

Appendix 2.

Correlations between physicochemical properties of octanes used in present study.

	BON	RON	MON	Tc ² /Pc	C	S	R ²	ω	αc	Tc/Pc	BP/Tc	A	ΔHv	BP	ΔHf°g	CED	Sol.par.	B	ST	Pc	Tc	d	V _m	n _D	MR	dc	Vc	logVP	Zc
BON	1																												
RON	0.99	1																											
MON	0.98	0.98	1																										
Tc ² /Pc	-0.99	-0.98	-0.98	1																									
C	<i>0.88</i>	<i>0.89</i>	<i>0.87</i>	-0.91	1																								
S	<i>-0.87</i>	<i>-0.89</i>	<i>-0.85</i>	<i>0.89</i>	<i>-0.89</i>	1																							
R ²	-0.94	-0.94	-0.92	0.93	<i>-0.83</i>	<i>0.83</i>	1																						
ω	-0.95	-0.95	-0.93	0.96	-0.96	0.93	<i>0.88</i>	1																					
αc	-0.95	-0.95	-0.93	0.94	<i>-0.89</i>	0.90	0.94	0.95	1																				
Tc/Pc	-0.91	-0.91	-0.91	<i>0.89</i>	<i>-0.85</i>	<i>0.85</i>	<i>0.87</i>	0.95	0.94	1																			
BP/Tc	-0.90	-0.91	<i>-0.89</i>	<i>0.90</i>	-0.91	<i>0.89</i>	<i>0.85</i>	0.97	0.94	0.99	1																		
A	<i>-0.89</i>	<i>-0.87</i>	<i>-0.85</i>	0.91	<i>-0.81</i>	<i>0.83</i>	<i>0.80</i>	<i>0.85</i>	<i>0.81</i>	<i>0.68</i>	<i>0.72</i>	1																	
ΔHv	<i>-0.85</i>	<i>-0.84</i>	<i>-0.81</i>	<i>0.89</i>	<i>-0.85</i>	<i>0.80</i>	<i>0.78</i>	<i>0.83</i>	<i>0.76</i>	<i>0.63</i>	<i>0.69</i>	0.97	1																
BP	<i>-0.66</i>	<i>-0.63</i>	<i>-0.62</i>	<i>0.71</i>	<i>-0.61</i>	<i>0.56</i>	<i>0.60</i>	<i>0.55</i>	<i>0.50</i>	<i>0.31</i>	<i>0.36</i>	<i>0.86</i>	0.91	1															
ΔHf°g	<i>0.55</i>	<i>0.55</i>	<i>0.52</i>	<i>-0.60</i>	<i>0.57</i>	<i>-0.62</i>	<i>-0.47</i>	<i>-0.50</i>	<i>-0.46</i>	<i>-0.24</i>	<i>-0.31</i>	<i>-0.80</i>	<i>-0.83</i>	-0.91	1														
CED	<i>-0.49</i>	<i>-0.47</i>	<i>-0.45</i>	<i>0.56</i>	<i>-0.52</i>	<i>0.46</i>	<i>0.43</i>	<i>0.43</i>	<i>0.35</i>	<i>0.15</i>	<i>0.22</i>	<i>0.79</i>	<i>0.86</i>	0.97	-0.92	1													
Sol.par.	<i>-0.49</i>	<i>-0.47</i>	<i>-0.45</i>	<i>0.56</i>	<i>-0.52</i>	<i>0.46</i>	<i>0.43</i>	<i>0.43</i>	<i>0.35</i>	<i>0.15</i>	<i>0.22</i>	<i>0.79</i>	<i>0.86</i>	0.97	-0.91	1.00	1												
B	<i>-0.53</i>	<i>-0.50</i>	<i>-0.49</i>	<i>0.57</i>	<i>-0.40</i>	<i>0.41</i>	<i>0.46</i>	<i>0.38</i>	<i>0.35</i>	<i>0.15</i>	<i>0.18</i>	<i>0.79</i>	<i>0.81</i>	0.96	<i>-0.87</i>	0.94	0.94	1											
ST	<i>-0.24</i>	<i>-0.22</i>	<i>-0.20</i>	<i>0.30</i>	<i>-0.24</i>	<i>0.18</i>	<i>0.20</i>	<i>0.13</i>	<i>0.08</i>	<i>-0.16</i>	<i>-0.10</i>	<i>0.57</i>	<i>0.64</i>	<i>0.88</i>	<i>-0.85</i>	0.94	0.94	0.91	1										
Pc	<i>0.71</i>	<i>0.72</i>	<i>0.72</i>	<i>-0.67</i>	<i>0.70</i>	<i>-0.69</i>	<i>-0.68</i>	<i>-0.80</i>	<i>-0.80</i>	-0.93	-0.91	<i>-0.40</i>	<i>-0.34</i>	<i>0.04</i>	<i>-0.08</i>	<i>0.19</i>	<i>0.19</i>	<i>0.21</i>	<i>0.49</i>	1									
Tc	<i>-0.05</i>	<i>-0.02</i>	<i>-0.02</i>	<i>0.11</i>	<i>0.00</i>	<i>-0.04</i>	<i>0.03</i>	<i>-0.10</i>	<i>-0.13</i>	<i>-0.35</i>	<i>-0.32</i>	<i>0.38</i>	<i>0.46</i>	<i>0.77</i>	<i>-0.71</i>	<i>0.83</i>	<i>0.83</i>	<i>0.85</i>	0.96	<i>0.66</i>	1								
d	<i>0.40</i>	<i>0.42</i>	<i>0.43</i>	<i>-0.35</i>	<i>0.35</i>	<i>-0.39</i>	<i>-0.40</i>	<i>-0.49</i>	<i>-0.53</i>	<i>-0.73</i>	<i>-0.67</i>	<i>-0.03</i>	<i>0.06</i>	<i>0.42</i>	<i>-0.44</i>	<i>0.57</i>	<i>0.57</i>	<i>0.54</i>	<i>0.79</i>	0.91	<i>0.89</i>	1							
V _m	<i>-0.40</i>	<i>-0.41</i>	<i>-0.43</i>	<i>0.34</i>	<i>-0.34</i>	<i>0.38</i>	<i>0.39</i>	<i>0.48</i>	<i>0.52</i>	<i>0.72</i>	<i>0.67</i>	<i>0.02</i>	<i>-0.07</i>	<i>-0.43</i>	<i>0.44</i>	<i>-0.57</i>	<i>-0.57</i>	<i>-0.54</i>	<i>-0.79</i>	-0.91	<i>-0.89</i>	-1.00	1						
n _D	<i>0.33</i>	<i>0.35</i>	<i>0.36</i>	<i>-0.27</i>	<i>0.30</i>	<i>-0.33</i>	<i>-0.33</i>	<i>-0.43</i>	<i>-0.47</i>	<i>-0.67</i>	<i>-0.62</i>	<i>0.04</i>	<i>0.13</i>	<i>0.48</i>	<i>-0.48</i>	<i>0.61</i>	<i>0.62</i>	<i>0.60</i>	<i>0.82</i>	<i>0.87</i>	0.91	0.98	-0.99	1					
MR	<i>-0.51</i>	<i>-0.53</i>	<i>-0.55</i>	<i>0.48</i>	<i>-0.43</i>	<i>0.47</i>	<i>0.51</i>	<i>0.57</i>	<i>0.61</i>	<i>0.78</i>	<i>0.71</i>	<i>0.18</i>	<i>0.10</i>	<i>-0.23</i>	<i>0.28</i>	<i>-0.39</i>	<i>-0.39</i>	<i>-0.34</i>	<i>-0.62</i>	<i>-0.89</i>	<i>-0.72</i>	-0.91	0.91	<i>-0.83</i>	1				
dc	<i>0.68</i>	<i>0.66</i>	<i>0.68</i>	<i>-0.65</i>	<i>0.56</i>	<i>-0.54</i>	<i>-0.55</i>	<i>-0.70</i>	<i>-0.65</i>	<i>-0.78</i>	<i>-0.75</i>	<i>-0.48</i>	<i>-0.40</i>	<i>-0.14</i>	<i>0.04</i>	<i>0.01</i>	<i>0.01</i>	<i>-0.06</i>	<i>0.24</i>	<i>0.76</i>	<i>0.37</i>	<i>0.66</i>	<i>-0.66</i>	<i>0.64</i>	<i>-0.62</i>	1			
Vc	<i>-0.69</i>	<i>-0.67</i>	<i>-0.70</i>	<i>0.66</i>	<i>-0.57</i>	<i>0.55</i>	<i>0.56</i>	<i>0.71</i>	<i>0.66</i>	<i>0.79</i>	<i>0.76</i>	<i>0.49</i>	<i>0.41</i>	<i>0.15</i>	<i>-0.04</i>	<i>0.00</i>	<i>-0.01</i>	<i>0.06</i>	<i>-0.24</i>	<i>-0.77</i>	<i>-0.36</i>	<i>-0.66</i>	<i>0.67</i>	<i>-0.64</i>	<i>0.63</i>	-1.00	1		
logVP	<i>0.64</i>	<i>0.63</i>	<i>0.61</i>	<i>-0.68</i>	<i>0.58</i>	<i>-0.52</i>	<i>-0.57</i>	<i>-0.58</i>	<i>-0.53</i>	<i>-0.41</i>	<i>-0.44</i>	<i>-0.81</i>	<i>-0.80</i>	<i>-0.80</i>	<i>0.71</i>	<i>-0.76</i>	<i>-0.76</i>	<i>-0.77</i>	<i>-0.64</i>	<i>0.14</i>	<i>-0.51</i>	<i>-0.19</i>	<i>0.19</i>	<i>-0.28</i>	<i>-0.05</i>	<i>0.31</i>	<i>-0.31</i>	1	
Zc	<i>0.31</i>	<i>0.35</i>	<i>0.31</i>	<i>-0.33</i>	<i>0.43</i>	<i>-0.44</i>	<i>-0.45</i>	<i>-0.35</i>	<i>-0.40</i>	<i>-0.30</i>	<i>-0.32</i>	<i>-0.28</i>	<i>-0.33</i>	<i>-0.24</i>	<i>0.29</i>	<i>-0.23</i>	<i>-0.23</i>	<i>-0.12</i>	<i>-0.13</i>	<i>0.24</i>	<i>-0.02</i>	<i>0.08</i>	<i>-0.07</i>	<i>0.02</i>	<i>-0.20</i>	<i>-0.36</i>	<i>0.35</i>	<i>0.14</i>	1
	BON	RON	MON	Tc ² /Pc	C	S	R ²	ω	αc	Tc/Pc	BP/Tc	A	ΔHv	BP	ΔHf°g	CED	Sol.par.	B	ST	Pc	Tc	d	V _m	n _D	MR	dc	Vc	logVP	Zc

Bold: R > 0.95

Bold: 0.95 > R > 0.90

Italics: 0.90 > R > 0.80

1.00: rounded to