

# Supplementary Information

## Thermodynamics of Biodiesel: Combustion Experiments in the Standard Conditions and Adjusting of Calorific Values for the Practically Relevant Range (273 to 373) K and (1 to 200) bar

*Dzmitry H. Zaitsau\* and Sergey P. Verevkin*

*Department of Physical Chemistry, University of Rostock,  
 Dr-Lorenz-Weg. 1, 18059 Rostock, Germany*

**Table S1.** Molar fractions of RME and SME determined by Institute for Reference Materials and Measurements (IRMM), Geel, Belgium in the frame of the EURAMET Joint Research Project “ENG-09 Biofuels”.

Components <sup>a</sup>	$x_M, \%$		Components <sup>a</sup>	$x_M, \%$	
	RME	SME		RME	SME
Water	0.28	0.39	C12:0	0.02	0.02
Methanol	0.37	0.27	C15:0	0.03	0.02
Mono-glycerides	0.51	0.59	C16:1	0.23	0.09
Di-glycerides	0.07	0.06	C17:0	0.06	0.10
Tri-glycerides	0.01	0.00	C20:1	1.18	0.22
Glycerol	0.61	0.66	C20:2	0.06	-
C14:0	0.06	0.11	C20:3	0.01	-
C16:0	5.01	11.51	C22:0	0.27	0.02
C18:0	1.63	3.91	C22:1	0.35	0.04
C18:1	59.69	24.43	C22:2	0.01	0.12
C18:2	19.70	49.10	C23:0	0.02	0.02
C18:3	8.76	7.26	C24:0	0.09	0.02
C20:0	0.51	0.37	C24:1	0.12	0.04
C10:0	0.01	-	Unknown residue	0.34	0.29

<sup>a</sup> Notification of the unsaturated esters: e.g. for the C18:3 the number 18 means the fatty acid alkyl chain length, and the number 3 indicates the amount of double bonds in the alky chain.

**Table S2.** Formula, density  $\rho$  ( $T = 293$  K), massic heat capacity  $c_p$  ( $T = 298.15$  K), and expansion coefficients  $(dV/dT)_p$  of the materials used in the present study

Compounds	Formula	$r^b$	$c_p^a$	$10^6 (dV/dT)_p^b$
		$g\ cm^{-3}$	$J\ K^{-1}\ g^{-1}$	$dm^3\ K^{-1}$
RME	$C_{1.856}H_{1.856}O_{0.105}$	0.877	2.02	0.28
SME	$C_{1.824}H_{1.824}O_{0.107}$	0.877	2.02	0.28
polyethene	$CH_{1.93}$	0.920	2.53	0.3
cotton <sup>c</sup>	$CH_{1.774}O_{0.887}$	1.500	1.67	0.1

<sup>a</sup>From ref 1. <sup>b</sup>From ref 2. <sup>c</sup>From 10 combustion experiments,  $\Delta_c u^\circ = -(16945.2 \pm 4.2) J\ g^{-1}$ .

**Table S3.** Results for typical combustion experiments at  $T = 298.15$  K ( $p^\circ = 0.1$  MPa) of the RME<sup>a</sup>

$m$ (substance) / g <sup>b</sup>	0.398118	0.326414	0.319642	0.324335	0.338379	0.340592	0.338142
$m'$ (cotton) / g <sup>b</sup>	0.00061	0.000653	0.000534	0.000621	0.000538	0.000654	0.000557
$m''$ (polyethene) / g <sup>b</sup>	0.29512	0.300751	0.272259	0.278885	0.268108	0.285115	0.296148
$\Delta T_c / K^c$	1.99363	1.81955	1.71027	1.74376	1.74829	1.808	1.83629
$(\epsilon_{\text{calor}}) \cdot (-\Delta T_c) / J^e$	-29569.85	-26987.92	-25367.06	-25863.81	-25931	-26816.64	-27236.22
$(\epsilon_{\text{cont}}) \cdot (-\Delta T_c) / J$	-33.15	-30.09	-27.97	-28.62	-28.7	-29.84	-30.44
$\Delta U_{\text{decomp}} \text{HNO}_3 / J$	1.19	0.896	0.597	0.597	0.597	0.597	0.597
$\Delta U_{\text{corr}} / J^d$	10.45	8.64	8.05	8.24	8.29	8.62	8.76
$-m' \cdot \Delta_c u' / J$	10.34	11.07	9.05	10.52	9.12	11.08	9.44
$-m'' \cdot \Delta_c u'' / J$	13681.08	13942.12	12621.3	12928.47	12428.87	13217.28	13728.74
$\Delta_c u^\circ$ (liq.) / J g <sup>-1</sup>	-39937.8	-39996.1	-39907.3	-39911.2	-39934	-39956.6	-39980.6
$\Delta_c u^\circ$ (liq.) / J g <sup>-1</sup>				-39946 ± 34			

<sup>a</sup>For the definition of the symbols see reference 3, macrocalorimeter:  $T_h = 298.15$  K;  $V(\text{bomb}) = 0.2664$  dm<sup>3</sup>;  $p(\text{gas}) = 3.0$  MPa;  $m(\text{H}_2\text{O}) = 1.00$  g; <sup>b</sup>Masses obtained from apparent masses. <sup>c</sup> $\Delta T_c = T^f - T^i + \Delta T_{\text{corr}}$ ;  $(\epsilon_{\text{calor}}) \cdot (-\Delta T_c) = (\epsilon_{\text{cont}}^i) \cdot (T^i - 298.15 \text{ K}) + (\epsilon_{\text{cont}}^f) \cdot (298.15 \text{ K} - T^f + \Delta T_{\text{corr}})$ . <sup>d</sup> $\Delta U_{\text{corr}}$ , the correction to standard states, is the sum of items 81 to 85, 87 to 90, 93, and 94 in reference 3.  $\Delta_c u^\circ(\text{polyethene}) = -(46357.7 \pm 3.5) \text{ J g}^{-1}$ ;  $\epsilon_{\text{calor}} = 14885.6.0 \pm 0.9 \text{ J K}^{-1}$ .

**TABLE S4.** Results for typical combustion experiments at  $T = 298.15$  K ( $p^\circ = 0.1$  MPa) of the SME<sup>a</sup>

$m$ (substance) / g <sup>b</sup>	0.34219	0.340654	0.339909	0.340818	0.343887	0.352777
$m'$ (cotton) / g <sup>b</sup>	0.000539	0.000493	0.000626	0.00073	0.000778	0.000702
$m''$ (polyethene) / g <sup>b</sup>	0.288903	0.267488	0.298234	0.291472	0.267702	0.284718
$\Delta T_c / K^c$	1.82118	1.749	1.84394	1.81757	1.75245	1.82791
$(\epsilon_{\text{calor}}) \cdot (-\Delta T_c) / J^e$	-26981.08	-25911.82	-27318.4	-27036.49	-26067.83	-27190.19
$(\epsilon_{\text{cont}}) \cdot (-\Delta T_c) / J$	-30.04	-28.67	-30.52	-30.06	-28.81	-30.21
$\Delta U_{\text{decomp}} \text{HNO}_3 / J$	0.597	0.597	0.597	1.19	0.896	0.896
$\Delta U_{\text{corr}} / J^d$	8.77	8.38	9.06	8.79	8.45	8.88
$-m' \cdot \Delta_c u' / J$	9.13	8.35	10.61	12.37	13.18	11.9
$-m'' \cdot \Delta_c u'' / J$	13392.88	12400.13	13825.44	13511.97	12410.05	13170.4
$\Delta_c u^\circ$ (liq.) / J g <sup>-1</sup>	-39743.2	-39697.3	-39726	-39705.1	-39734.2	-39765.4
$\Delta_c u^\circ$ (liq.) / J g <sup>-1</sup>	-39729 ± 25					

<sup>a</sup>For the definition of the symbols see reference 3, macrocalorimeter:  $T_h = 298.15$  K;  $V(\text{bomb}) = 0.2664$  dm<sup>3</sup>;  $p(\text{gas}) = 3.0$  MPa;  $m(\text{H}_2\text{O}) = 1.00$  g; <sup>b</sup>Masses obtained from apparent masses. <sup>c</sup> $\Delta T_c = T^f - T^i + \Delta T_{\text{corr}}$ ;  $(\epsilon_{\text{calor}}) \cdot (-\Delta T_c) = (\epsilon_{\text{cont}}^i) \cdot (T^i - 298.15 \text{ K}) + (\epsilon_{\text{cont}}^f) \cdot (298.15 \text{ K} - T^f + \Delta T_{\text{corr}})$ . <sup>d</sup> $\Delta U_{\text{corr}}$ , the correction to standard states, is the sum of items 81 to 85, 87 to 90, 93, and 94 in reference 3.  $\Delta_c u^\circ(\text{polyethene}) = -(46357.7 \pm 3.5) \text{ J g}^{-1}$ ;  $\epsilon_{\text{calor}} = 14885.6.0 \pm 0.9 \text{ J K}^{-1}$ .

**Table S5.** Comparison of the pressure correction for the calorific values for RME and SME B100 biofuel blends with certified composition and evaluated using equation 16-18 and from thermodynamic functions of the combustion reaction participants.

$P-1$ , bar	10	20	30	40	50	60	70	80	90	100	120	140	150	160	180	200
$T$ / K																
SME																
$-T\Delta_c(Va_p)(P-1) / J g^{-1}$ (from thermodynamic functions)																
273.15	0.23	0.43	0.66	0.89	1.12	1.35	1.58	1.81	2.04	2.26	2.72	3.18	3.41	3.64	4.10	4.55
280	0.20	0.42	0.64	0.86	1.09	1.31	1.53	1.75	1.98	2.20	2.64	3.09	3.31	3.53	3.98	4.42
290	0.18	0.40	0.61	0.82	1.03	1.24	1.45	1.67	1.88	2.09	2.51	2.94	3.15	3.36	3.78	4.21
298.15	0.17	0.38	0.58	0.78	0.98	1.18	1.38	1.59	1.79	1.99	2.39	2.80	3.00	3.20	3.60	4.01
300	0.17	0.37	0.57	0.77	0.97	1.17	1.37	1.57	1.77	1.97	2.36	2.76	2.96	3.16	3.56	3.96
310	0.16	0.34	0.53	0.71	0.90	1.08	1.27	1.45	1.64	1.83	2.20	2.57	2.75	2.94	3.31	3.68
320	0.14	0.31	0.48	0.65	0.82	0.99	1.16	1.33	1.50	1.67	2.01	2.35	2.52	2.69	3.03	3.37
330	0.12	0.27	0.42	0.58	0.73	0.88	1.03	1.19	1.34	1.49	1.80	2.10	2.25	2.41	2.71	3.02
340	0.10	0.23	0.36	0.50	0.63	0.76	0.90	1.03	1.16	1.30	1.56	1.83	1.96	2.09	2.36	2.62
350	0.08	0.19	0.30	0.41	0.52	0.63	0.74	0.85	0.96	1.08	1.30	1.52	1.63	1.74	1.96	2.19
360	0.05	0.14	0.22	0.31	0.40	0.48	0.57	0.66	0.74	0.83	1.00	1.18	1.26	1.35	1.53	1.70
370	0.02	0.08	0.14	0.20	0.26	0.32	0.38	0.44	0.50	0.56	0.68	0.80	0.86	0.92	1.04	1.16
373	0.01	0.06	0.11	0.17	0.22	0.27	0.32	0.37	0.42	0.47	0.58	0.68	0.73	0.78	0.88	0.99
$-T\Delta_c(Va_p)(P-1) / J g^{-1}$ (using equation 16-18)																
273.15	0.21	0.44	0.67	0.90	1.14	1.37	1.60	1.83	2.06	2.30	2.76	3.22	3.46	3.69	4.15	4.62
280	0.20	0.43	0.66	0.88	1.11	1.34	1.56	1.79	2.01	2.24	2.69	3.15	3.37	3.60	4.05	4.50
290	0.19	0.41	0.63	0.84	1.06	1.28	1.49	1.71	1.93	2.14	2.57	3.01	3.22	3.44	3.87	4.30
298.15	0.19	0.39	0.60	0.81	1.01	1.22	1.43	1.63	1.84	2.05	2.46	2.87	3.08	3.28	3.70	4.11
300	0.18	0.39	0.59	0.80	1.00	1.20	1.41	1.61	1.82	2.02	2.43	2.84	3.04	3.25	3.65	4.06
310	0.17	0.36	0.55	0.74	0.93	1.12	1.31	1.50	1.69	1.88	2.26	2.64	2.83	3.02	3.40	3.78
320	0.16	0.33	0.50	0.68	0.85	1.02	1.20	1.37	1.55	1.72	2.07	2.41	2.59	2.76	3.11	3.46
330	0.14	0.30	0.45	0.61	0.76	0.92	1.07	1.23	1.38	1.54	1.85	2.16	2.31	2.47	2.78	3.09
340	0.12	0.26	0.39	0.53	0.66	0.80	0.93	1.07	1.20	1.33	1.60	1.87	2.01	2.14	2.41	2.68
350	0.10	0.21	0.33	0.44	0.55	0.66	0.77	0.89	1.00	1.11	1.34	1.56	1.67	1.79	2.01	2.23
360	0.08	0.17	0.25	0.34	0.43	0.52	0.60	0.69	0.78	0.87	1.04	1.22	1.31	1.39	1.57	1.74
370	0.05	0.12	0.18	0.24	0.30	0.36	0.42	0.48	0.54	0.60	0.73	0.85	0.91	0.97	1.09	1.21
373	0.05	0.10	0.15	0.20	0.26	0.31	0.36	0.42	0.47	0.52	0.63	0.73	0.78	0.84	0.94	1.05
$\Delta(-T\Delta_c(Va_p)(P-1)) / J g^{-1}$ (deference of two methods)																
273.15	-0.02	0.01	0.01	0.01	0.02	0.02	0.02	0.03	0.03	0.03	0.04	0.04	0.05	0.05	0.06	0.06
280	0.01	0.01	0.02	0.02	0.02	0.03	0.03	0.03	0.04	0.04	0.05	0.06	0.06	0.07	0.07	0.08
290	0.01	0.01	0.02	0.02	0.03	0.03	0.04	0.04	0.05	0.05	0.06	0.07	0.08	0.08	0.09	0.10
298.15	0.01	0.02	0.02	0.03	0.03	0.04	0.04	0.05	0.05	0.06	0.07	0.07	0.08	0.08	0.09	0.10
300	0.01	0.02	0.02	0.03	0.03	0.04	0.04	0.05	0.05	0.06	0.06	0.07	0.08	0.08	0.09	0.10
310	0.02	0.02	0.02	0.03	0.03	0.04	0.04	0.05	0.05	0.05	0.06	0.07	0.08	0.08	0.09	0.10
320	0.02	0.02	0.02	0.03	0.03	0.04	0.04	0.04	0.05	0.05	0.06	0.07	0.07	0.07	0.08	0.09
330	0.02	0.02	0.03	0.03	0.03	0.03	0.04	0.04	0.04	0.05	0.05	0.06	0.06	0.06	0.07	0.07
340	0.02	0.02	0.03	0.03	0.03	0.03	0.03	0.04	0.04	0.04	0.04	0.05	0.05	0.05	0.06	0.06
350	0.03	0.03	0.03	0.03	0.03	0.03	0.03	0.03	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.05	0.05
360	0.03	0.03	0.03	0.03	0.03	0.03	0.03	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.05
370	0.03	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.06
373	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.06	0.06	0.06

Table S5. continuation

$P-1$ , bar	10	20	30	40	50	60	70	80	90	100	120	140	150	160	180	200
$T / K$																
RME																
$-T\Delta_c(Va_p)(P-1) / J g^{-1}$ (from thermodynamic functions)																
273.15	0.20	0.43	0.66	0.89	1.12	1.35	1.58	1.81	2.04	2.27	2.73	3.19	3.42	3.65	4.10	4.56
280	0.20	0.42	0.64	0.87	1.09	1.31	1.54	1.76	1.98	2.21	2.65	3.10	3.32	3.54	3.99	4.44
290	0.19	0.40	0.61	0.82	1.04	1.25	1.46	1.68	1.89	2.10	2.53	2.95	3.17	3.38	3.80	4.23
298.15	0.18	0.38	0.58	0.79	0.99	1.19	1.40	1.60	1.80	2.01	2.41	2.82	3.02	3.23	3.63	4.04
300	0.17	0.37	0.57	0.78	0.98	1.18	1.38	1.58	1.78	1.98	2.38	2.79	2.99	3.19	3.59	3.99
310	0.16	0.35	0.53	0.72	0.91	1.10	1.28	1.47	1.66	1.85	2.22	2.60	2.79	2.98	3.35	3.73
320	0.14	0.31	0.49	0.66	0.83	1.01	1.18	1.35	1.52	1.70	2.04	2.39	2.56	2.73	3.08	3.42
330	0.12	0.28	0.44	0.59	0.75	0.90	1.06	1.21	1.37	1.53	1.84	2.15	2.31	2.46	2.77	3.09
340	0.10	0.24	0.38	0.51	0.65	0.79	0.92	1.06	1.20	1.34	1.61	1.88	2.02	2.16	2.43	2.71
350	0.08	0.20	0.31	0.43	0.54	0.66	0.78	0.89	1.01	1.12	1.36	1.59	1.70	1.82	2.05	2.28
360	0.06	0.15	0.24	0.33	0.42	0.52	0.61	0.70	0.79	0.89	1.07	1.26	1.35	1.44	1.63	1.81
370	0.03	0.09	0.16	0.23	0.29	0.36	0.42	0.49	0.56	0.62	0.76	0.89	0.95	1.02	1.15	1.29
373	0.02	0.08	0.13	0.19	0.25	0.31	0.37	0.42	0.48	0.54	0.66	0.77	0.83	0.89	1.00	1.12
$-T\Delta_c(Va_p)(P-1) / J g^{-1}$ (using equation 16-18)																
273.15	0.21	0.45	0.68	0.92	1.15	1.39	1.62	1.86	2.09	2.33	2.80	3.27	3.50	3.74	4.21	4.68
280	0.21	0.44	0.67	0.89	1.12	1.35	1.58	1.81	2.04	2.27	2.73	3.19	3.42	3.65	4.11	4.57
290	0.20	0.42	0.64	0.86	1.07	1.29	1.51	1.73	1.95	2.17	2.61	3.05	3.27	3.49	3.93	4.37
298.15	0.19	0.40	0.61	0.82	1.03	1.24	1.45	1.66	1.87	2.08	2.49	2.91	3.12	3.33	3.75	4.17
300	0.19	0.39	0.60	0.81	1.02	1.22	1.43	1.64	1.84	2.05	2.47	2.88	3.09	3.30	3.71	4.12
310	0.17	0.37	0.56	0.75	0.95	1.14	1.33	1.53	1.72	1.91	2.30	2.68	2.88	3.07	3.46	3.84
320	0.16	0.34	0.51	0.69	0.87	1.04	1.22	1.40	1.57	1.75	2.10	2.46	2.63	2.81	3.16	3.52
330	0.14	0.30	0.46	0.62	0.78	0.93	1.09	1.25	1.41	1.57	1.88	2.20	2.36	2.52	2.84	3.15
340	0.12	0.26	0.40	0.54	0.68	0.81	0.95	1.09	1.23	1.37	1.64	1.92	2.06	2.19	2.47	2.74
350	0.10	0.22	0.33	0.45	0.57	0.68	0.80	0.91	1.03	1.14	1.37	1.60	1.72	1.83	2.07	2.30
360	0.08	0.17	0.26	0.35	0.44	0.54	0.63	0.72	0.81	0.90	1.08	1.26	1.35	1.44	1.62	1.81
370	0.06	0.12	0.19	0.25	0.31	0.38	0.44	0.51	0.57	0.63	0.76	0.89	0.95	1.02	1.15	1.27
373	0.05	0.11	0.16	0.22	0.27	0.33	0.38	0.44	0.50	0.55	0.66	0.77	0.83	0.88	1.00	1.11
$\Delta(-T\Delta_c(Va_p)(P-1)) / J g^{-1}$ (deference of two methods)																
273.15	0.01	0.01	0.02	0.02	0.03	0.04	0.04	0.05	0.05	0.06	0.07	0.08	0.09	0.09	0.10	0.12
280	0.01	0.02	0.02	0.03	0.03	0.04	0.05	0.05	0.06	0.07	0.08	0.09	0.10	0.10	0.12	0.13
290	0.01	0.02	0.02	0.03	0.04	0.04	0.05	0.06	0.06	0.07	0.08	0.10	0.10	0.11	0.12	0.14
298.15	0.01	0.02	0.03	0.03	0.04	0.05	0.05	0.06	0.06	0.07	0.08	0.10	0.10	0.11	0.12	0.13
300	0.01	0.02	0.03	0.03	0.04	0.04	0.05	0.06	0.06	0.07	0.08	0.09	0.10	0.11	0.12	0.13
310	0.02	0.02	0.03	0.03	0.04	0.04	0.05	0.05	0.06	0.06	0.07	0.08	0.09	0.09	0.10	0.12
320	0.02	0.02	0.03	0.03	0.03	0.04	0.04	0.05	0.05	0.05	0.06	0.07	0.07	0.08	0.09	0.09
330	0.02	0.02	0.02	0.03	0.03	0.03	0.03	0.04	0.04	0.04	0.05	0.05	0.05	0.06	0.06	0.07
340	0.02	0.02	0.02	0.02	0.03	0.03	0.03	0.03	0.03	0.03	0.03	0.03	0.03	0.04	0.04	0.04
350	0.02	0.02	0.02	0.02	0.02	0.02	0.02	0.02	0.02	0.02	0.02	0.02	0.02	0.02	0.02	0.01
360	0.03	0.02	0.02	0.02	0.02	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
370	0.03	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01
373	0.03	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01

Table S5. continuation

$P-1$ , bar	10	20	30	40	50	60	70	80	90	100	120	140	150	160	180	200
$T / K$																
SME																
$\Delta_{\xi}(k_T V) (P^2-1) 2^{-1} / J g^{-1}$ (from thermodynamic functions)																
273.15	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.02	-0.03
280	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.02	-0.03	-0.04
290	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.03	-0.03	-0.04	-0.05
298.15	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.03	-0.03	-0.04	-0.05	-0.06
300	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.03	-0.04	-0.04	-0.05	-0.06
310	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.03	-0.04	-0.04	-0.05	-0.06	-0.08
320	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.03	-0.04	-0.05	-0.06	-0.07	-0.09
330	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.02	-0.04	-0.05	-0.06	-0.06	-0.08	-0.10
340	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.03	-0.04	-0.05	-0.06	-0.07	-0.09	-0.11
350	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.03	-0.04	-0.06	-0.07	-0.08	-0.10	-0.12
360	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.03	-0.03	-0.05	-0.07	-0.08	-0.09	-0.11	-0.14
370	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.03	-0.04	-0.05	-0.07	-0.08	-0.10	-0.12	-0.15
373	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.03	-0.04	-0.05	-0.07	-0.09	-0.10	-0.12	-0.15
$\Delta_{\xi}(k_T V) (P^2-1) 2^{-1} / J g^{-1}$ (from Eqs. 16 - 18)																
273.15	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.03	-0.04	-0.04	-0.05	-0.06	-0.07
280	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.03	-0.04	-0.05	-0.06	-0.07	-0.09
290	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.03	-0.04	-0.05	-0.06	-0.07	-0.08	-0.10
298.15	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.03	-0.04	-0.06	-0.07	-0.08	-0.10	-0.12
300	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.03	-0.04	-0.06	-0.07	-0.08	-0.10	-0.12
310	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.03	-0.03	-0.05	-0.07	-0.08	-0.09	-0.11	-0.14
320	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.03	-0.04	-0.06	-0.08	-0.09	-0.10	-0.13	-0.16
330	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.03	-0.04	-0.04	-0.06	-0.08	-0.10	-0.11	-0.14	-0.17
340	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.03	-0.04	-0.05	-0.07	-0.09	-0.11	-0.12	-0.15	-0.19
350	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.02	-0.03	-0.03	-0.04	-0.05	-0.07	-0.10	-0.12	-0.13	-0.17	-0.21
360	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.03	-0.04	-0.05	-0.06	-0.08	-0.11	-0.13	-0.14	-0.18	-0.23
370	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.03	-0.04	-0.05	-0.06	-0.09	-0.12	-0.14	-0.16	-0.20	-0.24
373	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.03	-0.04	-0.05	-0.06	-0.09	-0.12	-0.14	-0.16	-0.20	-0.25
$\Delta\Delta_{\xi}(k_T V) (P^2-1) 2^{-1} / J g^{-1}$ (deference of two methods)																
273.15	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.03	-0.03	-0.04	-0.05
280	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.03	-0.03	-0.04	-0.05
290	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.03	-0.03	-0.03	-0.04	-0.05
298.15	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.03	-0.03	-0.04	-0.05	-0.06
300	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.03	-0.03	-0.04	-0.05	-0.06
310	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.03	-0.04	-0.04	-0.05	-0.06
320	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.03	-0.04	-0.04	-0.06	-0.07
330	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.03	-0.04	-0.04	-0.05	-0.06	-0.07
340	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.03	-0.04	-0.04	-0.05	-0.06	-0.08
350	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.03	-0.04	-0.05	-0.05	-0.07	-0.08
360	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.03	-0.04	-0.05	-0.06	-0.07	-0.09
370	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.02	-0.03	-0.05	-0.05	-0.06	-0.08	-0.09
373	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.02	-0.03	-0.05	-0.05	-0.06	-0.08	-0.10

Table S5. continuation

$P-1$ , bar	10	20	30	40	50	60	70	80	90	100	120	140	150	160	180	200
$T / K$																
RME																
$\Delta_c(k_T V) (P^2-1) 2^{-1} / J g^{-1}$ (from thermodynamic functions)																
273.15	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.02	-0.03
280	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.02	-0.03	-0.04
290	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.03	-0.03	-0.03	-0.04	-0.05
298.15	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.03	-0.04	-0.04	-0.05	-0.06
300	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.03	-0.04	-0.04	-0.05	-0.07
310	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.03	-0.04	-0.04	-0.05	-0.06	-0.08
320	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.03	-0.04	-0.05	-0.06	-0.07	-0.09
330	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.02	-0.04	-0.05	-0.06	-0.06	-0.08	-0.10
340	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.03	-0.04	-0.06	-0.06	-0.07	-0.09	-0.11
350	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.03	-0.04	-0.06	-0.07	-0.08	-0.10	-0.13
360	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.03	-0.03	-0.05	-0.07	-0.08	-0.09	-0.11	-0.14
370	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.03	-0.04	-0.05	-0.07	-0.08	-0.10	-0.12	-0.15
373	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.03	-0.04	-0.06	-0.08	-0.09	-0.10	-0.13	-0.16
$\Delta_c(k_T V) (P^2-1) 2^{-1} / J g^{-1}$ (from Eqs. 16 - 18)																
273.15	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.03	-0.04	-0.04	-0.05	-0.06	-0.08
280	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.03	-0.04	-0.05	-0.06	-0.07	-0.09
290	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.03	-0.04	-0.05	-0.06	-0.07	-0.09	-0.11
298.15	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.03	-0.04	-0.06	-0.07	-0.08	-0.10	-0.12
300	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.02	-0.03	-0.04	-0.06	-0.07	-0.08	-0.10	-0.12
310	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.03	-0.04	-0.05	-0.07	-0.08	-0.09	-0.11	-0.14
320	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.03	-0.03	-0.04	-0.06	-0.08	-0.09	-0.10	-0.13	-0.16
330	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.03	-0.04	-0.04	-0.06	-0.09	-0.10	-0.11	-0.14	-0.18
340	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.03	-0.04	-0.05	-0.07	-0.09	-0.11	-0.12	-0.16	-0.19
350	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.02	-0.03	-0.03	-0.04	-0.05	-0.08	-0.10	-0.12	-0.13	-0.17	-0.21
360	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.03	-0.04	-0.05	-0.06	-0.08	-0.11	-0.13	-0.15	-0.18	-0.23
370	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.03	-0.04	-0.05	-0.06	-0.09	-0.12	-0.14	-0.16	-0.20	-0.25
373	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.03	-0.04	-0.05	-0.06	-0.09	-0.12	-0.14	-0.16	-0.20	-0.25
$\Delta\Delta_c(k_T V) (P^2-1) 2^{-1} / J g^{-1}$ (deference of two methods)																
273.15	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.03	-0.03	-0.04	-0.05
280	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.03	-0.03	-0.04	-0.05
290	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.03	-0.03	-0.03	-0.04	-0.05
298.15	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.03	-0.03	-0.04	-0.05	-0.06
300	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.03	-0.03	-0.04	-0.05	-0.06
310	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.03	-0.04	-0.04	-0.05	-0.06
320	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.03	-0.04	-0.04	-0.06	-0.07
330	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.03	-0.04	-0.04	-0.05	-0.06	-0.07
340	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.03	-0.04	-0.04	-0.05	-0.06	-0.08
350	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.03	-0.04	-0.05	-0.05	-0.07	-0.08
360	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.03	-0.04	-0.05	-0.06	-0.07	-0.09
370	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.02	-0.03	-0.05	-0.05	-0.06	-0.08	-0.09
373	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.02	-0.03	-0.05	-0.05	-0.06	-0.08	-0.10

The differences between two procedures are shown without rounding of the correction values.