

Supplementary data

Table S1. Liquid composition (molar fractions) of the ten mixtures of triacetin(1)-diacetin(2)-monoacetin(3)-glycerol(4).

n	x₁	x₂	x₃	x₄
1	0.1689	0.3832	0.3497	0.0982
2	0.0465	0.1518	0.5246	0.2770
3	0.0544	0.6140	0.3159	0.0157
4	0.1890	0.5218	0.2704	0.0189
5	0.3968	0.3788	0.2051	0.0194
6	0.6501	0.2104	0.1215	0.0180
7	0.0060	0.3079	0.6438	0.0422
8	0.1944	0.2486	0.5189	0.0382
9	0.3909	0.1873	0.3925	0.0293
10	0.6079	0.1148	0.2430	0.0344

Table S2. Experimental vapor composition (molar fractions) and bubble temperature of the liquid mixtures shown in Table S1.

n	Pressure = 5 mmHg					Pressure = 10 mmHg					Pressure = 50 mmHg				
	y ₁	y ₂	y ₃	y ₄	T (°C)	y ₁	y ₂	y ₃	y ₄	T (°C)	y ₁	y ₂	y ₃	y ₄	T (°C)
1	0.3036	0.3486	0.2784	0.0693	128.2	0.2850	0.3497	0.2885	0.0768	143.2	0.2351	0.3847	0.3045	0.0757	180.8
2	0.1800	0.2189	0.4546	0.1465	132.1	0.1822	0.2014	0.4348	0.1815	145.3	0.1605	0.2031	0.4506	0.1858	181.9
3	0.1042	0.5953	0.2826	0.0179	129.3	0.0998	0.6011	0.2821	0.0169	143.3	0.1070	0.5911	0.2835	0.0184	179.5
4	0.2929	0.4493	0.2343	0.0235	128.9	0.2783	0.4633	0.2396	0.0188	142.8	0.2657	0.4631	0.2445	0.0267	178.9
5	0.4899	0.3069	0.1857	0.0175	127.7	0.4860	0.3115	0.1843	0.0182	140.6	0.4646	0.3290	0.1849	0.0214	177.2
6	0.6788	0.1700	0.1294	0.0219	126.0	0.6895	0.1680	0.1225	0.0200	139.7	0.6750	0.1821	0.1214	0.0215	176.0
7	0.0375	0.3760	0.5531	0.0333	132.6	0.0160	0.3749	0.5752	0.0338	146.1	0.0150	0.3733	0.5745	0.0373	183.0
8	0.3470	0.2247	0.4003	0.0279	127.8	0.3363	0.2283	0.4064	0.0290	142.6	0.3062	0.2388	0.4239	0.0311	178.0
9	0.5132	0.1483	0.3084	0.0301	126.6	0.5044	0.1471	0.3083	0.0402	140.4	0.4914	0.1568	0.3227	0.0291	175.8
10	0.6526	0.0903	0.2227	0.0344	126.0	0.6564	0.0897	0.2184	0.0355	139.1	0.6523	0.0946	0.2185	0.0346	175.6

(1): Triacetin; (2): Diacetin; (3): Monoacetin; (4): Glycerol

Table S3. Calculated vapor composition (molar fractions) and bubble temperature of the liquid mixtures shown in Table S1. Pressure vapor of diacetin and monoacetin calculated with fragment contribution model¹⁸. Activity coefficient = 1 (ideal liquid mixture).

n	Pressure = 5 mmHg					Pressure = 10 mmHg					Pressure = 50 mmHg				
	y ₁	y ₂	y ₃	y ₄	T (°C)	y ₁	y ₂	y ₃	y ₄	T (°C)	y ₁	y ₂	y ₃	y ₄	T (°C)
1	0.2425	0.4682	0.2593	0.0301	133.2	0.2490	0.4526	0.2657	0.0327	146.9	0.2624	0.4175	0.2806	0.0396	182.7
2	0.0923	0.2497	0.5375	0.1204	139.2	0.0930	0.2375	0.5411	0.1284	153.1	0.0938	0.2106	0.5474	0.1483	189.0
3	0.0729	0.7040	0.2186	0.0044	131.9	0.0761	0.6911	0.2278	0.0049	145.9	0.0834	0.6604	0.2500	0.0062	182.4
4	0.2419	0.5741	0.1789	0.0051	131.0	0.2505	0.5591	0.1848	0.0056	144.8	0.2692	0.5249	0.1990	0.0069	180.7
5	0.4756	0.3925	0.1270	0.0049	129.8	0.4868	0.3781	0.1297	0.0053	143.3	0.5105	0.3469	0.1362	0.0064	178.4
6	0.7225	0.2034	0.0698	0.0042	128.5	0.7311	0.1939	0.0705	0.0045	141.6	0.7486	0.1740	0.0722	0.0052	175.8
7	0.0099	0.4270	0.5480	0.0150	135.7	0.0102	0.4124	0.5611	0.0163	149.7	0.0107	0.3792	0.5904	0.0197	185.9
8	0.2851	0.3098	0.3931	0.0120	133.6	0.2904	0.2972	0.3995	0.0129	147.2	0.3005	0.2697	0.4145	0.0153	182.6
9	0.5140	0.2112	0.2666	0.0082	131.5	0.5204	0.2015	0.2694	0.0087	144.9	0.5327	0.1809	0.2761	0.0103	179.7
10	0.7237	0.1182	0.1495	0.0086	129.7	0.7285	0.1122	0.1501	0.0091	142.9	0.7376	0.0996	0.1521	0.0106	177.0

(1): Triacetin; (2): Diacetin; (3): Monoacetin; (4): Glycerol

Table S4. Calculated vapor composition (molar fractions) and bubble temperature of the liquid mixtures shown in Table S1. Pressure vapor of diacetin and monoacetin calculated with group contribution model¹⁷. Activity coefficient = 1 (ideal liquid mixture).

n	Pressure = 5 mmHg					Pressure = 10 mmHg					Pressure = 50 mmHg				
	y ₁	y ₂	y ₃	y ₄	T (°C)	y ₁	y ₂	y ₃	y ₄	T (°C)	y ₁	y ₂	y ₃	y ₄	T (°C)
1	0.1028	0.6612	0.2240	0.0119	117.9	0.1472	0.6234	0.2109	0.0185	136.8	0.2782	0.5067	0.1730	0.0421	184.1
2	0.0538	0.3854	0.4936	0.0673	129.2	0.0751	0.3607	0.4624	0.1018	148.7	0.1316	0.2845	0.3695	0.2144	197.3
3	0.0215	0.8204	0.1569	0.0012	110.7	0.0336	0.8099	0.1545	0.0020	130.4	0.0817	0.7651	0.1472	0.0061	181.9
4	0.0873	0.7639	0.1471	0.0017	113.3	0.1282	0.7290	0.1401	0.0027	132.1	0.2596	0.6147	0.1190	0.0067	179.9
5	0.2318	0.6378	0.1282	0.0023	117.2	0.3076	0.5740	0.1152	0.0032	134.6	0.4916	0.4179	0.0844	0.0061	177.5
6	0.4939	0.4145	0.0888	0.0028	121.7	0.5764	0.3460	0.0741	0.0035	137.1	0.7299	0.2180	0.0470	0.0051	175.3
7	0.0040	0.5577	0.4327	0.0056	119.3	0.0062	0.5544	0.4298	0.0095	139.9	0.0152	0.5355	0.4205	0.0288	194.4
8	0.1428	0.4799	0.3717	0.0057	121.1	0.1992	0.4466	0.3456	0.0086	139.8	0.3554	0.3515	0.2747	0.0184	186.6
9	0.3154	0.3825	0.2973	0.0048	122.8	0.3980	0.3351	0.2604	0.0065	139.7	0.5770	0.2309	0.1809	0.0112	181.5
10	0.5468	0.2504	0.1965	0.0064	124.7	0.6238	0.2065	0.1620	0.0077	139.9	0.7609	0.1275	0.1007	0.0110	177.7

(1): Triacetin; (2): Diacetin; (3): Monoacetin; (4): Glycerol

Table S5. Calculated vapor composition (molar fractions) and bubble temperature of the liquid mixtures shown in Table S1. Pressure vapor of diacetin and monoacetin calculated with fragment contribution model¹⁸. Activity coefficient calculated using UNIFAC model.

n	Pressure = 5 mmHg					Pressure = 10 mmHg					Pressure = 50 mmHg				
	y ₁	y ₂	y ₃	y ₄	T (°C)	y ₁	y ₂	y ₃	y ₄	T (°C)	y ₁	y ₂	y ₃	y ₄	T (°C)
1	0.3338	0.3810	0.2254	0.0598	128.1	0.3372	0.3687	0.2307	0.0635	141.6	0.3427	0.3414	0.2433	0.0726	176.6
2	0.2530	0.2583	0.3708	0.1179	132.3	0.2483	0.2463	0.3788	0.1265	145.9	0.2353	0.2199	0.3968	0.1481	181.4
3	0.1088	0.6492	0.2306	0.0115	129.7	0.1116	0.6369	0.2391	0.0123	143.6	0.1176	0.6083	0.2596	0.0145	179.7
4	0.2982	0.4912	0.1953	0.0152	127.9	0.3050	0.4786	0.2003	0.0161	141.4	0.3191	0.4503	0.2122	0.0183	176.8
5	0.4862	0.3311	0.1624	0.0203	126.4	0.4953	0.3196	0.1640	0.0210	139.6	0.5144	0.2949	0.1680	0.0228	174.2
6	0.6612	0.1885	0.1211	0.0292	125.5	0.6705	0.1800	0.1200	0.0295	138.6	0.6900	0.1621	0.1179	0.0301	172.5
7	0.0228	0.4546	0.4979	0.0248	133.4	0.0228	0.4388	0.5119	0.0266	147.3	0.0225	0.4026	0.5438	0.0311	183.4
8	0.3946	0.2498	0.3328	0.0228	128.2	0.3964	0.2406	0.3390	0.0241	141.6	0.3981	0.2205	0.3540	0.0273	176.4
9	0.5443	0.1625	0.2698	0.0234	126.3	0.5482	0.1559	0.2717	0.0242	139.5	0.5550	0.1418	0.2768	0.0263	173.6
10	0.6581	0.0973	0.2031	0.0415	125.4	0.6633	0.0927	0.2018	0.0422	138.3	0.6737	0.0832	0.1993	0.0437	172.0

(1): Triacetin; (2): Diacetin; (3): Monoacetin; (4): Glycerol

Table S6. Calculated vapor composition (molar fractions) and bubble temperature of the liquid mixtures shown in Table S1. Pressure vapor of diacetin and monoacetin calculated with group contribution model¹⁷. Activity coefficient calculated using UNIFAC model.

n	Pressure = 5 mmHg					Pressure = 10 mmHg					Pressure = 50 mmHg				
	y ₁	y ₂	y ₃	y ₄	T (°C)	y ₁	y ₂	y ₃	y ₄	T (°C)	y ₁	y ₂	y ₃	y ₄	T (°C)
1	0.1500	0.6013	0.2233	0.0255	113.8	0.2033	0.5549	0.2049	0.0369	131.8	0.3408	0.4288	0.1582	0.0722	176.5
2	0.1393	0.4275	0.3731	0.0601	120.9	0.1803	0.3881	0.3436	0.0880	139.3	0.2719	0.2877	0.2658	0.1746	185.0
3	0.0331	0.7882	0.1754	0.0033	108.8	0.0501	0.7740	0.1706	0.0053	128.2	0.1125	0.7169	0.1569	0.0138	178.7
4	0.1129	0.7042	0.1774	0.0055	110.9	0.1606	0.6657	0.1654	0.0082	129.2	0.3022	0.5470	0.1335	0.0173	175.5
5	0.2385	0.5722	0.1794	0.0098	113.9	0.3141	0.5145	0.1582	0.0132	131.0	0.4936	0.3735	0.1111	0.0219	173.2
6	0.4280	0.3918	0.1612	0.0190	117.9	0.5132	0.3313	0.1329	0.0226	133.5	0.6765	0.2127	0.0813	0.0295	172.0
7	0.0087	0.5902	0.3925	0.0086	115.7	0.0130	0.5828	0.3898	0.0144	136.0	0.0289	0.5513	0.3788	0.0410	189.6
8	0.2035	0.4280	0.3573	0.0112	116.3	0.2695	0.3902	0.3243	0.0159	134.1	0.4317	0.2940	0.2446	0.0298	178.3
9	0.3309	0.3191	0.3360	0.0139	117.5	0.4126	0.2791	0.2902	0.0180	134.0	0.5843	0.1919	0.1959	0.0278	174.8
10	0.4698	0.2147	0.2860	0.0295	119.4	0.5504	0.1799	0.2348	0.0349	134.8	0.6977	0.1138	0.1432	0.0453	172.8

(1): Triacetin; (2): Diacetin; (3): Monoacetin; (4): Glycerol

Table S7. Calculated vapor composition (molar fractions) and bubble temperature of the liquid mixtures shown in Table S1. Pressure vapor of diacetin and monoacetin calculated with fragment contribution model¹⁸. Activity coefficient calculated using UNIFAC Dortmund model.

n	Pressure = 5 mmHg					Pressure = 10 mmHg					Pressure = 50 mmHg				
	y ₁	y ₂	y ₃	y ₄	T (°C)	y ₁	y ₂	y ₃	y ₄	T (°C)	y ₁	y ₂	y ₃	y ₄	T (°C)
1	0.2984	0.4114	0.2381	0.0521	129.8	0.3009	0.4001	0.2446	0.0544	143.5	0.3056	0.3757	0.2603	0.0584	179.3
2	0.1862	0.2670	0.4229	0.1239	134.7	0.1790	0.2539	0.4348	0.1323	148.6	0.1598	0.2243	0.4646	0.1513	185.0
3	0.0934	0.6678	0.2294	0.0093	130.4	0.0956	0.6568	0.2378	0.0098	144.4	0.1001	0.6315	0.2577	0.0106	180.8
4	0.2751	0.5194	0.1936	0.0120	129.0	0.2813	0.5080	0.1983	0.0124	142.7	0.2951	0.4826	0.2094	0.0129	178.5
5	0.4809	0.3512	0.1534	0.0145	127.6	0.4908	0.3403	0.1544	0.0146	141.0	0.5127	0.3165	0.1564	0.0144	176.0
6	0.6853	0.1933	0.1036	0.0177	126.7	0.6960	0.1848	0.1019	0.0173	139.8	0.7190	0.1669	0.0982	0.0159	174.1
7	0.0171	0.4495	0.5113	0.0221	134.0	0.0169	0.4331	0.5266	0.0234	148.0	0.0161	0.3957	0.5623	0.0259	184.4
8	0.3536	0.2714	0.3549	0.0201	130.0	0.3541	0.2624	0.3626	0.0209	143.6	0.3538	0.2431	0.3810	0.0222	179.1
9	0.5320	0.1778	0.2719	0.0183	128.1	0.5364	0.1713	0.2738	0.0186	141.4	0.5457	0.1575	0.2781	0.0186	176.2
10	0.6813	0.1038	0.1870	0.0279	126.9	0.6884	0.0992	0.1848	0.0275	140.0	0.7039	0.0897	0.1803	0.0260	174.2

(1): Triacetin; (2): Diacetin; (3): Monoacetin; (4): Glycerol

Table S8. Calculated vapor composition (molar fractions) and bubble temperature of the liquid mixtures shown in Table S1. Pressure vapor of diacetin and monoacetin calculated with group contribution model¹⁷. Activity coefficient calculated using UNIFAC Dortmund model.

n	Pressure = 5 mmHg					Pressure = 10 mmHg					Pressure = 50 mmHg				
	y ₁	y ₂	y ₃	y ₄	T (°C)	y ₁	y ₂	y ₃	y ₄	T (°C)	y ₁	y ₂	y ₃	y ₄	T (°C)
1	0.1321	0.6214	0.2245	0.0220	115.0	0.1802	0.5801	0.2079	0.0318	133.4	0.3114	0.4640	0.1650	0.0595	179.8
2	0.1048	0.4272	0.4043	0.0637	123.3	0.1346	0.3907	0.3797	0.0950	142.4	0.1981	0.2955	0.3119	0.1945	190.9
3	0.0286	0.7970	0.1718	0.0027	109.2	0.0429	0.7857	0.1671	0.0043	128.8	0.0968	0.7389	0.1541	0.0102	180.0
4	0.1029	0.7220	0.1707	0.0044	111.5	0.1470	0.6874	0.1592	0.0064	130.2	0.2819	0.5769	0.1289	0.0123	177.4
5	0.2353	0.5920	0.1656	0.0072	115.0	0.3109	0.5347	0.1452	0.0093	132.3	0.4933	0.3922	0.1007	0.0139	175.2
6	0.4526	0.3986	0.1369	0.0120	119.4	0.5394	0.3359	0.1111	0.0136	135.0	0.7039	0.2145	0.0659	0.0156	173.6
7	0.0067	0.5843	0.4010	0.0079	116.5	0.0099	0.5769	0.4001	0.0131	137.0	0.0213	0.5479	0.3958	0.0350	191.6
8	0.1809	0.4462	0.3630	0.0099	117.7	0.2413	0.4118	0.3330	0.0139	136.0	0.3967	0.3204	0.2580	0.0249	181.9
9	0.3240	0.3382	0.3268	0.0111	119.1	0.4057	0.2979	0.2823	0.0140	136.0	0.5817	0.2081	0.1903	0.0198	177.7
10	0.4960	0.2254	0.2581	0.0205	121.3	0.5784	0.1886	0.2096	0.0233	136.7	0.7289	0.1193	0.1249	0.0269	175.0

(1): Triacetin; (2): Diacetin; (3): Monoacetin; (4): Glycerol