

## SUPPLEMENTARY MATERIAL

## Gas Chromatographic Property Study of Some Liquid Crystal Type Compounds Using Linear Solvation Energy Relationships (LSER's)

Felicia Spafiu<sup>1</sup>, Alice Mischie<sup>1</sup>, Adrian Beteringhe<sup>1,2</sup>, Titus Constantinescu<sup>1</sup> and Alexandru T. Balaban<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Institute of Physical Chemistry "Ilie Murgulescu" of the Romanian Academy, Splaiul Independentei 202, 060021 Bucharest, Romania

<sup>2</sup>University of South-East Europe "Lumina", Soseaua Colentina 64b, 021178 Bucharest, Romania

<sup>3</sup>Texas A&M University at Galveston, Department of Marine Sciences, 200 Seawolf Parkway, Galveston, TX 77551, USA

This study involves Abraham's equation (eq.1) which was mentioned in the text. Calculated values are presented in Table S1.

**Table S1.** The Coefficients  $s$ ,  $a$ ,  $b$ ,  $l$  and Statistical Parameters  $ea(R^2, F, SE)$  Resulted by Applying Multilinear Regression (eq.1) to the Corresponding Data ( $n = 25$ ) for Each Compound Used as Stationary Phase (1a-c, 2a,b, and OV-25)

Stationary Phase	$t$ (°C)	$s$	$a$	$b$	$l$	$c$	$R^2$	$F$	SE
<b>1a</b> heating mode	70	1.36	2.21	1.36	0.64	-3.10	0.98	259	0.11
	80	1.23	1.81	0.98	0.62	-3.14	0.99	238	0.10
	90	1.19	1.60	0.77	0.58	-3.11	0.98	280	0.09
	100	1.08	1.44	0.66	0.54	-3.09	0.98	253	0.09
	110	1.16	1.46	0.80	0.53	-3.14	0.98	211	0.10
	120	1.12	1.25	0.71	0.51	-3.04	0.98	247	0.08
	130	1.05	1.25	0.78	0.46	-2.24	0.98	227	0.08
	140	1.06	1.17	0.62	0.45	-2.11	0.98	199	0.08
	145	1.36	1.81	0.42	0.46	-2.31	0.97	194	0.09
<b>1a</b> cooling mode	145	1.36	1.81	0.42	0.46	-2.31	0.98	194	0.09
	140	1.23	1.58	0.49	0.46	-2.25	0.98	291	0.08
	130	1.13	1.29	0.71	0.46	-2.06	0.98	187	0.09
	120	1.23	1.36	0.82	0.48	-2.00	0.98	230	0.09
	110	1.27	1.43	0.90	0.53	-2.09	0.98	238	0.09
	100	1.34	1.49	0.95	0.53	-1.89	0.97	149	0.12
	90	0.64	2.26	0.76	0.56	-2.42	0.98	252	0.09
	80	1.21	1.97	0.96	0.59	-2.79	0.98	229	0.10
	70	1.28	2.22	1.14	0.62	-2.84	0.98	272	0.10
<b>1b</b> heating mode	70	1.56	2.18	1.54	0.61	-2.47	0.98	284	0.10
	80	1.55	1.94	1.23	0.57	-2.49	0.98	221	0.11
	90	1.46	1.65	1.20	0.55	-2.60	0.98	258	0.10
	100	1.41	1.57	1.02	0.52	-2.64	0.98	272	0.09
	110	1.32	1.45	0.93	0.50	-2.65	0.98	261	0.09
	120	1.28	1.46	0.89	0.45	-2.47	0.98	225	0.09
	130	1.21	1.25	0.81	0.45	-2.28	0.98	243	0.08
	140	1.17	1.19	0.72	0.42	-2.05	0.98	217	0.08

(Table S1) contd.....

Stationary Phase	<i>t</i> (°C)	<i>s</i>	<i>a</i>	<i>b</i>	<i>l</i>	<i>c</i>	<i>R</i> <sup>2</sup>	<i>F</i>	SE
<b>1b</b> cooling mode	140	1.16	1.11	0.69	0.42	-2.06	0.98	208	0.08
	130	1.19	1.23	0.71	0.45	-2.04	0.98	219	0.08
	120	1.27	1.31	0.79	0.47	-2.00	0.98	224	0.09
	110	1.33	1.47	0.87	0.49	-1.96	0.98	222	0.09
	100	1.40	1.50	0.88	0.52	-1.94	0.99	216	0.10
	90	1.41	1.76	1.07	0.54	-1.91	0.98	234	0.10
	80	1.35	1.90	1.06	0.57	-1.88	0.98	236	0.10
	70	1.77	2.88	0.99	0.53	-1.43	0.90	41	0.26
<b>1c</b> heating mode	70	0.69	1.19	0.36	0.72	-3.21	0.98	261	0.10
	80	0.62	1.04	0.15	0.69	-3.33	0.98	303	0.09
	90	0.64	0.91	0.08	0.65	-3.35	0.98	292	0.09
	100	0.64	0.93	0.08	0.62	-3.38	0.98	273	0.09
	110	0.64	0.85	0.13	0.59	-3.37	0.98	279	0.08
	120	0.58	1.03	0.09	0.53	-3.16	0.98	209	0.09
	130	0.98	1.28	0.68	0.46	-2.53	0.98	222	0.08
	140	1.14	1.28	0.84	0.42	-2.27	0.98	245	0.08
<b>1c</b> cooling mode	140	1.15	1.31	0.85	0.40	-1.94	0.98	209	0.08
	130	1.24	1.41	0.97	0.42	-1.89	0.98	221	0.08
	120	1.32	1.51	1.03	0.44	-1.82	0.98	227	0.08
	110	1.34	1.63	1.04	0.46	-1.78	0.98	209	0.09
	100	0.98	1.88	0.91	0.50	-2.33	0.98	260	0.08
	90	0.88	1.68	0.61	0.58	-2.81	0.98	259	0.09
	80	0.64	1.53	0.24	0.65	-3.26	0.98	272	0.09
	70	0.68	1.26	0.14	0.73	-3.53	0.98	242	0.11
<b>2a</b> heating mode	70	1.14	1.88	1.28	0.56	-1.93	0.93	64	0.19
	80	1.15	1.71	1.12	0.53	-1.96	0.93	67	0.17
	90	1.20	1.44	0.86	0.52	-2.10	0.94	68	0.17
	100	1.18	1.29	0.79	0.49	-2.13	0.94	81	0.15
	110	1.16	1.25	0.79	0.46	-2.16	0.95	89	0.13
	120	1.11	1.18	0.79	0.43	-2.17	0.95	92	0.12
	130	1.08	1.11	0.74	0.40	-2.14	0.94	82	0.12
	140	1.11	1.18	0.83	0.37	-2.12	0.95	101	0.11
	150	1.15	1.25	0.98	0.34	-1.94	0.95	87	0.11
	160	1.25	1.27	1.03	0.28	-1.63	0.95	89	0.11
	170	1.17	1.08	0.94	0.30	-1.83	0.95	95	0.10
<b>2a</b> cooling mode	170	1.02	1.29	1.12	0.38	-2.36	0.94	81	0.12
	160	1.03	1.07	0.97	0.36	-2.08	0.97	163	0.08
	150	1.11	1.33	1.03	0.36	-1.95	0.98	217	0.07
	140	1.11	1.46	1.12	0.37	-1.84	0.98	240	0.07
	130	1.22	1.55	1.21	0.38	-1.79	0.98	229	0.08
	120	1.30	1.65	1.33	0.39	-1.70	0.98	218	0.08
	110	1.33	1.77	1.37	0.41	-1.64	0.98	193	0.09
	100	1.28	2.06	1.50	0.41	-1.52	0.97	178	0.10

(Table S1) contd.....

Stationary Phase	$t$ (°C)	$s$	$a$	$b$	$l$	$c$	$R^2$	$F$	SE
	90	0.61	2.30	1.01	0.49	-2.53	0.97	163	0.10
	80	0.63	1.46	0.44	0.62	-3.44	0.98	245	0.09
	70	0.64	1.27	0.18	0.67	-3.52	0.98	327	0.09
<b>2b</b> heating mode	70	0.90	0.87	0.38	0.60	-1.92	0.95	94.9	0.15
	80	0.88	0.83	0.15	0.59	-2.10	0.95	94.6	0.14
	90	0.86	0.71	0.03	0.56	-2.18	0.94	83.8	0.15
	100	0.81	0.69	0.12	0.52	-2.20	0.95	87.6	0.13
	110	0.79	0.67	0.18	0.50	-2.23	0.95	90.4	0.13
	120	0.77	0.75	0.22	0.47	-2.22	0.95	89.8	0.12
	130	0.99	1.23	0.73	0.38	-1.69	0.95	85.4	0.11
	140	0.80	1.36	0.75	0.42	-2.00	0.98	218.1	0.07
<b>2b</b> cooling mode	140	0.81	1.36	0.75	0.43	-2.021	0.98	209.6	0.08
	130	0.84	1.43	0.79	0.44	-1.99	0.98	201.5	0.08
	120	0.87	1.52	0.86	0.46	-1.91	0.98	201.9	0.08
	110	0.90	1.61	0.92	0.48	-1.86	0.98	204.1	0.09
	100	0.89	1.73	0.90	0.53	-1.98	0.97	144.7	0.11
	90	0.92	1.87	1.09	0.53	-1.77	0.98	212.8	0.09
	80	0.82	1.77	0.78	0.58	-1.97	0.98	194.4	0.10
	70	0.68	2.18	0.91	0.62	-2.00	0.98	200.7	0.11
<b>OV-25</b> heating mode	70	1.44	0.82	0.12	0.61	-1.99	0.98	226.6	0.11
	80	1.31	0.82	0.17	0.58	-2.02	0.98	300.4	0.09
	90	1.25	0.82	0.18	0.54	-2.03	0.98	284.7	0.08
	100	1.19	0.63	0.12	0.53	-2.15	0.98	257.5	0.08
	110	1.09	0.71	0.10	0.49	-2.14	0.98	288.9	0.07
	120	1.04	0.61	0.10	0.47	-2.22	0.98	275.2	0.07
	130	0.96	0.65	0.09	0.45	-2.25	0.98	264	0.07
	140	0.94	0.60	0.13	0.43	-2.31	0.98	266.2	0.07
<b>OV-25</b> cooling mode	140	0.96	0.48	0.15	0.44	-2.36	0.98	276.7	0.07
	130	1.00	0.56	0.15	0.45	-2.31	0.98	266.1	0.07
	120	1.05	0.58	0.11	0.47	-2.25	0.98	303.6	0.07
	110	1.11	0.63	0.12	0.49	-2.18	0.98	291.3	0.07
	100	1.19	0.72	0.19	0.53	-2.18	0.98	303.1	0.08
	90	1.23	0.74	0.15	0.55	-2.11	0.98	295.7	0.08
	80	1.34	0.78	0.15	0.57	-2.03	0.98	302.5	0.09
	70	1.40	1.05	0.23	0.60	-1.97	0.98	193	0.11