.0013	0.0006	0.0013	0.5317
0.4050	0.5950	0.0012	0.0006	0.0010	0.3155

0.2093	0.7907	0.0011	0.0005	0.0006	0.1145
0.1171	0.8829	0.0011	0.0004	0.0005	0.0527
DES 6 (298.15 K)					
0.9003	0.0997	0.0022	0.0013	0.0128	5.1893
0.8139	0.1861	0.0020	0.0011	0.0061	2.4911
0.7081	0.2919	0.0018	0.0010	0.0034	1.3105
0.5423	0.4577	0.0017	0.0009	0.0020	0.6485
0.3405	0.6595	0.0015	0.0008	0.0012	0.2631
0.2076	0.7924	0.0014	0.0006	0.0008	0.1214
0.1321	0.8679	0.0013	0.0005	0.0006	0.0581
DES 6 (308.15 K)					
0.9003	0.0997	0.0021	0.0012	0.0121	5.2653
0.8139	0.1861	0.0018	0.0010	0.0053	2.3619
0.7081	0.2919	0.0017	0.0009	0.0032	1.3279
0.5423	0.4577	0.0015	0.0007	0.0015	0.5778
0.3405	0.6595	0.0013	0.0005	0.0008	0.1970
0.2076	0.7924	0.0012	0.0004	0.0005	0.0911
0.1321	0.8679	0.0011	0.0004	0.0004	0.0470
DES 7 (298.15 K)					
0.8933	0.1067	0.0019	0.0060	0.0565	26.3453
0.8267	0.1733	0.0018	0.0060	0.0344	15.4564
0.7409	0.2591	0.0018	0.0060	0.0230	9.6696
0.5416	0.4584	0.0017	0.0059	0.0128	4.1289
0.3494	0.6506	0.0016	0.0058	0.0089	1.9419
0.2224	0.7776	0.0015	0.0057	0.0074	1.0727
0.1160	0.8840	0.0015	0.0057	0.0064	0.5118
DES 7 (308.15 K)					
0.8933	0.1067	0.0017	0.0045	0.0418	22.1972
0.8267	0.1733	0.0016	0.0044	0.0254	13.0428
0.7409	0.2591	0.0015	0.0043	0.0167	8.0782
0.5416	0.4584	0.0014	0.0042	0.0091	3.5890

0.3494	0.6506	0.0012	0.0040	0.0061	1.7417
0.2224	0.7776	0.0011	0.0039	0.0050	0.9718
0.1160	0.8840	0.0011	0.0038	0.0043	0.4691
DES 8 (298.15 K)					
0.9095	0.0905	0.0019	0.0046	0.0509	24.1868
0.8205	0.1795	0.0018	0.0045	0.0253	11.7764
0.7575	0.2425	0.0017	0.0045	0.0184	8.2831
0.5470	0.4530	0.0015	0.0043	0.0095	3.4119
0.3143	0.6857	0.0014	0.0042	0.0061	1.3924
0.2293	0.7707	0.0013	0.0040	0.0052	0.9246
0.1031	0.8969	0.0011	0.0039	0.0043	0.3905
DES 8 (308.15 K)					
0.9095	0.0905	0.0017	0.0038	0.0415	22.4189
0.8205	0.1795	0.0015	0.0036	0.0201	10.7958
0.7575	0.2425	0.0015	0.0035	0.0146	7.6146
0.5470	0.4530	0.0012	0.0033	0.0072	3.2177
0.3143	0.6857	0.0011	0.0031	0.0046	1.3357
0.2293	0.7707	0.0010	0.0030	0.0039	0.8913
0.1031	0.8969	0.0008	0.0028	0.0031	0.3777
DES 9 (298.15 K)					
0.9030	0.0970	0.0020	0.0047	0.0482	21.8720
0.8015	0.1985	0.0018	0.0045	0.0228	9.9668
0.6992	0.3008	0.0018	0.0045	0.0151	5.9899
0.5206	0.4794	0.0017	0.0045	0.0093	2.8802
0.3176	0.6824	0.0015	0.0043	0.0063	1.3152
0.2104	0.7896	0.0015	0.0043	0.0054	0.7798
0.1055	0.8945	0.0014	0.0042	0.0047	0.3582
DES 9 (308.15 K)					
0.9030	0.0970	0.0017	0.0038	0.0387	20.7673
0.8015	0.1985	0.0015	0.0036	0.0182	9.5353
0.6992	0.3008	0.0015	0.0035	0.0118	5.6675

0.5206	0.4794	0.0013	0.0033	0.0070	2.7823
0.3176	0.6824	0.0011	0.0032	0.0047	1.2944
0.2104	0.7896	0.0011	0.0031	0.0040	0.7766
0.1055	0.8945	0.0010	0.0030	0.0033	0.3532
DES 10 (298.15 K)					
0.9184	0.0816	0.0019	0.0032	0.0391	18.7622
0.8238	0.1762	0.0018	0.0031	0.0177	8.2833
0.7242	0.2758	0.0017	0.0030	0.0110	4.7542
0.5560	0.4440	0.0015	0.0029	0.0065	2.3777
0.3320	0.6680	0.0014	0.0028	0.0041	0.9979
0.2095	0.7905	0.0013	0.0026	0.0033	0.5346
0.1317	0.8683	0.0012	0.0026	0.0029	0.3164
DES 10 (308.15 K)					
0.9184	0.0816	0.0015	0.0022	0.0269	16.1660
0.8238	0.1762	0.0014	0.0021	0.0117	6.9802
0.7242	0.2758	0.0013	0.0019	0.0069	3.8655
0.5560	0.4440	0.0011	0.0018	0.0040	1.9342
0.3320	0.6680	0.0011	0.0017	0.0025	0.7899
0.2095	0.7905	0.0010	0.0016	0.0020	0.4158
0.1317	0.8683	0.0009	0.0014	0.0016	0.2345
DES 11 (298.15 K)					
0.9081	0.0919	0.0021	0.0026	0.0285	12.5297
0.7888	0.2112	0.0018	0.0024	0.0114	4.8993
0.7030	0.2970	0.0018	0.0024	0.0081	3.2402
0.4937	0.5063	0.0016	0.0023	0.0045	1.3763
0.4048	0.5952	0.0015	0.0022	0.0037	0.9766
0.1988	0.8012	0.0014	0.0021	0.0026	0.3705
0.0874	0.9126	0.0012	0.0018	0.0020	0.1443
DES 11 (308.15 K)					
0.9081	0.0919	0.0017	0.0016	0.0177	9.5646
0.7888	0.2112	0.0015	0.0014	0.0067	3.6425

0.7030	0.2970	0.0014	0.0013	0.0045	2.3151
0.4937	0.5063	0.0012	0.0011	0.0022	0.9038
0.4048	0.5952	0.0011	0.0011	0.0018	0.6305
0.1988	0.8012	0.0010	0.0009	0.0011	0.2124
0.0874	0.9126	0.0009	0.0007	0.0008	0.0740
DES 12 (298.15 K)					
0.9288	0.0712	0.0022	0.0016	0.0228	9.5681
0.8360	0.1640	0.0019	0.0014	0.0086	3.7758
0.7216	0.2784	0.0018	0.0013	0.0048	1.9830
0.5367	0.4633	0.0015	0.0011	0.0024	0.8584
0.2935	0.7065	0.0013	0.0008	0.0012	0.2718
0.1980	0.8020	0.0012	0.0008	0.0010	0.1573
0.1096	0.8904	0.0011	0.0007	0.0008	0.0761
DES 12 (308.15 K)					
0.9288	0.0712	0.0017	0.0009	0.0129	7.1348
0.8360	0.1640	0.0015	0.0007	0.0043	2.4859
0.7216	0.2784	0.0013	0.0005	0.0018	0.9892
0.5367	0.4633	0.0011	0.0004	0.0008	0.3579
0.2935	0.7065	0.0011	0.0003	0.0004	0.1100
0.1980	0.8020	0.0010	0.0001	0.0002	0.0352
0.1096	0.8904	0.0009	0.0000	0.0000	0.0000

^a Standard uncertainties u are $u(T) = 0.1$ K, $u(p) = 0.02$ bar, $u(x) = 0.0005$.

Table S3. Experimental LLE data, in mass fraction, for the ternary systems including {n-hexadecane or cyclohexane (1) + thiophene (2) + DES (3)} at atmospheric pressure and $T = 298.15$ and 308.15 K. solute including distribution coefficient (β), and selectivity (S) values.^a

Aliphatic rich phase		DES rich phase			
x_1	x_2	x_1	x_2	β	S
n-Hexadecane					
DES 1 (298.15 K)					
0.9588	0.0412	0.0176	0.0426	1.0342	56.2416
0.9131	0.0869	0.0147	0.0424	0.4882	30.3693
0.8521	0.1479	0.0125	0.0422	0.2856	19.4530
0.7246	0.2754	0.0105	0.0420	0.1524	10.4867
0.5314	0.4686	0.0074	0.0415	0.0886	6.3962
0.3907	0.6093	0.0064	0.0413	0.0678	4.1603
0.2403	0.7597	0.0048	0.0409	0.0539	2.7076
DES 1 (308.15 K)					
0.9588	0.0412	0.0162	0.0353	0.8552	50.5958
0.9131	0.0869	0.0133	0.0350	0.4031	27.7630
0.8521	0.1479	0.0117	0.0348	0.2355	17.1747
0.7246	0.2754	0.0089	0.0345	0.1253	10.1764
0.5314	0.4686	0.0071	0.0342	0.0729	5.4251
0.3907	0.6093	0.0060	0.0340	0.0558	3.6581
0.2403	0.7597	0.0042	0.0335	0.0441	2.5397
DES 2 (298.15 K)					
0.9711	0.0289	0.0165	0.0237	0.8213	48.2734
0.9232	0.0768	0.0136	0.0235	0.3055	20.7519
0.8646	0.1354	0.0114	0.0233	0.1719	12.9999
0.7175	0.2825	0.0091	0.0229	0.0812	6.4202
0.5447	0.4553	0.0073	0.0227	0.0498	3.7133
0.4151	0.5849	0.0059	0.0224	0.0383	2.6824

0.2199	0.7801	0.0047	0.0221	0.0283	1.3108
DES 2 (308.15 K)					
0.9711	0.0289	0.0165	0.0216	0.7468	43.9374
0.9232	0.0768	0.0132	0.0213	0.2775	19.4285
0.8646	0.1354	0.0116	0.0211	0.1560	11.6071
0.7175	0.2825	0.0089	0.0208	0.0736	5.9515
0.5447	0.4553	0.0071	0.0205	0.0449	3.4444
0.4151	0.5849	0.0061	0.0202	0.0346	2.3479
0.2199	0.7801	0.0047	0.0199	0.0255	1.1835
DES 3 (298.15 K)					
0.9679	0.0321	0.0183	0.0231	0.7197	38.1262
0.9155	0.0845	0.0151	0.0229	0.2715	16.4084
0.8711	0.1289	0.0136	0.0228	0.1765	11.3158
0.7712	0.2288	0.0116	0.0226	0.0986	6.5404
0.6464	0.3536	0.0095	0.0223	0.0630	4.3039
0.3523	0.6477	0.0063	0.0218	0.0336	1.8725
0.2315	0.7685	0.0049	0.0214	0.0279	1.3052
DES 3 (308.15 K)					
0.9679	0.0321	0.0165	0.0201	0.6268	36.7729
0.9155	0.0845	0.0136	0.0199	0.2353	15.8731
0.8711	0.1289	0.0128	0.0198	0.1537	10.4731
0.7712	0.2288	0.0106	0.0196	0.0858	6.2217
0.6464	0.3536	0.0089	0.0194	0.0547	3.9895
0.3523	0.6477	0.0067	0.0189	0.0293	1.5370
0.2315	0.7685	0.0053	0.0187	0.0243	1.0555
DES 4 (298.15 K)					
0.9575	0.0425	0.0163	0.0252	0.5918	34.6853
0.9183	0.0817	0.0148	0.0250	0.3064	19.0463
0.8618	0.1382	0.0132	0.0249	0.1803	11.7643
0.7348	0.2652	0.0103	0.0246	0.0927	6.6399
0.5789	0.4211	0.0087	0.0243	0.0577	3.8466

0.4160	0.5840	0.0073	0.0241	0.0413	2.3498
0.2201	0.7799	0.0053	0.0237	0.0304	1.2533
DES 4 (308.15 K)					
0.9575	0.0425	0.0153	0.0215	0.5060	31.5913
0.9183	0.0817	0.0136	0.0213	0.2609	17.6442
0.8618	0.1382	0.0122	0.0212	0.1533	10.8243
0.7348	0.2652	0.0101	0.0209	0.0789	5.7693
0.5789	0.4211	0.0081	0.0207	0.0490	3.5107
0.4160	0.5840	0.0065	0.0204	0.0349	2.2293
0.2201	0.7799	0.0051	0.0200	0.0257	1.1016
DES 5 (298.15 K)					
0.9641	0.0359	0.0181	0.0217	0.6036	32.2090
0.9053	0.0947	0.0148	0.0214	0.2264	13.8935
0.8640	0.1360	0.0138	0.0214	0.1573	9.8680
0.7139	0.2861	0.0106	0.0211	0.0736	4.9396
0.6236	0.3764	0.0091	0.0208	0.0552	3.7973
0.4203	0.5797	0.0073	0.0205	0.0354	2.0380
0.2503	0.7497	0.0055	0.0201	0.0268	1.2143
DES 5 (308.15 K)					
0.9641	0.0359	0.0165	0.0180	0.5006	29.2818
0.9053	0.0947	0.0132	0.0177	0.1873	12.8745
0.8640	0.1360	0.0120	0.0176	0.1295	9.3301
0.7139	0.2861	0.0096	0.0173	0.0606	4.4873
0.6236	0.3764	0.0083	0.0171	0.0455	3.4326
0.4203	0.5797	0.0065	0.0168	0.0290	1.8725
0.2503	0.7497	0.0055	0.0165	0.0220	0.9990
DES 6 (298.15 K)					
0.8854	0.1146	0.0085	0.0255	0.2222	23.1459
0.7895	0.2105	0.0076	0.0252	0.1199	12.4563
0.6846	0.3154	0.0067	0.0250	0.0792	8.0955
0.5089	0.4911	0.0056	0.0246	0.0502	4.5576

0.2830	0.7170	0.0042	0.0241	0.0335	2.2606
0.2128	0.7872	0.0036	0.0237	0.0302	1.7831
0.1098	0.8902	0.0027	0.0232	0.0260	1.0585
DES 6 (308.15 K)					
0.9553	0.0447	0.0171	0.0159	0.3566	19.9810
0.9122	0.0878	0.0147	0.0157	0.1791	11.1018
0.8574	0.1426	0.0130	0.0156	0.1094	7.2353
0.7416	0.2584	0.0106	0.0153	0.0593	4.1450
0.5222	0.4778	0.0081	0.0149	0.0312	2.0216
0.4281	0.5719	0.0071	0.0147	0.0257	1.5544
0.2546	0.7454	0.0053	0.0144	0.0193	0.9228
DES 7 (298.15 K)					
0.9553	0.0447	0.0149	0.0468	1.0477	67.1647
0.9122	0.0878	0.0129	0.0466	0.5307	37.4482
0.8574	0.1426	0.0115	0.0465	0.3260	24.2132
0.7416	0.2584	0.0098	0.0463	0.1792	13.6192
0.5222	0.4778	0.0076	0.0460	0.0963	6.6372
0.4281	0.5719	0.0066	0.0458	0.0801	5.2099
0.2546	0.7454	0.0054	0.0455	0.0611	2.8871
DES 7 (308.15 K)					
0.9641	0.0359	0.0172	0.0411	1.0450	64.0774
0.9282	0.0718	0.0151	0.0409	0.5203	35.1399
0.8742	0.1258	0.0129	0.0408	0.3240	21.9614
0.7443	0.2557	0.0105	0.0405	0.1585	11.2071
0.5932	0.4068	0.0085	0.0403	0.0990	6.8688
0.4059	0.5941	0.0064	0.0399	0.0671	4.2792
0.2548	0.7452	0.0052	0.0396	0.0531	2.6166
DES 8 (298.15 K)					
0.9584	0.0416	0.0168	0.0397	0.9527	54.2659
0.9189	0.0811	0.0145	0.0395	0.4868	30.9200
0.8584	0.1416	0.0127	0.0393	0.2776	18.7756

0.7431	0.2569	0.0101	0.0390	0.1518	11.1421
0.5712	0.4288	0.0083	0.0388	0.0905	6.1963
0.4451	0.5549	0.0074	0.0386	0.0696	4.2118
0.2244	0.7756	0.0050	0.0381	0.0491	2.2151
DES 8 (308.15 K)					
0.9584	0.0416	0.0168	0.0360	0.8656	49.3770
0.9189	0.0811	0.0142	0.0358	0.4412	28.4530
0.8584	0.1416	0.0121	0.0356	0.2515	17.8690
0.7431	0.2569	0.0099	0.0354	0.1377	10.3204
0.5712	0.4288	0.0073	0.0350	0.0816	6.3446
0.4451	0.5549	0.0064	0.0348	0.0627	4.3901
0.2244	0.7756	0.0044	0.0343	0.0442	2.2702
DES 9 (298.15 K)					
0.9668	0.0332	0.0185	0.0289	0.8710	45.4952
0.9046	0.0954	0.0150	0.0286	0.3002	18.1153
0.8605	0.1395	0.0136	0.0285	0.2044	12.9153
0.6854	0.3146	0.0105	0.0282	0.0896	5.8629
0.6462	0.3538	0.0099	0.0281	0.0795	5.1967
0.4036	0.5964	0.0075	0.0278	0.0466	2.5019
0.2096	0.7904	0.0055	0.0273	0.0346	1.3066
DES 9 (308.15 K)					
0.9668	0.0332	0.0171	0.0252	0.7591	42.8753
0.9046	0.0954	0.0134	0.0249	0.2611	17.6275
0.8605	0.1395	0.0126	0.0248	0.1781	12.1490
0.6854	0.3146	0.0089	0.0244	0.0775	5.9787
0.6462	0.3538	0.0085	0.0243	0.0687	5.2298
0.4036	0.5964	0.0055	0.0237	0.0398	2.8979
0.2096	0.7904	0.0042	0.0234	0.0296	1.4913
DES 10 (298.15 K)					
0.9591	0.0409	0.0177	0.0289	0.7055	38.1673
0.9141	0.0859	0.0156	0.0287	0.3342	19.6142

0.8589	0.1411	0.0138	0.0286	0.2026	12.5970
0.7289	0.2711	0.0115	0.0283	0.1045	6.6452
0.5302	0.4698	0.0089	0.0280	0.0596	3.5494
0.3822	0.6178	0.0073	0.0277	0.0449	2.3426
0.2446	0.7554	0.0063	0.0275	0.0364	1.4070
DES 10 (308.15 K)					
0.8943	0.1057	0.0086	0.0375	0.3547	36.8810
0.7936	0.2064	0.0071	0.0371	0.1798	20.0938
0.6874	0.3126	0.0062	0.0368	0.1178	13.0639
0.4926	0.5074	0.0049	0.0364	0.0717	7.2046
0.2895	0.7105	0.0034	0.0356	0.0502	4.2702
0.1826	0.8174	0.0026	0.0351	0.0429	3.0154
0.1047	0.8953	0.0021	0.0347	0.0387	1.9306
DES 11 (298.15 K)					
0.8976	0.1024	0.0095	0.0327	0.3192	30.1603
0.7842	0.2158	0.0076	0.0322	0.1494	15.4158
0.7143	0.2857	0.0072	0.0321	0.1125	11.1580
0.5180	0.4820	0.0058	0.0317	0.0658	5.8738
0.3822	0.6178	0.0051	0.0314	0.0509	3.8141
0.2016	0.7984	0.0036	0.0307	0.0385	2.1566
0.0853	0.9147	0.0026	0.0301	0.0329	1.0794
DES 11 (308.15 K)					
0.8976	0.1024	0.0087	0.0285	0.2784	28.7262
0.7842	0.2158	0.0069	0.0280	0.1300	14.7714
0.7143	0.2857	0.0064	0.0279	0.0976	10.8981
0.5180	0.4820	0.0050	0.0274	0.0569	5.8900
0.3822	0.6178	0.0039	0.0269	0.0436	4.2681
0.2016	0.7984	0.0028	0.0262	0.0329	2.3667
0.0853	0.9147	0.0018	0.0254	0.0277	1.3139
DES 12 (298.15 K)					
0.9124	0.0876	0.0098	0.0257	0.2939	27.3665

0.8026	0.1974	0.0079	0.0253	0.1283	13.0304
0.7234	0.2766	0.0074	0.0252	0.0911	8.9018
0.5129	0.4871	0.0060	0.0248	0.0508	4.3466
0.3456	0.6544	0.0047	0.0243	0.0371	2.7282
0.2160	0.7840	0.0039	0.0239	0.0305	1.6888
0.0963	0.9037	0.0028	0.0232	0.0257	0.8846
DES 12 (308.15 K)					
0.9124	0.0876	0.0088	0.0205	0.2344	24.3037
0.8026	0.1974	0.0072	0.0201	0.1020	11.3690
0.7234	0.2766	0.0064	0.0199	0.0719	8.1308
0.5129	0.4871	0.0052	0.0195	0.0400	3.9449
0.3456	0.6544	0.0039	0.0189	0.0289	2.5602
0.2160	0.7840	0.0029	0.0183	0.0234	1.7399
0.0963	0.9037	0.0022	0.0178	0.0197	0.8603

Cyclohexane

0.8705	0.1295	0.0027	0.0062	0.0477	15.3635
0.7734	0.2266	0.0026	0.0061	0.0269	8.0017
0.6821	0.3179	0.0025	0.0060	0.0189	5.1642
0.5018	0.4982	0.0024	0.0059	0.0119	2.4910
0.2608	0.7392	0.0022	0.0058	0.0078	0.9240
0.1509	0.8491	0.0021	0.0057	0.0067	0.4797
0.0873	0.9127	0.0020	0.0056	0.0061	0.2664
DES 1 (308.15 K)					
0.8705	0.1295	0.0022	0.0048	0.0368	14.5483
0.7734	0.2266	0.0021	0.0047	0.0206	7.5873
0.6821	0.3179	0.0020	0.0046	0.0144	4.9036
0.5018	0.4982	0.0019	0.0045	0.0090	2.3687
0.2608	0.7392	0.0018	0.0044	0.0059	0.8546
0.1509	0.8491	0.0017	0.0042	0.0050	0.4438
0.0873	0.9127	0.0016	0.0041	0.0045	0.2466

DES 2 (298.15 K)					
0.8935	0.1065	0.0031	0.0054	0.0511	14.7423
0.7946	0.2054	0.0029	0.0053	0.0259	7.0887
0.6843	0.3157	0.0027	0.0052	0.0164	4.1513
0.5562	0.4438	0.0026	0.0051	0.0115	2.4562
0.2836	0.7164	0.0023	0.0049	0.0068	0.8348
0.1934	0.8066	0.0022	0.0048	0.0059	0.5189
0.1125	0.8875	0.0021	0.0047	0.0053	0.2818
DES 2 (308.15 K)					
0.8935	0.1065	0.0025	0.0040	0.0377	13.4808
0.7946	0.2054	0.0023	0.0039	0.0187	6.4761
0.6843	0.3157	0.0021	0.0037	0.0116	3.7864
0.5562	0.4438	0.0019	0.0035	0.0078	2.2877
0.2836	0.7164	0.0017	0.0032	0.0045	0.7558
0.1934	0.8066	0.0016	0.0031	0.0039	0.4682
0.1125	0.8875	0.0015	0.0030	0.0034	0.2531
DES 3 (298.15 K)					
0.8913	0.1087	0.0025	0.0040	0.0370	13.1754
0.7725	0.2275	0.0024	0.0039	0.0173	5.5680
0.6814	0.3186	0.0023	0.0039	0.0121	3.5803
0.5318	0.4682	0.0022	0.0038	0.0080	1.9420
0.3807	0.6193	0.0021	0.0037	0.0059	1.0738
0.1703	0.8297	0.0020	0.0036	0.0043	0.3665
0.0863	0.9137	0.0019	0.0035	0.0038	0.1724
DES 3 (308.15 K)					
0.8913	0.1087	0.0022	0.0028	0.0254	10.2920
0.7725	0.2275	0.0021	0.0027	0.0117	4.3146
0.6814	0.3186	0.0020	0.0026	0.0081	2.7491
0.5318	0.4682	0.0019	0.0025	0.0053	1.4755
0.3807	0.6193	0.0018	0.0024	0.0038	0.8060
0.1703	0.8297	0.0017	0.0022	0.0027	0.2711

0.0863	0.9137	0.0016	0.0021	0.0023	0.1254
DES 4 (298.15 K)					
0.9064	0.0936	0.0031	0.0034	0.0368	10.7686
0.8341	0.1659	0.0028	0.0032	0.0196	5.8245
0.7035	0.2965	0.0025	0.0030	0.0102	2.8634
0.5523	0.4477	0.0023	0.0029	0.0064	1.5288
0.3296	0.6704	0.0020	0.0026	0.0038	0.6320
0.2147	0.7853	0.0019	0.0025	0.0031	0.3552
0.1162	0.8838	0.0017	0.0022	0.0025	0.1737
DES 4 (308.15 K)					
0.9064	0.0936	0.0026	0.0021	0.0224	7.8048
0.8341	0.1659	0.0024	0.0019	0.0117	4.0545
0.7035	0.2965	0.0022	0.0018	0.0059	1.8997
0.5523	0.4477	0.0020	0.0016	0.0035	0.9689
0.3296	0.6704	0.0018	0.0014	0.0020	0.3715
0.2147	0.7853	0.0017	0.0012	0.0016	0.2003
0.1162	0.8838	0.0016	0.0011	0.0013	0.0924
DES 5 (298.15 K)					
0.8714	0.1286	0.0026	0.0031	0.0241	8.0674
0.8126	0.1874	0.0025	0.0030	0.0161	5.2330
0.6379	0.3621	0.0023	0.0029	0.0079	2.1832
0.5018	0.4982	0.0022	0.0028	0.0055	1.2643
0.3983	0.6017	0.0021	0.0027	0.0044	0.8411
0.1909	0.8091	0.0019	0.0025	0.0031	0.3065
0.0958	0.9042	0.0018	0.0024	0.0026	0.1389
DES 5 (308.15 K)					
0.8714	0.1286	0.0023	0.0024	0.0183	6.9243
0.8126	0.1874	0.0022	0.0023	0.0121	4.4572
0.6379	0.3621	0.0020	0.0021	0.0057	1.8240
0.5018	0.4982	0.0019	0.0020	0.0040	1.0434
0.3983	0.6017	0.0018	0.0019	0.0031	0.6840

0.1909	0.8091	0.0016	0.0016	0.0020	0.2396
0.0958	0.9042	0.0015	0.0015	0.0017	0.1056
DES 6 (298.15 K)					
0.9146	0.0854	0.0030	0.0022	0.0255	7.7884
0.8294	0.1706	0.0027	0.0020	0.0116	3.5490
0.7427	0.2573	0.0025	0.0018	0.0071	2.0980
0.5732	0.4268	0.0023	0.0017	0.0039	0.9636
0.3091	0.6909	0.0020	0.0014	0.0020	0.3066
0.1982	0.8018	0.0019	0.0013	0.0016	0.1650
0.1175	0.8825	0.0018	0.0012	0.0013	0.0858
DES 6 (308.15 K)					
0.9146	0.0854	0.0027	0.0017	0.0196	6.6280
0.8294	0.1706	0.0024	0.0014	0.0084	2.9077
0.7427	0.2573	0.0022	0.0013	0.0049	1.6550
0.5732	0.4268	0.0020	0.0011	0.0025	0.7190
0.3091	0.6909	0.0017	0.0007	0.0011	0.1963
0.1982	0.8018	0.0016	0.0006	0.0008	0.0965
0.1175	0.8825	0.0015	0.0005	0.0006	0.0440
DES 7 (298.15 K)					
0.8908	0.1092	0.0026	0.0091	0.0833	28.5372
0.7805	0.2195	0.0024	0.0089	0.0407	13.2386
0.6725	0.3275	0.0023	0.0089	0.0270	7.9015
0.4818	0.5182	0.0021	0.0087	0.0167	3.8378
0.3126	0.6874	0.0020	0.0086	0.0125	1.9488
0.1733	0.8267	0.0018	0.0084	0.0101	0.9736
0.0822	0.9178	0.0017	0.0082	0.0090	0.4344
DES 7 (308.15 K)					
0.8908	0.1092	0.0023	0.0074	0.0673	26.0697
0.7805	0.2195	0.0021	0.0072	0.0327	12.1378
0.6725	0.3275	0.0020	0.0071	0.0216	7.2597
0.4818	0.5182	0.0018	0.0069	0.0132	3.5434

0.3126	0.6874	0.0017	0.0067	0.0098	1.8045
0.1733	0.8267	0.0015	0.0065	0.0079	0.9078
0.0822	0.9178	0.0014	0.0064	0.0069	0.4067
DES 8 (298.15 K)					
0.9129	0.0871	0.0025	0.0055	0.0633	23.1299
0.8389	0.1611	0.0023	0.0054	0.0332	12.1134
0.7093	0.2907	0.0021	0.0052	0.0178	6.0051
0.4793	0.5207	0.0019	0.0050	0.0095	2.4069
0.2867	0.7133	0.0017	0.0047	0.0067	1.1220
0.2238	0.7762	0.0016	0.0046	0.0060	0.8334
0.1138	0.8862	0.0015	0.0045	0.0051	0.3848
DES 8 (308.15 K)					
0.9129	0.0871	0.0021	0.0042	0.0479	20.8042
0.8389	0.1611	0.0019	0.0040	0.0246	10.8756
0.7093	0.2907	0.0017	0.0037	0.0129	5.3762
0.4793	0.5207	0.0015	0.0035	0.0067	2.1450
0.2867	0.7133	0.0014	0.0034	0.0047	0.9639
0.2238	0.7762	0.0013	0.0032	0.0041	0.7118
0.1138	0.8862	0.0012	0.0030	0.0034	0.3263
DES 9 (298.15 K)					
0.8860	0.1140	0.0025	0.0075	0.0659	23.3689
0.8158	0.1842	0.0024	0.0074	0.0404	13.7211
0.7264	0.2736	0.0023	0.0074	0.0269	8.4847
0.5232	0.4768	0.0021	0.0072	0.0150	3.7457
0.3327	0.6673	0.0020	0.0071	0.0106	1.7627
0.2098	0.7902	0.0019	0.0070	0.0088	0.9737
0.1086	0.8914	0.0018	0.0069	0.0077	0.4643
DES 9 (308.15 K)					
0.8860	0.1140	0.0023	0.0064	0.0557	21.4583
0.8158	0.1842	0.0021	0.0062	0.0335	13.0090
0.7264	0.2736	0.0020	0.0061	0.0222	8.0589

0.5232	0.4768	0.0018	0.0059	0.0123	3.5724
0.3327	0.6673	0.0016	0.0056	0.0084	1.7527
0.2098	0.7902	0.0015	0.0055	0.0070	0.9727
0.1086	0.8914	0.0014	0.0054	0.0060	0.4662
DES 10 (298.15 K)					
0.9583	0.0417	0.0029	0.0028	0.0675	22.2986
0.8249	0.1751	0.0024	0.0024	0.0139	4.7806
0.7093	0.2907	0.0022	0.0023	0.0078	2.5081
0.5431	0.4569	0.0020	0.0021	0.0045	1.2307
0.3198	0.6802	0.0018	0.0019	0.0027	0.4858
0.1983	0.8017	0.0017	0.0017	0.0022	0.2540
0.1238	0.8762	0.0016	0.0016	0.0019	0.1435
DES 10 (308.15 K)					
0.9583	0.0417	0.0023	0.0019	0.0444	18.4876
0.8249	0.1751	0.0018	0.0014	0.0078	3.5596
0.7093	0.2907	0.0017	0.0012	0.0043	1.7880
0.5431	0.4569	0.0015	0.0010	0.0022	0.7888
0.3198	0.6802	0.0014	0.0009	0.0013	0.2879
0.1983	0.8017	0.0013	0.0007	0.0009	0.1349
0.1238	0.8762	0.0012	0.0005	0.0006	0.0647
DES 11 (298.15 K)					
0.9036	0.0964	0.0024	0.0039	0.0408	15.3702
0.7924	0.2076	0.0023	0.0039	0.0185	6.3898
0.6735	0.3265	0.0022	0.0038	0.0115	3.5268
0.4916	0.5084	0.0021	0.0037	0.0072	1.6891
0.3872	0.6128	0.0020	0.0036	0.0058	1.1281
0.1979	0.8021	0.0019	0.0035	0.0043	0.4504
0.0925	0.9075	0.0018	0.0034	0.0037	0.1903
DES 11 (308.15 K)					
0.9036	0.0964	0.0023	0.0029	0.0296	11.6162
0.7924	0.2076	0.0020	0.0026	0.0124	4.9063

0.6735	0.3265	0.0019	0.0025	0.0076	2.6797
0.4916	0.5084	0.0017	0.0022	0.0044	1.2774
0.3872	0.6128	0.0016	0.0021	0.0035	0.8390
0.1979	0.8021	0.0014	0.0019	0.0023	0.3273
0.0925	0.9075	0.0013	0.0017	0.0019	0.1340
DES 12 (298.15 K)					
0.8905	0.1095	0.0025	0.0030	0.0276	9.8144
0.8129	0.1871	0.0023	0.0029	0.0152	5.3843
0.7094	0.2906	0.0022	0.0028	0.0095	3.0641
0.4983	0.5017	0.0020	0.0026	0.0051	1.2767
0.3092	0.6908	0.0019	0.0025	0.0036	0.5815
0.2358	0.7642	0.0018	0.0024	0.0031	0.4046
0.1296	0.8704	0.0017	0.0022	0.0026	0.1967
DES 12 (308.15 K)					
0.8905	0.1095	0.0023	0.0019	0.0169	6.5424
0.8129	0.1871	0.0020	0.0016	0.0084	3.4123
0.7094	0.2906	0.0018	0.0014	0.0047	1.8445
0.4983	0.5017	0.0015	0.0010	0.0020	0.6591
0.3092	0.6908	0.0013	0.0007	0.0010	0.2442
0.2358	0.7642	0.0012	0.0005	0.0007	0.1412
0.1296	0.8704	0.0011	0.0004	0.0004	0.0508

^a Standard uncertainties u are u (*DES composition*) = 0.01 mole ratio, $u(T) = 0.1$ K, $u(p) = 0.02$ bar,

$$u(x) = 0.0005.$$

Table S4. Experimental LLE data, in mass fraction, for the ternary systems including {n-hexadecane (1) + benzene (2) + DES 7} after 5 sequences recycling at atmospheric pressure and $T = 373.15$ including distribution coefficient (β), and selectivity (S) values.^a

Aliphatic rich phase		DES rich phase			
x_1	x_2	x_1	x_2	β	S
1 st Cycle ($T= 298.15$ K)					
0.8735	0.1264	0.0174	0.1571	1.2432	62.3752
0.8176	0.1823	0.0130	0.0814	0.4468	27.9286
0.7748	0.2251	0.0081	0.0486	0.2161	20.9485
0.6429	0.3570	0.0078	0.0510	0.1431	11.7450
0.5788	0.4211	0.0062	0.0463	0.1100	10.1598
0.3467	0.6532	0.0034	0.0379	0.0581	5.7889
0.1664	0.8335	0.0013	0.0346	0.0416	4.9716
2 nd Cycle ($T= 298.15$ K)					
0.8735	0.1264	0.0174	0.1573	1.2444	62.3129
0.8176	0.1823	0.0131	0.0815	0.4473	27.9007
0.7748	0.2251	0.0080	0.0487	0.2163	20.9276
0.6429	0.3574	0.0078	0.0511	0.1432	11.7332
0.5788	0.4211	0.0062	0.0463	0.1101	10.1494
0.3467	0.6532	0.0034	0.0380	0.0582	5.7831
0.1664	0.8335	0.0014	0.0347	0.0416	4.9667
3 rd Cycle ($T= 298.15$ K)					
0.8735	0.1264	0.0174	0.1574	1.2456	62.2507
0.8177	0.1823	0.0131	0.0816	0.4477	27.8729
0.7748	0.2251	0.0080	0.0487	0.2165	20.9067
0.6429	0.3570	0.0078	0.0512	0.1434	11.7215
0.5788	0.4211	0.0062	0.0464	0.1102	10.1395
0.3467	0.6532	0.0035	0.0380	0.0582	5.7774
0.1664	0.8335	0.0014	0.0347	0.0416	4.9617
4 th Cycle ($T= 298.15$ K)					
0.8735	0.1264	0.0175	0.1576	1.2469	62.1886
0.8176	0.1823	0.0131	0.0817	0.4482	27.8451
0.7748	0.2251	0.0080	0.0482	0.2167	20.8859
0.6429	0.3570	0.0078	0.0515	0.1435	11.7098
0.5788	0.4211	0.0063	0.0464	0.1103	10.1294
0.3467	0.6532	0.0035	0.0380	0.0583	5.7716
0.1664	0.8335	0.0014	0.0347	0.0417	4.9567
5 th Cycle ($T= 298.15$ K)					

0.8735	0.1264	0.0175	0.1578	1.2481	62.1262
0.8176	0.1823	0.0131	0.0818	0.4486	27.8173
0.7748	0.2251	0.0080	0.0488	0.2170	20.8642
0.6429	0.3570	0.0079	0.0513	0.1436	11.6922
0.5788	0.4211	0.0063	0.0465	0.1104	10.1195
0.3467	0.6532	0.0035	0.0381	0.0583	5.7658
0.1664	0.8335	0.0014	0.0348	0.0417	4.9518

^a Standard uncertainties u are u (*DES composition*) = 0.01 mole ratio, $u(T) = 0.1$ K, $u(p) = 0.02$ bar,

$$u(x) = 0.0005.$$

Table S5. UNIQUAC binary parameters obtained for the ternary systems {hexadecane (1) + DES (2) + thiophene (3)} and $T = 298.15$ K.

T (K)	Δu_{12} (kJ.mol $^{-1}$)	Δu_{13} (kJ.mol $^{-1}$)	u_{21} (kJ.mol $^{-1}$)	Δu_{23} (kJ.mol $^{-1}$)	Δu_{31} (kJ.mol $^{-1}$)	Δu_{32} (kJ.mol $^{-1}$)	$rmsd$
DES 1							
298.15	-6.97	-3.14	-12.71	-7.81	0.28	2.50	0.0392
308.15	-7.35	-3.21	-12.69	-7.82	0.41	2.54	0.0214
DES 2							
298.15	-7.16	-5.87	-12.48	-7.29	1.67	2.77	0.0574
308.15	-7.99	-5.91	-12.85	-7.53	1.65	2.82	0.0145
DES 3							
298.15	-6.21	-4.08	-12.14	-8.18	0.58	2.71	0.0651
308.15	-6.78	-4.76	-12.33	-7.21	0.59	2.71	0.0423
DES 4							
298.15	-8.04	-4.95	-12.76	-9.10	-0.76	2.63	0.0250
308.15	-8.73	-3.84	-12.76	-9.13	-0.75	2.62	0.0154
DES 5							
298.15	-8.42	-3.54	-12.51	-9.15	-0.41	2.85	0.0354
308.15	-9.45	-4.02	-12.64	-9.65	-0.74	2.05	0.0475
DES 6							
298.15	-8.74	-4.95	-12.76	-9.44	-0.85	2.42	0.0545
308.15	-9.45	-4.76	-12.14	-9.65	-0.47	2.60	0.0544
DES 7							
298.15	-7.78	-3.54	-11.16	-6.65	1.47	2.56	0.0105
308.15	-6.54	-3.66	-12.74	-7.44	1.85	2.22	0.0456
DES 8							
298.15	-7.84	-3.62	-11.76	-7.46	1.54	2.56	0.0246
308.15	-6.18	-3.15	-12.47	-7.15	1.14	2.41	0.0415

DES 9							
298.15	-8.45	-3.66	-11.84	-7.74	1.85	2.48	0.0257
308.15	-7.15	-4.71	-12.63	-8.15	-0.26	2.62	0.0412
DES 10							
298.15	-8.04	-4.95	-12.71	-8.10	-0.85	2.85	0.0325
308.15	-7.78	-3.24	-12.82	-9.05	-0.68	2.47	0.0264
DES 11							
298.15	-8.71	-4.49	-12.76	-8.65	-0.78	2.76	0.0524
308.15	-9.26	-4.58	-12.14	-9.46	-0.71	2.25	0.0413
DES 12							
298.15	-8.79	-4.79	-12.14	-9.54	-0.56	2.05	0.0146
308.15	-9.67	-3.48	-12.79	-9.65	-0.55	2.74	0.0285

Table S6. UNIQUAC binary parameters obtained for the ternary systems {cyclohexane (1) + DES (2) + thiophene (3)} and $T = 298.15$ K.

T (K)	Δu_{12} (kJ.mol $^{-1}$)	Δu_{13} (kJ.mol $^{-1}$)	u_{21} (kJ.mol $^{-1}$)	Δu_{23} (kJ.mol $^{-1}$)	Δu_{31} (kJ.mol $^{-1}$)	Δu_{32} (kJ.mol $^{-1}$)	$rmsd$
DES 1							
298.15	-5.53	-2.36	-14.62	-17.32	-3.55	2.59	0.0353
308.15	-6.33	-2.18	-4.62	-17.41	-3.64	2.60	0.0365
DES 2							
298.15	-4.02	-3.43	-14.48	-16.27	-3.31	2.96	0.0345
308.15	-6.09	-3.61	-14.45	-16.27	-3.25	2.19	0.0356
DES 3							
298.15	-5.76	-2.93	-14.65	-17.35	-3.70	2.26	0.0234
308.15	-5.25	-3.71	-14.22	-15.33	-3.46	2.09	0.0467
DES 4							
298.15	-6.73	-4.58	-14.62	-17.63	-3.83	2.14	0.0374
308.15	-8.79	-3.51	-14.62	-15.84	-3.61	2.31	0.0433
DES 5							
298.15	-8.42	-4.54	-15.51	-19.15	-3.41	2.85	0.0245
308.15	-7.45	-3.02	-14.64	-18.65	-3.74	2.05	0.0342
DES 6							
298.15	-8.74	-4.95	-16.76	-19.44	-3.85	2.42	0.0264
308.15	-9.45	-4.76	-15.14	-19.65	-3.47	2.60	0.0415
DES 7							
298.15	-6.78	-3.54	-13.16	-17.65	-3.47	2.56	0.0205
308.15	-5.54	-2.66	-13.74	-16.44	-2.85	2.22	0.0361
DES 8							
298.15	-6.84	-3.62	-13.76	-17.46	-3.54	2.56	0.0125

308.15	-7.18	-3.15	-13.47	-16.15	-3.14	2.41	0.0306
DES 9							
298.15	-8.45	-4.66	-14.84	-18.74	-3.85	2.48	0.0402
308.15	-7.15	-3.71	-14.63	-17.15	-3.26	2.62	0.0365
DES 10							
298.15	-7.04	-3.95	-14.71	-18.10	-3.85	2.85	0.0315
308.15	-8.78	-4.24	-15.82	-17.05	-3.68	2.47	0.0254
DES 11							
298.15	-9.71	-3.49	-14.76	-19.65	-3.78	2.76	0.0264
308.15	-9.26	-4.58	-16.14	-18.46	-3.71	2.25	0.0235
DES 12							
298.15	-8.79	-4.79	-14.14	-18.54	-3.56	2.05	0.0365
308.15	-9.67	-4.48	-15.79	-19.65	-3.55	2.74	0.0302

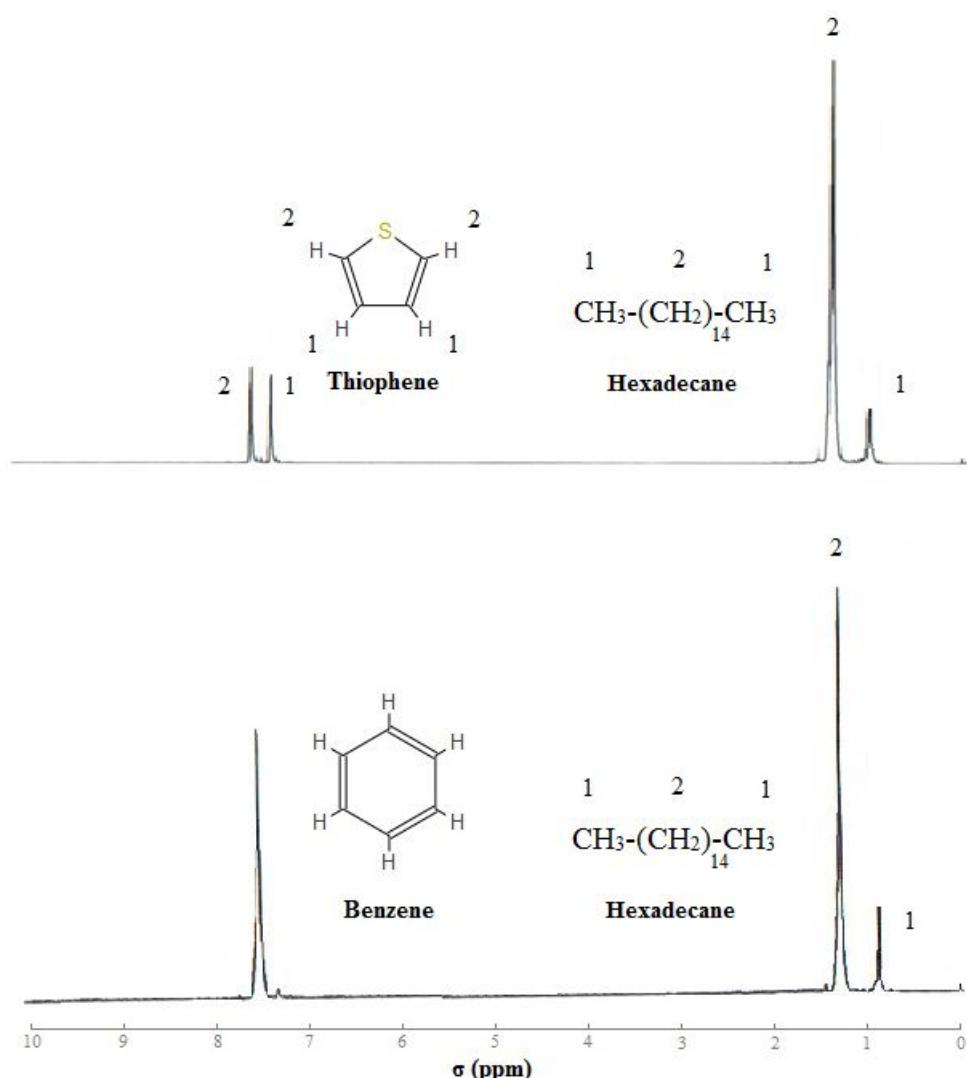


Fig. S1. ^1H NMR spectra of raffinate phases of (A) {hexadecane + benzene + DES 7}, (B) {hexadecane + thiophene + DES 7} systems in DMSO.