

Supplementary Data

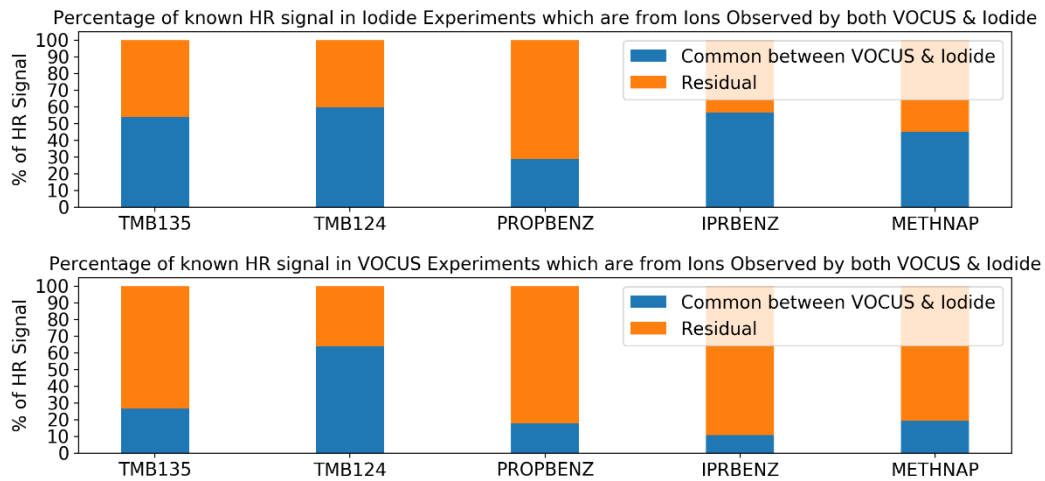


Figure S1 - Signal Contribution of Ions observed by both Vocus & I-CIMS during OH experiments (I-CIMS particle phase) and Vocus (gas phase)

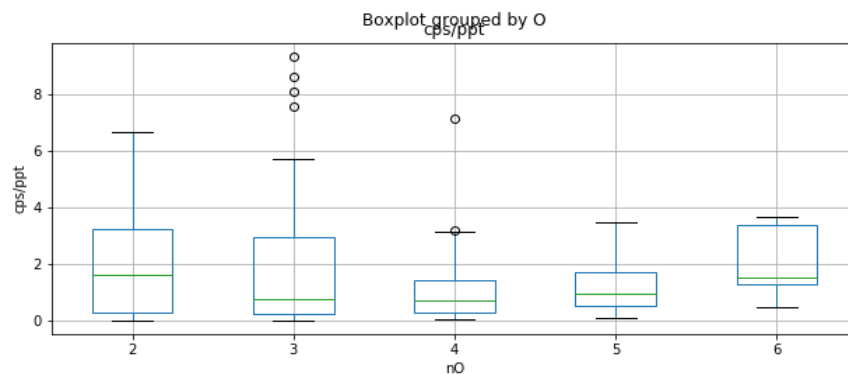


Figure S2 – Derivation of relative sensitivities from measured ion signals common between both iodide and Vocus in the gas phase under low-NOx conditions.

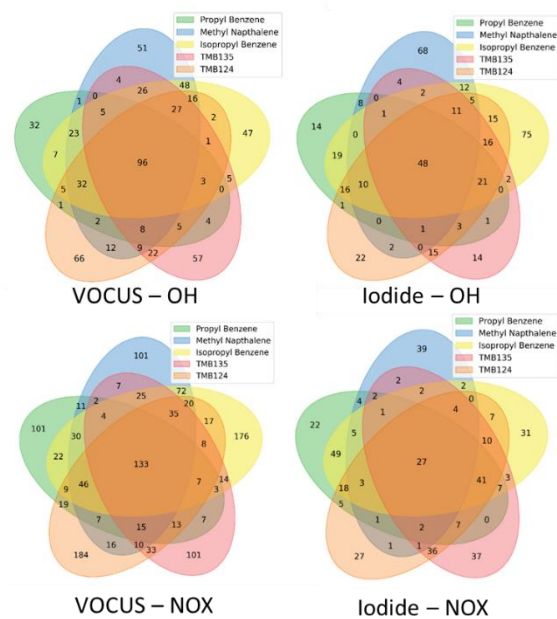


Figure S3- Venn Diagrams showing number of ions overlap in ions observed from all precursors under different conditions

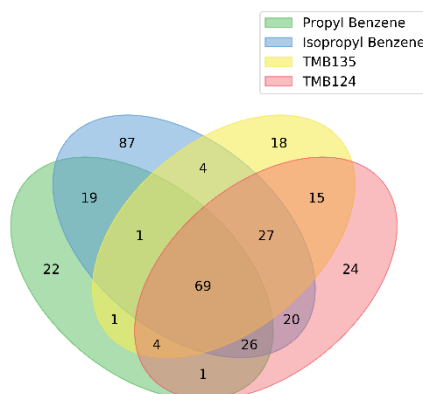


Figure S4- Venn showing overlap in number of ion formulas for C₉-aromatics

Table S1. Comparison with Ions observed from LC-MS by (Sato et al., 2012)

Ion	I-CIMS	VOCUS
C ₃ H ₄ O ₃	✓	✓
C ₆ H ₈ O ₃	✓	✗
C ₆ H ₁₀ O ₅	✓	✗
C ₈ H ₁₀ O ₄	✓	✗
C ₇ H ₁₀ O ₅	✓	✗

C9H12O4	✓	x
C8H10O5	✓	x
C7H10O7	✓	x
C7H12O6	✓	x
C9H12O5	✓	x
C9H14O5	✓	x
C8H12O6	✓	x
C9H12O6	✓	x
C9H14O6	✓	x
C9H12O7	✓	x
C9H14O7	✓	x

Top 20 Ions by Signal for Each Precursor and Set of Conditions

sumFormula	ion	x0	commonions	uniqueions	mcmions
C3H4O5	C3H4O5I-	246.9109	TRUE	FALSE	TRUE
C4H4O6	C4H4O6I-	274.9058	TRUE	FALSE	TRUE
C4H6O6	C4H6O6I-	276.9215	TRUE	FALSE	FALSE
C3H4O4	C3H4O4I-	230.916	TRUE	FALSE	TRUE
C4H4O5	C4H4O5I-	258.9109	TRUE	FALSE	TRUE
C5H6O6	C5H6O6I-	288.9215	TRUE	FALSE	FALSE
C4H6O5	C4H6O5I-	260.9265	TRUE	FALSE	TRUE
C5H12O4	C5H12O4I-	262.9786	FALSE	FALSE	FALSE
C5H10O4	C5H10O4I-	260.9629	FALSE	FALSE	TRUE
C4H4O4	C4H4O4I-	242.916	TRUE	FALSE	TRUE
C6H8O6	C6H8O6I-	302.9371	FALSE	FALSE	FALSE
C5H6O5	C5H6O5I-	272.9265	TRUE	FALSE	FALSE
C2H4O3	C2H4O3I-	202.9211	TRUE	FALSE	TRUE
C6H6O6	C6H6O6I-	300.9215	TRUE	FALSE	FALSE
C8H12O6	C8H12O6I-	330.9684	TRUE	FALSE	TRUE
C5H8O4	C5H8O4I-	258.9473	FALSE	FALSE	FALSE
C9H12O6	C9H12O6I-	342.9684	TRUE	FALSE	TRUE
C8H10O6	C8H10O6I-	328.9528	TRUE	FALSE	FALSE
C7H10O6	C7H10O6I-	316.9528	FALSE	FALSE	TRUE
C5H8O5	C5H8O5I-	274.9422	FALSE	FALSE	FALSE

Table S2 - Top 20 IPRBENZ LOW-NOX I-CIMS

sumFormula	ion	x0	commonions	uniqueions	mcmions
C2H2O4	C2H2O4I-	216.9003	FALSE	FALSE	TRUE
C3H4O5	C3H4O5I-	246.9109	TRUE	FALSE	TRUE
C4H4O6	C4H4O6I-	274.9058	TRUE	FALSE	TRUE
C4H4O5	C4H4O5I-	258.9109	TRUE	FALSE	TRUE
C3H4O4	C3H4O4I-	230.916	TRUE	FALSE	TRUE
C4H4O4	C4H4O4I-	242.916	TRUE	FALSE	TRUE
C4H2O4	C4H2O4I-	240.9003	TRUE	FALSE	TRUE
C5H6O6	C5H6O6I-	288.9215	TRUE	FALSE	FALSE
C5H6O5	C5H6O5I-	272.9265	TRUE	FALSE	FALSE
C8H4O3	C8H4O3I-	274.9211	FALSE	TRUE	FALSE
C2H4O3	C2H4O3I-	202.9211	TRUE	FALSE	TRUE
C4H6O5	C4H6O5I-	260.9265	TRUE	FALSE	TRUE
C2H2O3	C2H2O3I-	200.9054	FALSE	FALSE	TRUE
C5H4O5	C5H4O5I-	270.9109	FALSE	FALSE	FALSE
C4H6O6	C4H6O6I-	276.9215	TRUE	FALSE	FALSE
C4H2O5	C4H2O5I-	256.8952	FALSE	FALSE	TRUE
C4H6O4	C4H6O4I-	244.9316	TRUE	FALSE	TRUE
C8H4O2	C8H4O2I-	258.9262	FALSE	TRUE	FALSE
C6H6O6	C6H6O6I-	300.9215	TRUE	FALSE	FALSE
C6H4O6	C6H4O6I-	298.9058	TRUE	FALSE	FALSE

Table S3 Top 20 PROP BENZ Low-NOX I-CIMS

sumFormula	ion	x0	commonions	uniqueions	mcmions
C4H4O6	C4H4O6I-	274.9058	TRUE	FALSE	TRUE
C5H6O5	C5H6O5I-	272.9265	TRUE	FALSE	TRUE
C7H10O6	C7H10O6I-	316.9528	FALSE	FALSE	FALSE
C9H14O6	C9H14O6I-	344.9841	TRUE	FALSE	TRUE
C9H12O6	C9H12O6I-	342.9684	TRUE	FALSE	TRUE
C6H8O5	C6H8O5I-	286.9422	FALSE	FALSE	TRUE
C7H10O5	C7H10O5I-	300.9578	FALSE	FALSE	FALSE
C7H8O6	C7H8O6I-	314.9371	TRUE	FALSE	FALSE
C9H12O7	C9H12O7I-	358.9633	TRUE	FALSE	FALSE
C8H10O6	C8H10O6I-	328.9528	TRUE	FALSE	FALSE
C3H4O5	C3H4O5I-	246.9109	TRUE	FALSE	TRUE
C6H8O6	C6H8O6I-	302.9371	FALSE	FALSE	FALSE
C4H4O4	C4H4O4I-	242.916	TRUE	FALSE	TRUE
C5H8O5	C5H8O5I-	274.9422	FALSE	FALSE	TRUE
C4H2O4	C4H2O4I-	240.9003	TRUE	FALSE	FALSE
C5H6O6	C5H6O6I-	288.9215	TRUE	FALSE	TRUE
C3H4O4	C3H4O4I-	230.916	TRUE	FALSE	TRUE
C2H2O3	C2H2O3I-	200.9054	FALSE	FALSE	TRUE
C8H12O6	C8H12O6I-	330.9684	TRUE	FALSE	FALSE
C4H4O5	C4H4O5I-	258.9109	TRUE	FALSE	TRUE

Table S4 Top 20 TMB124 Low NOx I-CIMS

sumFormula	ion	x0	commonions	uniqueions	mcmions
C2H2O4	C2H2O4I-	216.9003	FALSE	FALSE	TRUE
C7H10O6	C7H10IO6-	316.9528	FALSE	FALSE	FALSE
C5H6O5	C5H6O5I-	272.9265	TRUE	FALSE	TRUE
C9H12O6	C9H12IO6-	342.9684	TRUE	FALSE	FALSE
C9H14O6	C9H14IO6-	344.9841	TRUE	FALSE	TRUE
C8H10O6	C8H10IO6-	328.9528	TRUE	FALSE	FALSE
C7H10O5	C7H10IO5-	300.9578	FALSE	FALSE	FALSE
C8H10O7	C8H10IO7-	344.9477	TRUE	FALSE	FALSE
C7H8O6	C7H8IO6-	314.9371	TRUE	FALSE	FALSE
C9H12O7	C9H12IO7-	358.9633	TRUE	FALSE	FALSE
C4H4O6	C4H4IO6-	274.9058	TRUE	FALSE	FALSE
C6H8O6	C6H8O6I-	302.9371	FALSE	FALSE	TRUE
C9H14O5	C9H14IO5-	328.9891	TRUE	FALSE	TRUE
C8H12O6	C8H12IO6-	330.9684	TRUE	FALSE	FALSE
C3H4O4	C3H4IO4-	230.916	TRUE	FALSE	FALSE
C6H8O5	C6H8O5I-	286.9422	FALSE	FALSE	TRUE
C5H6O6	C5H6O6I-	288.9215	TRUE	FALSE	TRUE
C5H8O5	C5H8O5I-	274.9422	FALSE	FALSE	TRUE
C5H6O4	C5H6O4I-	256.9316	TRUE	FALSE	TRUE
C6H6O6	C6H6IO6-	300.9215	TRUE	FALSE	FALSE

Table S5 TMB135 Low-NO_x I-CIMS

sumFormula	ion	x0	commonions	uniqueions
C3H4O5	C3H4IO5-	246.9109	TRUE	FALSE
C4H4O6	C4H4IO6-	274.9058	TRUE	FALSE
C4H4O5	C4H4IO5-	258.9109	TRUE	FALSE
C2H4O3	C2H4IO3-	202.9211	TRUE	FALSE
C4H4O4	C4H4IO4-	242.916	TRUE	FALSE
C3H4O4	C3H4IO4-	230.916	TRUE	FALSE
C4H2O4	C4H2IO4-	240.9003	TRUE	FALSE
C5H4O5	C5H4IO5-	270.9109	FALSE	FALSE
C4H2O5	C4H2IO5-	256.8952	FALSE	FALSE
C5H6O5	C5H6IO5-	272.9265	TRUE	FALSE
C9H6O4	C9H6IO4-	304.9316	FALSE	FALSE
C6H6O5	C6H6IO5-	284.9265	TRUE	FALSE
C6H4O6	C6H4IO6-	298.9058	TRUE	FALSE
C5H6O6	C5H6IO6-	288.9215	TRUE	FALSE
C5H4O4	C5H4IO4-	254.916	TRUE	FALSE
C6H6O6	C6H6IO6-	300.9215	TRUE	FALSE
C5H6O4	C5H6IO4-	256.9316	TRUE	FALSE
C7H6O5	C7H6IO5-	296.9265	TRUE	FALSE
C10H8O4	C10H8IO4-	318.9473	FALSE	FALSE
C3H2O4	C3H2IO4-	228.9003	TRUE	FALSE

Table S6 METHNAP Low-NO_x I-CIMS

sumFormula	ion	x0	commonions	uniqueions	mcmions
C3H6O3	C3H6O3I-	216.9367	FALSE	FALSE	TRUE
C4H4O4	C4H4O4I-	242.916	TRUE	FALSE	TRUE
C5H6O6	C5H6IO6-	288.9215	FALSE	FALSE	FALSE
C4H4O5	C4H4O5I-	258.9109	TRUE	FALSE	TRUE
C3H4O5	C3H4O5I-	246.9109	TRUE	FALSE	TRUE
C4H4O6	C4H4O6I-	274.9058	FALSE	FALSE	TRUE
C6H6O6	C6H6IO6-	300.9215	FALSE	FALSE	FALSE
C5H6O5	C5H6IO5-	272.9265	TRUE	FALSE	FALSE
C4H6O6	C4H6IO6-	276.9215	FALSE	FALSE	FALSE
C5H4O5	C5H4IO5-	270.9109	FALSE	FALSE	FALSE
C3H4O4	C3H4O4I-	230.916	TRUE	FALSE	TRUE
C4H6O5	C4H6IO5-	260.9265	TRUE	FALSE	TRUE
C6H8O6	C6H8IO6-	302.9371	FALSE	FALSE	FALSE
C4H2O5	C4H2O5I-	256.8952	TRUE	FALSE	TRUE
C6H6O7	C6H6IO7-	316.9164	FALSE	FALSE	FALSE
C8H10O6	C8H10IO6-	328.9528	TRUE	FALSE	FALSE
C5H4O6	C5H4IO6-	286.9058	TRUE	FALSE	FALSE
C6H6O5	C6H6IO5-	284.9265	TRUE	FALSE	FALSE
C8H10O7	C8H10IO7-	344.9477	TRUE	FALSE	FALSE
C9H12O7	C9H12IO7-	358.9633	FALSE	FALSE	FALSE

Table S7 IPRBENZ Medium-NOx I-CIMS

sumFormula	ion	x0	commonions	uniqueions
C4H2O4	C4H2IO4-	240.9003	TRUE	FALSE
C4H4O5	C4H4IO5-	258.9109	TRUE	FALSE
C7H2NO3	C7H2INO3-	274.9085	FALSE	TRUE
C4H4O4	C4H4IO4-	242.916	TRUE	FALSE
C2H4O3	C2H4IO3-	202.9211	TRUE	FALSE
C3H4O4	C3H4IO4-	230.916	TRUE	FALSE
C3H4O5	C3H4IO5-	246.9109	TRUE	FALSE
C8H2NO2	C8H2INO2-	270.9136	FALSE	TRUE
C3H2O5	C3H2IO5-	244.8952	FALSE	FALSE
C3H2O4	C3H2IO4-	228.9003	TRUE	FALSE
C5H6O5	C5H6IO5-	272.9265	TRUE	FALSE
C9H6O4	C9H6IO4-	304.9316	FALSE	TRUE
C4H2O5	C4H2IO5-	256.8952	TRUE	FALSE
C8H4NO3	C8H4INO3-	288.9241	FALSE	TRUE
C9H4NO3	C9H4INO3-	300.9241	FALSE	TRUE
C6H6O5	C6H6IO5-	284.9265	TRUE	FALSE
C5H4O4	C5H4IO4-	254.916	TRUE	FALSE
C6H4O5	C6H4IO5-	282.9109	TRUE	FALSE
C6H4O6	C6H4IO6-	298.9058	TRUE	FALSE
C5H4O6	C5H4IO6-	286.9058	TRUE	FALSE

Table S8 METHNAP Medium-NOx I-CIMS

sumFormula	ion	x0	commonions	uniqueions	mcmions
C2H2O4	C2H2O4I-	216.9003	FALSE	FALSE	TRUE
C3H4O5	C3H4O5I-	246.9109	TRUE	FALSE	TRUE
C4H4O6	C4H4O6I-	274.9058	FALSE	FALSE	TRUE
C4H4O5	C4H4O5I-	258.9109	TRUE	FALSE	TRUE
C4H4O4	C4H4O4I-	242.916	TRUE	FALSE	TRUE
C3H4O4	C3H4O4I-	230.916	TRUE	FALSE	TRUE
C4H2O4	C4H2O4I-	240.9003	TRUE	FALSE	TRUE
C5H6O6	C5H6O6I-	288.9215	FALSE	FALSE	FALSE
C5H6O5	C5H6O5I-	272.9265	TRUE	FALSE	FALSE
C2H4O3	C2H4O3I-	202.9211	TRUE	FALSE	TRUE
C2H2O3	C2H2O3I-	200.9054	FALSE	FALSE	TRUE
C5H4O5	C5H4O5I-	270.9109	FALSE	FALSE	FALSE
C4H6O5	C4H6O5I-	260.9265	TRUE	FALSE	TRUE
C6H6O6	C6H6O6I-	300.9215	FALSE	FALSE	FALSE
C4H2O5	C4H2O5I-	256.8952	TRUE	FALSE	TRUE
C4H6O6	C4H6O6I-	276.9215	FALSE	FALSE	FALSE
C4H6O4	C4H6O4I-	244.9316	TRUE	FALSE	TRUE
C6H4O6	C6H4O6I-	298.9058	TRUE	FALSE	FALSE
C6H8O6	C6H8O6I-	302.9371	FALSE	FALSE	FALSE
C3H2O4	C3H2O4I-	228.9003	TRUE	FALSE	FALSE

Table S9 PROP BENZ Medium-NO_x I-CIMS

sumFormula	ion	x0	commonions	uniqueions	mcmions
C2H2O4	C2H2O4I-	216.9003	FALSE	FALSE	TRUE
C9H12O6	C9H12O6I-	342.9684	FALSE	FALSE	TRUE
C7H10O6	C7H10O6I-	316.9528	TRUE	FALSE	FALSE
C8H10O6	C8H10O6I-	328.9528	TRUE	FALSE	FALSE
C8H10O7	C8H10O7I-	344.9477	TRUE	FALSE	FALSE
C9H14O6	C9H14O6I-	344.9841	FALSE	FALSE	TRUE
C7H8O6	C7H8O6I-	314.9371	FALSE	FALSE	FALSE
C5H6O5	C5H6O5I-	272.9265	TRUE	FALSE	TRUE
C7H10O5	C7H10O5I-	300.9578	FALSE	FALSE	FALSE
C8H12O6	C8H12O6I-	330.9684	FALSE	FALSE	FALSE
C6H8O6	C6H8O6I-	302.9371	FALSE	FALSE	FALSE
C2H2O3	C2H2O3I-	200.9054	FALSE	FALSE	TRUE
C10H6NO4	C10H6INO4-	330.9347	FALSE	FALSE	FALSE
C4H4O6	C4H4O6I-	274.9058	FALSE	FALSE	TRUE
C6H8O5	C6H8O5I-	286.9422	TRUE	FALSE	TRUE
C4H4O4	C4H4O4I-	242.916	TRUE	FALSE	TRUE
C7H8O5	C7H8O5I-	298.9422	FALSE	FALSE	TRUE
C3H4O4	C3H4O4I-	230.916	TRUE	FALSE	TRUE
C6H6O6	C6H6O6I-	300.9215	FALSE	FALSE	FALSE
C8H10NO7	C8H10NO7I-	358.9507	FALSE	FALSE	TRUE

Table S10 TMB124 Medium-NO_x I-CIMS

sumFormula	ion	x0	commonions	uniqueions	mcmions
C7H10O6	C7H10IO6-	316.9528	TRUE	FALSE	FALSE
C9H12O6	C9H12IO6-	342.9684	FALSE	FALSE	FALSE
C8H10O7	C8H10IO7-	344.9477	TRUE	FALSE	FALSE
C8H10O6	C8H10IO6-	328.9528	TRUE	FALSE	FALSE
C2H2O4	C2H2O4I-	216.9003	FALSE	FALSE	TRUE
C7H10O5	C7H10IO5-	300.9578	FALSE	FALSE	FALSE
C9H12O7	C9H12IO7-	358.9633	FALSE	FALSE	FALSE
C5H6O5	C5H6O5I-	272.9265	TRUE	FALSE	TRUE
C9H14O6	C9H14O6I-	344.9841	FALSE	FALSE	TRUE
C10H6NO3	C10H6INO3-	314.9398	FALSE	FALSE	FALSE
C6H8O6	C6H8O6I-	302.9371	FALSE	FALSE	TRUE
C8H12O6	C8H12IO6-	330.9684	FALSE	FALSE	FALSE
C7H8O7	C7H8IO7-	330.932	FALSE	TRUE	FALSE
C9H14O5	C9H14O5I-	328.9891	FALSE	FALSE	TRUE
C6H6O6	C6H6IO6-	300.9215	FALSE	FALSE	FALSE
C4H4O6	C4H4IO6-	274.9058	FALSE	FALSE	FALSE
C5H6O6	C5H6O6I-	288.9215	FALSE	FALSE	TRUE
C8H8O7	C8H8IO7-	342.932	TRUE	FALSE	FALSE
C3H4O4	C3H4IO4-	230.916	TRUE	FALSE	FALSE
C8H10O8	C8H10IO8-	360.9426	FALSE	FALSE	FALSE

Table S11 TMB135 Medium-NO_x I-CIMS

sumFormula	ion	x0	commonions	uniqueions	mcmions
C4H6O2	C4H7O2+	87.04406	TRUE	FALSE	FALSE
C3H6O2	C3H7O2+	75.04406	TRUE	FALSE	FALSE
C2H8O4	C2H9O4+	97.04954	TRUE	FALSE	FALSE
C3H8O2	C3H9O2+	77.05971	TRUE	FALSE	FALSE
C2H4O3	C2H5O3+	77.02332	FALSE	FALSE	TRUE
C4H8O3	C4H9O3+	105.0546	TRUE	FALSE	FALSE
C5H6O3	C5H7O3+	115.039	TRUE	FALSE	TRUE
C4H6O3	C4H7O3+	103.039	TRUE	FALSE	TRUE
C6H8O3	C6H9O3+	129.0546	TRUE	FALSE	TRUE
C6H8O2	C6H9O2+	113.0597	TRUE	FALSE	TRUE
C5H8O2	C5H9O2+	101.0597	TRUE	FALSE	FALSE
C6H8O1	C6H9O+	97.06479	FALSE	FALSE	FALSE
C2H6O4	C2H7O4+	95.03389	TRUE	FALSE	FALSE
C6H8O4	C6H9O4+	145.0495	TRUE	FALSE	TRUE
C6H6O1	C6H7O+	95.04914	FALSE	FALSE	FALSE
C6H6O3	C6H7O3+	127.039	TRUE	FALSE	FALSE
C4H4O2	C4H5O2+	85.02841	TRUE	FALSE	FALSE
C9H10O2	C9H11O2+	151.0754	FALSE	FALSE	TRUE
C5H6O4	C5H7O4+	131.0339	TRUE	FALSE	TRUE
C8H10O3	C8H11O3+	155.0703	TRUE	FALSE	TRUE

Table S12 TMB135 Low-NO_x Vocus

sumFormula	ion	x0	commonions	uniqueions	mcmions
C4H6O2	C4H7O2+	87.04406	TRUE	FALSE	TRUE
C4H8O3	C4H9O3+	105.0546	TRUE	FALSE	TRUE
C2H8O4	C2H9O4+	97.04954	TRUE	FALSE	FALSE
C3H6O2	C3H7O2+	75.04406	TRUE	FALSE	TRUE
C3H8O2	C3H9O2+	77.05971	TRUE	FALSE	FALSE
C2H4O3	C2H5O3+	77.02332	FALSE	FALSE	TRUE
C5H8O2	C5H9O2+	101.0597	TRUE	FALSE	FALSE
C4H6O3	C4H7O3+	103.039	TRUE	FALSE	TRUE
C5H6O3	C5H7O3+	115.039	TRUE	FALSE	TRUE
C6H8O2	C6H9O2+	113.0597	TRUE	FALSE	TRUE
C4H4O3	C4H5O3+	101.0233	TRUE	FALSE	TRUE
C6H8O3	C6H9O3+	129.0546	TRUE	FALSE	TRUE
C8H10O3	C8H11O3+	155.0703	TRUE	FALSE	FALSE
C6H6O3	C6H7O3+	127.039	TRUE	FALSE	FALSE
C8H6O4	C8H7O4+	167.0339	TRUE	FALSE	FALSE
C5H6O2	C5H7O2+	99.04406	TRUE	FALSE	TRUE
C6H8O1	C6H9O+	97.06479	FALSE	FALSE	FALSE
C6H8O4	C6H9O4+	145.0495	TRUE	FALSE	TRUE
C8H4O3	C8H5O3+	149.0233	TRUE	FALSE	FALSE
C2H6O4	C2H7O4+	95.03389	TRUE	FALSE	FALSE

Table S13 TMB124 Low-NO_x Vocus

sumFormula	ion	x0	commonions	uniqueions	mcmions
C9H10O1	C9H11O+	135.0804	FALSE	FALSE	FALSE
C3H8O2	C3H9O2+	77.05971	TRUE	FALSE	TRUE
C3H6O2	C3H7O2+	75.04406	TRUE	FALSE	TRUE
C7H6O1	C7H7O+	107.0491	FALSE	FALSE	FALSE
C4H10O3	C4H11O3+	107.0703	TRUE	FALSE	FALSE
C3H8O3	C3H9O3+	93.05462	TRUE	FALSE	TRUE
C7H8O2	C7H9O2+	125.0597	TRUE	FALSE	FALSE
C6H6O1	C6H7O+	95.04914	FALSE	FALSE	FALSE
C4H6O2	C4H7O2+	87.04406	TRUE	FALSE	TRUE
C4H8O2	C4H9O2+	89.05971	TRUE	FALSE	TRUE
C2H8O4	C2H9O4+	97.04954	TRUE	FALSE	FALSE
C4H10O2	C4H11O2+	91.07536	TRUE	FALSE	FALSE
C3H4O4	C3H5O4+	105.0182	FALSE	FALSE	TRUE
C4H8O3	C4H9O3+	105.0546	TRUE	FALSE	TRUE
C3H2O3	C3H3O3+	87.00767	FALSE	FALSE	TRUE
C3H4O3	C3H5O3+	89.02332	TRUE	FALSE	TRUE
C4H4O3	C4H5O3+	101.0233	TRUE	FALSE	TRUE
C3H6O3	C3H7O3+	91.03897	TRUE	FALSE	TRUE
C4H6O3	C4H7O3+	103.039	TRUE	FALSE	FALSE
C2H10O3	C2H11O3+	83.07027	TRUE	FALSE	FALSE

Table S14 PROP BENZ Low-NO_x Vocus

sumFormula	ion	x0	commonions	uniqueions	mcmions
C3H8O2	C3H9O2+	77.05971	TRUE	FALSE	TRUE
C3H6O2	C3H7O2+	75.04406	TRUE	FALSE	TRUE
C2H8O4	C2H9O4+	97.04954	TRUE	FALSE	FALSE
C4H8O2	C4H9O2+	89.05971	TRUE	FALSE	TRUE
C4H6O2	C4H7O2+	87.04406	TRUE	FALSE	TRUE
C4H6O3	C4H7O3+	103.039	TRUE	FALSE	TRUE
C4H10O3	C4H11O3+	107.0703	TRUE	FALSE	FALSE
C4H8O3	C4H9O3+	105.0546	TRUE	FALSE	TRUE
C8H10O2	C8H11O2+	139.0754	TRUE	FALSE	FALSE
C6H6O4	C6H7O4+	143.0339	FALSE	FALSE	FALSE
C3H4O4	C3H5O4+	105.0182	FALSE	FALSE	TRUE
C6H6O1	C6H7O+	95.04914	FALSE	FALSE	FALSE
C5H8O2	C5H9O2+	101.0597	TRUE	FALSE	TRUE
C3H4O3	C3H5O3+	89.02332	TRUE	FALSE	TRUE
C6H4O3	C6H5O3+	125.0233	TRUE	FALSE	FALSE
C3H6O4	C3H7O4+	107.0339	TRUE	FALSE	TRUE
C3H8O3	C3H9O3+	93.05462	TRUE	FALSE	TRUE
C5H6O3	C5H7O3+	115.039	TRUE	FALSE	FALSE
C5H6O2	C5H7O2+	99.04406	TRUE	FALSE	FALSE
C6H6O3	C6H7O3+	127.039	TRUE	FALSE	FALSE

Table S15 IPRBENZ Low-NOx Vocus

sumFormula	ion	x0	commonions	uniqueions
C3H8O2	C3H9O2+	77.05971	TRUE	FALSE
C8H6O4	C8H7O4+	167.0339	TRUE	FALSE
C3H6O2	C3H7O2+	75.04406	TRUE	FALSE
C3H4O3	C3H5O3+	89.02332	TRUE	FALSE
C6H4O3	C6H5O3+	125.0233	TRUE	FALSE
C3H4O4	C3H5O4+	105.0182	FALSE	FALSE
C2H8O4	C2H9O4+	97.04954	TRUE	FALSE
C8H4O3	C8H5O3+	149.0233	TRUE	FALSE
C6H6O3	C6H7O3+	127.039	TRUE	FALSE
C3H6O4	C3H7O4+	107.0339	TRUE	FALSE
C6H6O1	C6H7O+	95.04914	FALSE	FALSE
C5H4O2	C5H5O2+	97.02841	TRUE	FALSE
C9H8O4	C9H9O4+	181.0495	FALSE	FALSE
C4H6O3	C4H7O3+	103.039	TRUE	FALSE
C4H6O2	C4H7O2+	87.04406	TRUE	FALSE
C5H6O2	C5H7O2+	99.04406	TRUE	FALSE
C5H8O5	C5H9O5+	149.0445	TRUE	FALSE
C5H8O2	C5H9O2+	101.0597	TRUE	FALSE
C3H6O3	C3H7O3+	91.03897	TRUE	FALSE
C3H2O3	C3H3O3+	87.00767	FALSE	FALSE

Table S16 METHNAP Low-NOx Vocus

sumFormula	ion	x0	commonions	uniqueions	mcmions
C3H8O2	C3H9O2+	77.05971	TRUE	FALSE	TRUE
C3H6O2	C3H7O2+	75.04406	TRUE	FALSE	TRUE
C4H6O2	C4H7O2+	87.04406	TRUE	FALSE	TRUE
C4H6O3	C4H7O3+	103.039	TRUE	FALSE	TRUE
C4H8O2	C4H9O2+	89.05971	TRUE	FALSE	TRUE
C6H6O1	C6H7O+	95.04914	FALSE	FALSE	FALSE
C4H8O3	C4H9O3+	105.0546	TRUE	FALSE	TRUE
C4H10O3	C4H11O3+	107.0703	TRUE	FALSE	FALSE
C5H8O2	C5H9O2+	101.0597	TRUE	FALSE	TRUE
C8H10O2	C8H11O2+	139.0754	TRUE	FALSE	FALSE
C2H3N1O3	C2H4NO3+	90.01857	FALSE	FALSE	FALSE
C5H6O3	C5H7O3+	115.039	TRUE	FALSE	FALSE
C3H4O3	C3H5O3+	89.02332	TRUE	FALSE	TRUE
C3H4O4	C3H5O4+	105.0182	FALSE	FALSE	TRUE
C5H6O2	C5H7O2+	99.04406	TRUE	FALSE	FALSE
C9H10O1	C9H11O+	135.0804	FALSE	FALSE	FALSE
C2H6O4	C2H7O4+	95.03389	TRUE	FALSE	FALSE
C5H6O1	C5H7O+	83.04914	FALSE	FALSE	FALSE
C3H6O3	C3H7O3+	91.03897	TRUE	FALSE	TRUE
C8H8O2	C8H9O2+	137.0597	TRUE	FALSE	TRUE

Table S17 IPRBENZ medium-NOx Vocus

sumFormula	ion	x0	commonions	uniqueions
C3H8O2	C3H9O2+	77.05971	TRUE	FALSE
C8H6O4	C8H7O4+	167.0339	FALSE	FALSE
C2H3N1O3	C2H4NO3+	90.01857	FALSE	FALSE
C3H6O2	C3H7O2+	75.04406	TRUE	FALSE
C8H4O3	C8H5O3+	149.0233	FALSE	FALSE
C3H4O3	C3H5O3+	89.02332	TRUE	FALSE
C2H5N1O4	C2H6NO4+	108.0291	FALSE	FALSE
C6H4O3	C6H5O3+	125.0233	TRUE	FALSE
C9H8O4	C9H9O4+	181.0495	FALSE	FALSE
C3H4O4	C3H5O4+	105.0182	FALSE	FALSE
C4H6O2	C4H7O2+	87.04406	TRUE	FALSE
C4H6O3	C4H7O3+	103.039	TRUE	FALSE
C9H6O3	C9H7O3+	163.039	FALSE	FALSE
C6H6O3	C6H7O3+	127.039	TRUE	FALSE
C5H4O2	C5H5O2+	97.02841	TRUE	FALSE
C5H8O2	C5H9O2+	101.0597	TRUE	FALSE
C5H6O2	C5H7O2+	99.04406	TRUE	FALSE
C3H6O4	C3H7O4+	107.0339	TRUE	FALSE
C2H4N2O2	C2H5N2O2+	89.03455	FALSE	FALSE
C3H2O3	C3H3O3+	87.00767	FALSE	FALSE

Table S18 METHNAP medium-NOx Vocus

sumFormula	ion	x0	commonions	uniqueions	mcmions
C9H10O1	C9H11O+	135.0804	FALSE	FALSE	FALSE
C7H6O1	C7H7O+	107.0491	FALSE	FALSE	FALSE
C3H6O2	C3H7O2+	75.04406	TRUE	FALSE	TRUE
C4H10O3	C4H11O3+	107.0703	TRUE	FALSE	FALSE
C3H8O2	C3H9O2+	77.05971	TRUE	FALSE	TRUE
C7H8O2	C7H9O2+	125.0597	TRUE	FALSE	FALSE
C3H8O3	C3H9O3+	93.05462	TRUE	FALSE	TRUE
C6H6O1	C6H7O+	95.04914	FALSE	FALSE	FALSE
C7H4O1	C7H5O+	105.0335	FALSE	FALSE	FALSE
C4H6O2	C4H7O2+	87.04406	TRUE	FALSE	TRUE
C2H4O3	C2H5O3+	77.02332	FALSE	FALSE	TRUE
C4H8O2	C4H9O2+	89.05971	TRUE	FALSE	TRUE
C4H8O3	C4H9O3+	105.0546	TRUE	FALSE	TRUE
C3H6O3	C3H7O3+	91.03897	TRUE	FALSE	TRUE
C7H6O3	C7H7O3+	139.039	TRUE	FALSE	TRUE
C4H10O2	C4H11O2+	91.07536	TRUE	FALSE	FALSE
C3H4O3	C3H5O3+	89.02332	TRUE	FALSE	TRUE
C2H6O4	C2H7O4+	95.03389	TRUE	FALSE	FALSE
C3H4O4	C3H5O4+	105.0182	FALSE	FALSE	TRUE
C7H8O3	C7H9O3+	141.0546	TRUE	FALSE	TRUE

Table S19 PROP BENZ medium-NO_x Vocus

sumFormula	ion	x0	commonions	uniqueions	mcmions
C4H6O2	C4H7O2+	87.04406	TRUE	FALSE	TRUE
C2H8O4	C2H9O4+	97.04954	FALSE	TRUE	FALSE
C2H4O3	C2H5O3+	77.02332	FALSE	FALSE	TRUE
C4H8O3	C4H9O3+	105.0546	TRUE	FALSE	TRUE
C3H6O2	C3H7O2+	75.04406	TRUE	FALSE	TRUE
C3H8O2	C3H9O2+	77.05971	TRUE	FALSE	FALSE
C4H6O3	C4H7O3+	103.039	TRUE	FALSE	TRUE
C2H6O4	C2H7O4+	95.03389	TRUE	FALSE	FALSE
C5H8O2	C5H9O2+	101.0597	TRUE	FALSE	FALSE
C5H6O3	C5H7O3+	115.039	TRUE	FALSE	TRUE
C6H8O2	C6H9O2+	113.0597	TRUE	FALSE	TRUE
C5H6O2	C5H7O2+	99.04406	TRUE	FALSE	TRUE
C6H8O4	C6H9O4+	145.0495	TRUE	FALSE	TRUE
C8H10O3	C8H11O3+	155.0703	TRUE	FALSE	FALSE
C4H4O3	C4H5O3+	101.0233	TRUE	FALSE	TRUE
C6H8O3	C6H9O3+	129.0546	TRUE	FALSE	TRUE
C6H6O3	C6H7O3+	127.039	TRUE	FALSE	FALSE
C4H4O2	C4H5O2+	85.02841	TRUE	FALSE	FALSE
C6H8O1	C6H9O+	97.06479	FALSE	FALSE	FALSE
C3H4O3	C3H5O3+	89.02332	TRUE	FALSE	TRUE

Table S20 TMB124 medium-NO_x Vocus

sumFormula	ion	x0	commonions	uniqueions	mcmions
C4H6O2	C4H7O2+	87.04406	TRUE	FALSE	FALSE
C3H6O2	C3H7O2+	75.04406	TRUE	FALSE	FALSE
C2H4O3	C2H5O3+	77.02332	FALSE	FALSE	TRUE
C5H6O3	C5H7O3+	115.039	TRUE	FALSE	TRUE
C4H6O3	C4H7O3+	103.039	TRUE	FALSE	TRUE
C6H8O3	C6H9O3+	129.0546	TRUE	FALSE	TRUE
C6H8O2	C6H9O2+	113.0597	TRUE	FALSE	TRUE
C5H8O2	C5H9O2+	101.0597	TRUE	FALSE	FALSE
C3H8O2	C3H9O2+	77.05971	TRUE	FALSE	FALSE
C2H6O4	C2H7O4+	95.03389	TRUE	FALSE	FALSE
C6H8O1	C6H9O+	97.06479	FALSE	FALSE	FALSE
C4H8O3	C4H9O3+	105.0546	TRUE	FALSE	FALSE
C6H8O4	C6H9O4+	145.0495	TRUE	FALSE	TRUE
C4H4O2	C4H5O2+	85.02841	TRUE	FALSE	FALSE
C9H10O2	C9H11O2+	151.0754	TRUE	FALSE	TRUE
C8H10O3	C8H11O3+	155.0703	TRUE	FALSE	TRUE
C6H10O4	C6H11O4+	147.0652	TRUE	FALSE	TRUE
C6H6O2	C6H7O2+	111.0441	FALSE	FALSE	FALSE
C6H6O3	C6H7O3+	127.039	TRUE	FALSE	FALSE
C5H6O4	C5H7O4+	131.0339	TRUE	FALSE	TRUE

Table S21 TMB135 medium-NOx Vocus