

Supplementary information for

Chemical characterization of organic particulate matter from on-road traffic in Sao Paulo, Brazil

Oyama, B.S.<sup>1,2</sup>, Andrade, M.F.<sup>1</sup>, Herckes, P.<sup>3</sup>, Dusek, U.<sup>2,4</sup>, Röckmann, T.<sup>2</sup>, Holzinger, R.<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Institute of Astronomy, Geophysics and Atmospheric Sciences, University of Sao Paulo, Sao Paulo, Brazil

<sup>2</sup> Institute for Marine and Atmospheric Research, University of Utrecht, Utrecht, the Netherlands

<sup>3</sup> School of Molecular Sciences, Arizona State University, Tempe, United States

<sup>4</sup> Center for Isotope Research, University of Groningen, Groningen, the Netherlands

Correspondence to: B. S. Oyama (beatriz.oyama@iag.usp.br)

## Background correction for emission factor calculation

The background correction for TJQ campaign was based on the linear fit between OA (and OC) and  $\Delta\text{CO}$ . These linear relations are presented in Figure S1, for TJQ campaign. For PTR-MS analyses, the OA concentrations were calculated from the sum of all temperature step contributions. Figure S1 presents the best linear fit, obtained by excluding outliers (based on standard boxplot analyses). For OC and OA analyses, 1 (TJQ06) and 5 (TJQ01F, TJQ06F, TJQ08F, TJQ09F and TJQ17F) samples were excluded, respectively. It is important to highlight that the exclusion of outliers did not have significant impact on the slope and intercept, and improved mainly the correlation ( $R^2$ ).

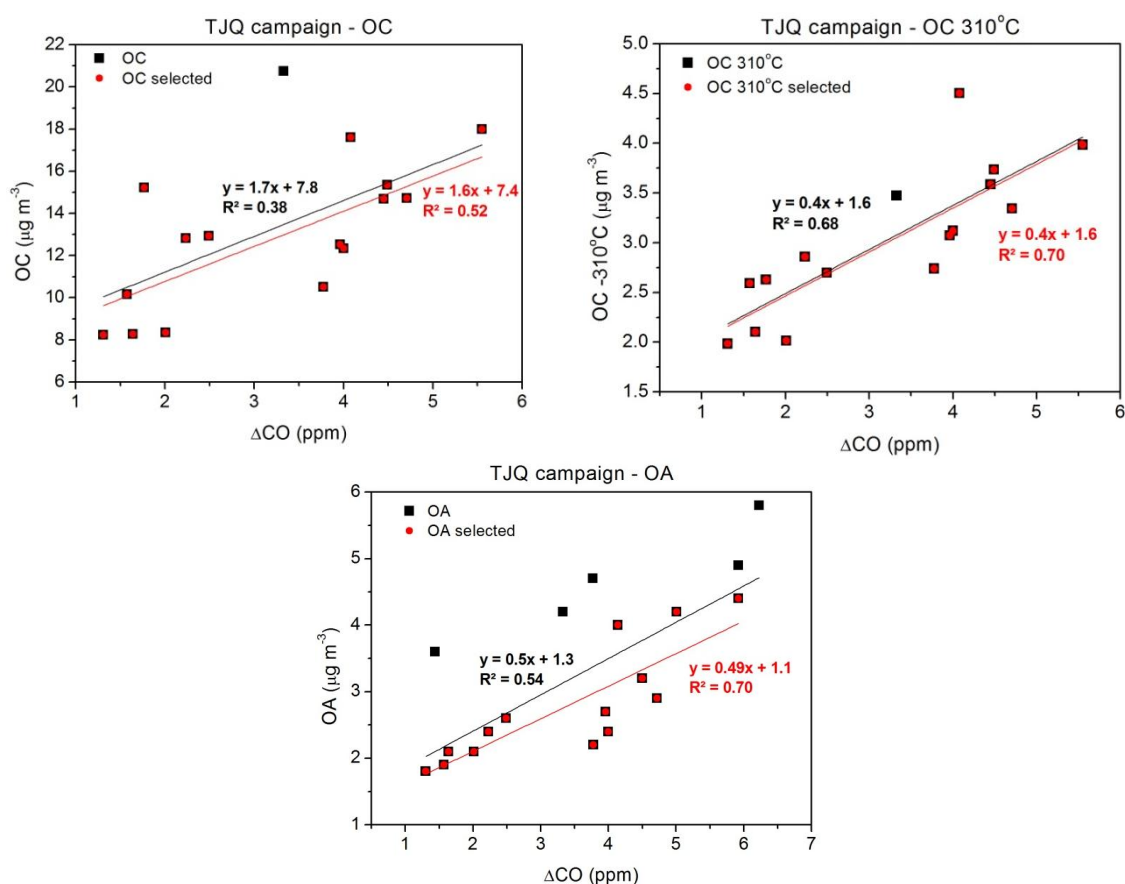


Figure S1: Comparison between  $\Delta\text{CO}$  and OC. OC measured at 310°C and from 310 to 870°C, and OA for TJQ campaign. Black squares represent the whole data set used for the linear fit (in black letters), and red circles represent the data set excluding the outlier used for the linear fit (in red letters).

After excluding the outliers, the background correction was performed for each compound (PTR-MS) and fraction (TOT), per temperature step. The background correction was performed based on the linear fit between the compound and  $\Delta\text{CO}$  and we distinguished 3 cases:

1. slope > 0, intercept > 0 and lower than the measured concentration.

In this case we subtracted the intercept from the measured concentration.

2. slope > 0, intercept < 0, but  $R^2 > 0.45$ .

In this case no subtraction was performed.

3. No a significant correlation with  $\Delta CO$ .

In this case we subtracted the ambient concentration (measured during a winter campaign performed in the city of Sao Paulo, 5 km away from TJQ and 15 km from TRA in 2012).

A small number of compounds (16 in total) were present in the tunnels at significantly higher than ambient concentrations, but did not show a significant correlation with  $\Delta CO$  (case 3). An example is mass 149.024, that was present in the TJQ Tunnel at  $354.6 \text{ ng m}^{-3}$  on average versus  $108.5 \text{ ng m}^{-3}$  in ambient air.

#### How sensitive are the calculated emission factors to the background correction?

For this sensitivity test we varied the background around the values obtained above. The results shown in Table S1 show that the emission factors vary by approximately  $\pm 5\%$  if the background is varied by  $\pm 50\%$ .

*Table S1: EF of OA and OC averages emission factors and SD (in brackets) for HDV (estimated from TRA tunnel campaign), in  $\text{mg kg}^{-1}$  of burned fuel.*

Correction	PTR			TOT	
	OA	Oxygenated	Up to 300°C	OC	OC up to 310°C
0.5*bg	84.6 (13.0)	54.6 (8.3)	78.4 (12.5)	458.3 (86.3)	94.1 (10.3)
1* bg	80.8 (13.0)	52.2 (8.4)	74.9 (12.4)	423.7 (89.2)	87.0 (10.2)
2*bg	73.4 (12.9)	46.8 (8.3)	68.1 (12.3)	354.4 (95.5)	72.8 (10.3)

#### Emission factors for all detected ions in the range $m/z$ 27-651

Table S2 presents the average, standard deviation, maximum and minimum Emission Factors (in  $\text{mg kg}^{-1}$  of fuel) calculated for all  $m/z$  identified for HDV and LDV, arranged in  $m/z$  ascending order.



Table S2: EFs (in mg kg<sup>-1</sup> of fuel) for LDV and HDV.

m/z	Formula	LDV					HDV				
		Ave	Std Dev	Med	Max	Min	Ave	Std Dev	Med	Max	Min
27.0224	C2H2H+	0.027	0.006	0.026	0.036	0.017	0.113	0.018	0.110	0.146	0.086
31.0172	CH2OH+	0.239	0.420	0.104	1.657	0.017	0.154	0.051	0.139	0.232	0.064
33.0327	CH4OH+	0.108	0.068	0.093	0.245	0.011	0.203	0.045	0.202	0.275	0.129
40.0258		0.009	0.003	0.009	0.013	0.004	0.016	0.003	0.016	0.020	0.013
40.9579		0.002	0.001	0.001	0.004	0.000	--	--	--	--	--
41.038	C3H4H+	0.158	0.051	0.150	0.231	0.082	0.557	0.088	0.576	0.691	0.400
43.0538	C3H6H+	0.066	0.028	0.059	0.126	0.036	0.203	0.030	0.202	0.251	0.151
44.0489	C2H5NH+	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000
55.0489	C4H6H+	0.074	0.025	0.067	0.120	0.043	0.282	0.046	0.271	0.354	0.212
55.9332		0.002	0.001	0.001	0.003	0.001	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000
57.0697	C4H8H+	0.053	0.028	0.043	0.099	0.017	0.164	0.032	0.157	0.212	0.115
58.0664	C3H7NH+	0.002	0.002	0.002	0.006	0.000	0.002	0.001	0.002	0.004	0.001
59.0129	C2H2O2H+	0.006	0.003	0.005	0.012	0.002	0.007	0.002	0.007	0.010	0.004
59.0483	C3H6OH+	0.164	0.077	0.142	0.349	0.085	0.129	0.023	0.132	0.165	0.086
60.0448	C2H5ONH+	0.021	0.012	0.018	0.046	0.004	0.038	0.011	0.033	0.061	0.028
60.0794	C3H9NH+	0.005	0.004	0.005	0.014	0.001	0.011	0.005	0.012	0.019	0.004
62.9893		0.002	0.001	0.002	0.004	0.001	0.001	0.000	0.001	0.002	0.001
63.0427	C2H6O2H+	0.009	0.004	0.007	0.015	0.003	0.007	0.002	0.007	0.010	0.004
65.0375	C5H4H+	0.006	0.003	0.006	0.010	0.001	0.009	0.002	0.009	0.013	0.007
67.0541	C5H6H+	0.031	0.010	0.028	0.054	0.017	0.107	0.018	0.113	0.135	0.078
68.0499	C4H5NH+	0.006	0.004	0.005	0.014	0.001	0.009	0.002	0.009	0.013	0.006
69.0699	C5H8H+	0.059	0.020	0.058	0.091	0.029	0.216	0.038	0.219	0.271	0.150
71.086	C5H10H+	0.034	0.013	0.034	0.055	0.011	0.082	0.016	0.075	0.108	0.063
72.0454	C3H5ONH+	0.013	0.009	0.012	0.028	0.002	0.021	0.007	0.022	0.036	0.012
72.0814	C4H9NH+	0.006	0.004	0.005	0.013	0.001	0.008	0.004	0.007	0.017	0.003
73.0285	C3H4O2H+	0.053	0.037	0.047	0.150	0.010	0.084	0.022	0.077	0.123	0.050
73.942		0.001	0.000	0.001	0.002	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
74.0286	C2H3O2NH+	0.007	0.003	0.006	0.013	0.002	0.008	0.001	0.008	0.011	0.006
74.0606	C3H7ONH+	0.001	0.004	0.000	0.016	0.000	0.001	0.001	0.000	0.003	0.000
74.0958	C4H11NH+	0.007	0.008	0.002	0.023	0.000	0.008	0.005	0.006	0.020	0.002
75.9444		0.001	0.000	0.001	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000
76.026	C5HNH+	0.003	0.002	0.003	0.005	0.001	0.002	0.001	0.002	0.004	0.001
77.0376	C6H4H+	0.006	0.003	0.006	0.013	0.003	0.011	0.002	0.011	0.013	0.008
79.054	C6H6H+	0.029	0.013	0.025	0.056	0.013	0.088	0.011	0.088	0.103	0.068
80.0505	C5H5NH+	0.006	0.004	0.005	0.017	0.002	0.010	0.002	0.011	0.014	0.006
81.0697	C6H8H+	0.083	0.025	0.080	0.122	0.045	0.306	0.051	0.321	0.388	0.213
82.0671	13CC5H8H+	0.015	0.006	0.016	0.027	0.008	0.025	0.004	0.025	0.032	0.020
83.0136	C4H2O2H+	0.005	0.004	0.005	0.011	0.001	0.016	0.005	0.017	0.026	0.008
83.0494	C5H6OH+	0.045	0.027	0.048	0.107	0.004	0.091	0.028	0.100	0.140	0.045
83.0857	C6H10H+	0.046	0.025	0.037	0.102	0.024	0.143	0.030	0.153	0.182	0.084
85.0642	C5H8OH+	0.042	0.021	0.037	0.083	0.015	0.066	0.017	0.064	0.096	0.032
85.1017	C6H12H+	0.030	0.010	0.030	0.044	0.016	0.086	0.014	0.082	0.110	0.068
86.0601	C4H7ONH+	0.004	0.006	0.003	0.018	0.000	0.003	0.003	0.003	0.008	0.000
86.0973	C5H11NH+	0.009	0.004	0.009	0.015	0.003	0.010	0.002	0.010	0.014	0.006
88.023	C6HNH+	0.004	0.002	0.003	0.007	0.001	0.003	0.001	0.003	0.006	0.001
88.0437	C3H5O2NH+	0.010	0.005	0.008	0.020	0.004	0.008	0.001	0.008	0.010	0.006
88.0753	C4H9ONH+	0.009	0.007	0.005	0.023	0.001	0.007	0.003	0.006	0.014	0.004
89.0238	C3H4O3H+	0.003	0.002	0.002	0.008	0.000	--	--	--	--	--
89.0595	C4H8O2H+	0.037	0.016	0.032	0.069	0.013	0.030	0.010	0.028	0.052	0.017
91.0538	C7H6H+	0.021	0.011	0.019	0.048	0.009	0.086	0.013	0.088	0.108	0.065

Table S2: continue.

m/z	Formula	LDV					HDV				
		Ave	Std Dev	Med	Max	Min	Ave	Std Dev	Med	Max	Min
92.0562	13CC6H6H+	0.006	0.003	0.006	0.012	0.002	0.013	0.002	0.013	0.016	0.009
93.0695	C7H8H+	0.035	0.014	0.039	0.059	0.016	0.069	0.012	0.069	0.085	0.052
94.0316	C5H3ONH+	0.008	0.004	0.006	0.017	0.002	0.017	0.003	0.016	0.022	0.013
94.0656	C6H7NH+	0.021	0.021	0.014	0.086	0.005	0.037	0.007	0.038	0.047	0.024
95.0152	C5H2O2H+	0.011	0.004	0.012	0.016	0.003	0.018	0.004	0.018	0.026	0.012
95.0496	C6H6OH+	0.059	0.024	0.059	0.107	0.026	0.121	0.021	0.119	0.156	0.083
95.0854	C7H10H+	0.122	0.032	0.118	0.178	0.074	0.428	0.069	0.452	0.534	0.290
96.0455	C5H5ONH+	0.025	0.030	0.017	0.110	0.001	0.086	0.046	0.080	0.206	0.027
96.0863	13CC6H10H+	0.019	0.008	0.019	0.033	0.009	0.042	0.006	0.043	0.054	0.027
97.0643	C6H8OH+	0.094	0.048	0.091	0.189	0.022	0.142	0.032	0.143	0.209	0.100
97.1015	C7H12H+	0.040	0.012	0.039	0.057	0.019	0.168	0.029	0.164	0.211	0.109
98.0604	C5H7ONH+	0.029	0.013	0.030	0.054	0.008	0.047	0.012	0.043	0.070	0.032
98.0969	C6H11NH+	0.006	0.004	0.006	0.012	0.001	0.011	0.002	0.011	0.015	0.007
99.0078	C4H2O3H+	0.206	0.118	0.205	0.399	0.043	0.290	0.068	0.291	0.429	0.177
99.0785	C6H10OH+	0.030	0.013	0.030	0.057	0.012	0.051	0.012	0.052	0.074	0.026
100.012	C7H9NH+	0.012	0.006	0.010	0.021	0.002	0.020	0.005	0.021	0.029	0.011
100.075	C5H9ONH+	0.002	0.003	0.001	0.008	0.000	0.008	0.004	0.008	0.017	0.003
100.112	C6H13NH+	0.007	0.005	0.007	0.017	0.001	0.002	0.001	0.002	0.003	0.001
101.025	C4H4O3H+	0.018	0.020	0.013	0.071	0.000	0.050	0.019	0.044	0.085	0.019
101.058	C5H8O2H+	0.019	0.016	0.015	0.050	0.001	0.047	0.011	0.046	0.075	0.035
102.025	C3H3O3NH+	0.005	0.004	0.004	0.015	0.001	0.011	0.003	0.010	0.016	0.007
102.058	C4H7O2NH+	0.004	0.003	0.003	0.011	0.001	0.005	0.002	0.004	0.009	0.002
102.127	C6H15NH+	0.007	0.007	0.005	0.019	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000
103.074	C5H10O2H+	0.026	0.014	0.022	0.067	0.010	0.021	0.004	0.020	0.029	0.014
105.035	C7H4OH+	0.014	0.008	0.013	0.030	0.005	0.028	0.005	0.029	0.034	0.018
105.07	C8H8H+	0.033	0.011	0.032	0.051	0.017	0.140	0.026	0.143	0.187	0.092
106.032	C6H3ONH+	0.005	0.002	0.004	0.008	0.002	0.006	0.001	0.006	0.008	0.004
106.07	13CC7H8H+	0.014	0.005	0.015	0.021	0.007	0.023	0.004	0.023	0.029	0.016
107.085	C8H10H+	0.027	0.017	0.026	0.066	0.010	0.072	0.016	0.077	0.097	0.040
108.048	C6H5ONH+	0.011	0.008	0.007	0.034	0.003	0.017	0.004	0.018	0.025	0.010
108.082	C7H9NH+	0.015	0.008	0.015	0.034	0.005	0.031	0.010	0.029	0.054	0.020
109.066	C7H8OH+	0.075	0.066	0.058	0.285	0.019	0.120	0.022	0.123	0.161	0.079
109.101	C8H12H+	0.100	0.030	0.100	0.165	0.056	0.333	0.058	0.363	0.415	0.233
110.034		0.009	0.005	0.009	0.019	0.002	0.017	0.005	0.015	0.031	0.011
110.061	C6H7ONH+	0.032	0.015	0.028	0.061	0.011	0.040	0.009	0.036	0.057	0.027
110.103	13CC7H12H+	0.022	0.008	0.023	0.034	0.011	0.040	0.006	0.040	0.049	0.027
111.045	C6H6O2H+	0.146	0.081	0.139	0.296	0.019	0.213	0.052	0.204	0.308	0.141
111.08	C7H10OH+	0.062	0.027	0.063	0.115	0.023	0.087	0.018	0.094	0.105	0.047
111.117	C8H14H+	0.058	0.027	0.054	0.111	0.024	0.142	0.026	0.137	0.183	0.097
112.041	C5H5O2NH+	0.022	0.014	0.023	0.046	0.000	0.045	0.016	0.037	0.077	0.023
112.076	C6H9ONH+	0.019	0.010	0.016	0.037	0.006	0.023	0.006	0.023	0.031	0.015
113.024	C5H4O3H+	0.087	0.048	0.083	0.181	0.015	0.091	0.024	0.092	0.132	0.045
113.06	C6H8O2H+	0.056	0.027	0.051	0.113	0.012	0.068	0.016	0.069	0.099	0.046
113.133	C8H16H+	0.022	0.009	0.023	0.036	0.010	0.030	0.004	0.031	0.037	0.024
114.023	C4H3O3NH+	0.009	0.005	0.008	0.018	0.002	0.014	0.003	0.013	0.022	0.010
114.056	C5H7O2NH+	0.004	0.004	0.003	0.012	0.000	0.017	0.004	0.017	0.026	0.009
114.091	C6H11ONH+	0.207	0.149	0.207	0.534	0.036	0.239	0.080	0.212	0.410	0.127
115.074	C6H10O2H+	0.022	0.012	0.021	0.043	0.006	0.051	0.009	0.052	0.062	0.033
116.038	C4H5O3NH+	0.008	0.004	0.009	0.014	0.002	0.013	0.003	0.012	0.019	0.008
119.054	C8H6OH+	0.023	0.011	0.020	0.039	0.008	0.049	0.012	0.046	0.076	0.031

Table S2: continue.

m/z	Formula	LDV					HDV				
		Ave	Std Dev	Med	Max	Min	Ave	Std Dev	Med	Max	Min
119.085	C9H10H+	0.041	0.014	0.042	0.060	0.018	0.134	0.024	0.142	0.171	0.097
120.046	C7H5ONH+	0.012	0.006	0.010	0.025	0.005	0.036	0.005	0.035	0.046	0.028
120.082	C8H9NH+	0.012	0.005	0.012	0.021	0.005	0.025	0.004	0.026	0.032	0.018
121.031	C7H4O2H+	0.016	0.008	0.015	0.031	0.005	0.059	0.012	0.058	0.085	0.042
121.065	C8H8OH+	0.026	0.015	0.021	0.054	0.009	0.037	0.008	0.036	0.060	0.028
121.101	C9H12H+	0.032	0.012	0.035	0.052	0.015	0.097	0.019	0.099	0.128	0.063
122.062	C7H7ONH+	0.023	0.011	0.023	0.038	0.007	0.035	0.006	0.034	0.048	0.026
122.097	C8H11NH+	0.018	0.012	0.015	0.048	0.006	0.033	0.009	0.032	0.047	0.018
123.044	C7H6O2H+	0.050	0.027	0.049	0.096	0.016	0.076	0.010	0.075	0.089	0.060
123.079	C8H10OH+	0.074	0.034	0.060	0.125	0.027	0.119	0.018	0.124	0.138	0.079
123.116	C9H14H+	0.065	0.017	0.063	0.091	0.037	0.206	0.034	0.201	0.260	0.143
124.043	C6H5O2NH+	0.019	0.011	0.018	0.043	0.003	0.049	0.009	0.045	0.068	0.039
124.076	C7H9ONH+	0.022	0.010	0.021	0.038	0.009	0.028	0.005	0.026	0.037	0.019
124.117	13CC8H14H+	0.019	0.007	0.021	0.030	0.010	0.034	0.005	0.035	0.040	0.024
125.06	C7H8O2H+	0.095	0.047	0.089	0.186	0.024	0.126	0.019	0.128	0.152	0.096
125.095	C8H12OH+	0.051	0.023	0.049	0.093	0.021	0.071	0.015	0.076	0.088	0.041
125.134	C9H16H+	0.029	0.009	0.030	0.042	0.014	0.086	0.016	0.082	0.116	0.059
126.056	C6H7O2NH+	0.018	0.009	0.018	0.035	0.003	0.027	0.008	0.026	0.041	0.017
126.091	C7H11ONH+	0.021	0.011	0.021	0.046	0.008	0.021	0.005	0.020	0.027	0.012
127.074	C7H10O2H+	0.076	0.041	0.071	0.155	0.022	0.111	0.020	0.109	0.151	0.081
128.04	C5H5O3NH+	0.008	0.005	0.008	0.017	0.001	0.024	0.010	0.020	0.045	0.008
128.068	C6H9O2NH+	0.016	0.007	0.016	0.030	0.005	0.027	0.005	0.025	0.039	0.019
128.107	C7H13ONH+	0.008	0.004	0.007	0.014	0.003	0.015	0.006	0.014	0.029	0.005
129.06	C6H8O3H+	0.023	0.015	0.023	0.059	0.004	0.148	0.021	0.146	0.181	0.114
130.051	C5H7O3NH+	0.010	0.010	0.007	0.035	0.000	0.048	0.011	0.048	0.070	0.033
130.158	C8H19NH+	0.009	0.005	0.008	0.020	0.003	0.006	0.001	0.006	0.009	0.004
131.043	C4H6O3N2H+	0.026	0.014	0.024	0.059	0.004	0.058	0.012	0.054	0.078	0.043
131.086	C10H10H+	0.042	0.019	0.043	0.073	0.017	0.086	0.015	0.089	0.105	0.057
132.047	C8H5ONH+	0.011	0.011	0.008	0.046	0.002	0.013	0.002	0.012	0.017	0.010
132.082	C9H9NH+	0.013	0.007	0.013	0.028	0.005	0.021	0.004	0.021	0.027	0.014
133.032	C8H4O2H+	0.009	0.006	0.008	0.023	0.001	0.054	0.016	0.050	0.083	0.030
133.065	C9H8OH+	0.031	0.016	0.028	0.061	0.013	0.075	0.016	0.074	0.099	0.050
133.1	C10H12H+	0.039	0.013	0.042	0.061	0.021	0.118	0.024	0.117	0.152	0.077
134.062	C8H7ONH+	0.018	0.013	0.013	0.056	0.007	0.038	0.009	0.034	0.058	0.025
135.046	C8H6O2H+	0.062	0.031	0.053	0.117	0.017	0.110	0.022	0.105	0.143	0.080
135.079	C9H10OH+	0.049	0.022	0.049	0.089	0.019	0.085	0.016	0.084	0.119	0.055
135.116	C10H14H+	0.044	0.015	0.048	0.067	0.024	0.129	0.024	0.132	0.166	0.088
136.024	C3H5O5NH+	0.009	0.006	0.008	0.023	0.002	0.023	0.005	0.022	0.032	0.015
136.043	C7H5O2NH+	0.015	0.006	0.015	0.024	0.006	0.031	0.008	0.028	0.050	0.022
136.076	C8H9ONH+	0.025	0.011	0.027	0.039	0.009	0.037	0.008	0.036	0.056	0.026
136.113	C9H13NH+	0.016	0.010	0.014	0.038	0.004	0.026	0.006	0.027	0.035	0.015
137.06	C8H8O2H+	0.043	0.022	0.040	0.093	0.012	0.120	0.024	0.112	0.172	0.083
137.095	C9H12OH+	0.052	0.022	0.051	0.089	0.022	0.091	0.017	0.094	0.111	0.057
137.132	C10H16H+	0.041	0.014	0.039	0.057	0.020	0.131	0.023	0.126	0.166	0.091
138.057	C7H7O2NH+	0.021	0.011	0.020	0.048	0.005	0.041	0.011	0.037	0.064	0.031
139.04	C7H6O3H+	0.023	0.021	0.018	0.072	0.000	0.132	0.029	0.121	0.183	0.099
139.076	C8H10O2H+	0.054	0.026	0.049	0.103	0.015	0.102	0.018	0.103	0.128	0.069
139.109	C9H14OH+	0.056	0.026	0.056	0.096	0.023	0.065	0.014	0.066	0.083	0.043
139.149	C10H18H+	0.025	0.009	0.024	0.038	0.012	0.060	0.011	0.060	0.081	0.041
140.036	C6H5O3NH+	0.010	0.007	0.009	0.027	0.002	0.124	0.031	0.118	0.168	0.072

Table S2: continue.

m/z	Formula	LDV					HDV				
		Ave	Std Dev	Med	Max	Min	Ave	Std Dev	Med	Max	Min
140.072	C7H9O2NH+	0.017	0.009	0.018	0.040	0.004	0.050	0.010	0.047	0.071	0.038
141.02	C6H4O4H+	0.005	0.004	0.004	0.015	0.000	0.045	0.010	0.045	0.061	0.031
141.058	C7H8O3H+	0.026	0.021	0.027	0.079	0.001	0.085	0.023	0.075	0.125	0.064
141.09	C8H12O2H+	0.036	0.015	0.035	0.061	0.014	0.072	0.014	0.072	0.093	0.052
142.054	C10H7NH+	0.009	0.005	0.009	0.019	0.002	0.024	0.006	0.022	0.034	0.018
143.081	C6H10O2N2H+	0.019	0.011	0.017	0.041	0.007	0.145	0.022	0.141	0.184	0.115
144.081	C10H9NH+	0.020	0.018	0.016	0.068	0.002	0.043	0.011	0.043	0.062	0.028
145.121	C8H16O2H+	0.002	0.004	0.000	0.011	0.000	0.021	0.006	0.022	0.031	0.009
146.06	C9H7ONH+	0.021	0.009	0.021	0.043	0.011	0.046	0.010	0.043	0.071	0.032
147.046	C9H6O2H+	0.046	0.021	0.043	0.088	0.018	0.236	0.041	0.234	0.309	0.172
147.078	C10H10OH+	0.037	0.018	0.034	0.081	0.016	0.113	0.021	0.118	0.148	0.077
147.115	C11H14H+	0.034	0.013	0.032	0.052	0.016	0.096	0.018	0.099	0.124	0.068
148.04	C8H5O2NH+	0.035	0.023	0.026	0.075	0.007	0.193	0.035	0.202	0.241	0.139
149.024	C8H4O3H+	4.894	1.998	4.523	8.142	2.278	3.076	0.540	2.890	4.303	2.580
149.131	C11H16H+	0.250	0.094	0.256	0.405	0.122	0.253	0.041	0.254	0.313	0.187
150.027		0.463	0.189	0.410	0.763	0.210	0.299	0.050	0.275	0.402	0.252
150.09	C9H11ONH+	0.040	0.018	0.042	0.068	0.015	0.057	0.010	0.056	0.076	0.040
150.129	C10H15NH+	0.029	0.014	0.027	0.050	0.010	0.037	0.007	0.036	0.049	0.023
151.037	C8H6O3H+	0.035	0.016	0.033	0.061	0.011	0.097	0.019	0.096	0.132	0.075
151.076	C9H10O2H+	0.042	0.020	0.037	0.080	0.014	0.103	0.024	0.093	0.153	0.077
151.109	C10H14OH+	0.068	0.029	0.077	0.122	0.029	0.098	0.018	0.104	0.123	0.070
151.147	C11H18H+	0.045	0.015	0.049	0.066	0.021	0.114	0.021	0.108	0.147	0.079
152.021	C3H5O6NH+	0.011	0.005	0.012	0.020	0.004	0.023	0.007	0.022	0.033	0.014
152.074	C8H9O2NH+	0.023	0.011	0.022	0.047	0.008	0.045	0.011	0.042	0.068	0.032
153.059	C8H8O3H+	0.042	0.030	0.041	0.117	0.002	0.098	0.024	0.087	0.145	0.078
153.092	C9H12O2H+	0.067	0.029	0.070	0.116	0.026	0.121	0.021	0.117	0.156	0.087
154.054	C11H7NH+	0.013	0.006	0.013	0.028	0.004	0.052	0.016	0.048	0.093	0.032
154.086	C8H11O2NH+	0.017	0.009	0.016	0.036	0.006	0.043	0.009	0.039	0.058	0.034
155.079	C7H10O2N2H+	0.049	0.027	0.050	0.122	0.017	0.201	0.032	0.197	0.248	0.155
156.081	C11H9NH+	0.015	0.008	0.013	0.031	0.004	0.041	0.009	0.038	0.057	0.031
157.058	C6H8O3N2H+	0.014	0.014	0.012	0.052	0.000	0.092	0.020	0.087	0.129	0.064
157.096	C7H12O2N2H+	0.018	0.009	0.016	0.042	0.008	0.141	0.025	0.140	0.193	0.106
158.097	C11H11NH+	0.009	0.006	0.009	0.021	0.002	0.009	0.004	0.008	0.017	0.004
158.154	C9H19ONH+	0.001	0.002	0.000	0.006	0.000	0.008	0.004	0.007	0.015	0.003
159.085	C11H10OH+	0.030	0.015	0.032	0.071	0.008	0.091	0.017	0.092	0.120	0.058
159.137	C9H18O2H+	0.029	0.017	0.030	0.065	0.010	0.044	0.012	0.040	0.064	0.026
160.081	C10H9ONH+	0.013	0.005	0.013	0.023	0.006	0.031	0.006	0.031	0.041	0.017
161.061	C10H8O2H+	0.072	0.029	0.072	0.110	0.034	0.187	0.033	0.183	0.235	0.132
161.094	C11H12OH+	0.142	0.079	0.115	0.324	0.075	0.140	0.035	0.141	0.202	0.078
162.058	C9H7O2NH+	0.032	0.014	0.030	0.061	0.014	0.089	0.018	0.085	0.126	0.061
162.093	C10H11ONH+	0.018	0.012	0.016	0.053	0.003	0.038	0.009	0.038	0.057	0.021
163.04	C9H6O3H+	0.096	0.097	0.054	0.318	0.000	0.583	0.132	0.560	0.844	0.408
163.074	C10H10O2H+	0.161	0.067	0.160	0.277	0.067	0.337	0.062	0.348	0.442	0.235
163.121	C10H14N2H+	0.083	0.044	0.071	0.192	0.037	0.084	0.014	0.083	0.105	0.057
163.147	C12H18H+	0.057	0.019	0.055	0.101	0.030	0.141	0.025	0.144	0.177	0.097
164.04	13CC8H6O3H+	0.034	0.017	0.036	0.073	0.014	0.179	0.030	0.178	0.244	0.135
164.146	C11H17NH+	0.022	0.010	0.022	0.035	0.007	0.033	0.006	0.034	0.042	0.022
165.02	C8H4O4H+	0.004	0.005	0.002	0.016	0.000	0.265	0.049	0.264	0.336	0.165
165.056	C9H8O3H+	0.022	0.018	0.016	0.063	0.000	0.278	0.053	0.280	0.368	0.185
165.089	C10H12O2H+	0.051	0.025	0.050	0.106	0.019	0.153	0.030	0.150	0.213	0.112



Table S2: continue.

m/z	Formula	LDV					HDV				
		Ave	Std Dev	Med	Max	Min	Ave	Std Dev	Med	Max	Min
166.023		0.006	0.005	0.005	0.013	0.000	0.095	0.018	0.093	0.126	0.068
166.05	C8H7O3NH+	0.009	0.006	0.008	0.023	0.002	0.052	0.011	0.047	0.075	0.038
166.086	C9H11O2NH+	0.018	0.009	0.017	0.036	0.006	0.040	0.008	0.038	0.055	0.028
167.035	C8H6O4H+	0.007	0.009	0.004	0.030	0.000	0.035	0.017	0.033	0.076	0.006
167.073	C9H10O3H+	0.035	0.023	0.030	0.087	0.004	0.091	0.018	0.082	0.121	0.067
167.107	C10H14O2H+	0.057	0.023	0.062	0.093	0.023	0.114	0.019	0.108	0.146	0.083
168.07	C8H9O3NH+	0.011	0.007	0.010	0.028	0.003	0.054	0.009	0.054	0.073	0.039
168.1	C9H13O2NH+	0.016	0.008	0.015	0.031	0.005	0.042	0.007	0.039	0.056	0.032
169.056	C8H8O4H+	0.008	0.011	0.004	0.039	0.000	0.063	0.017	0.061	0.101	0.043
169.093	C9H12O3H+	0.030	0.016	0.029	0.068	0.010	0.156	0.026	0.157	0.205	0.113
170.063	C11H7ONH+	0.010	0.005	0.009	0.021	0.003	0.040	0.009	0.037	0.062	0.031
170.092	C12H11NH+	0.015	0.006	0.017	0.027	0.006	0.042	0.008	0.040	0.058	0.032
171.081	C12H10OH+	0.023	0.016	0.022	0.067	0.006	0.140	0.024	0.139	0.181	0.108
171.113	C8H14O2N2H+	0.017	0.016	0.010	0.066	0.005	0.096	0.017	0.098	0.120	0.063
171.146	C9H18ON2H+	0.006	0.004	0.004	0.015	0.002	0.020	0.005	0.019	0.029	0.013
172.044	C3H9O7NH+	0.007	0.004	0.006	0.014	0.002	0.041	0.007	0.040	0.054	0.030
172.075	C11H9ONH+	0.010	0.006	0.008	0.024	0.005	0.031	0.007	0.029	0.042	0.021
172.111	C12H13NH+	0.015	0.008	0.012	0.034	0.005	0.030	0.007	0.030	0.043	0.016
172.166	C10H21ONH+	0.013	0.018	0.006	0.070	0.002	0.022	0.016	0.016	0.070	0.006
173.061	C11H8O2H+	0.030	0.014	0.028	0.059	0.012	0.300	0.047	0.305	0.392	0.230
173.093	C12H12OH+	0.043	0.017	0.046	0.079	0.019	0.161	0.026	0.160	0.207	0.124
173.15	C10H20O2H+	0.035	0.020	0.026	0.073	0.011	0.077	0.015	0.072	0.104	0.059
174.023	C2H7O8NH+	0.005	0.004	0.004	0.012	0.000	0.065	0.012	0.065	0.091	0.050
174.06	C10H7O2NH+	0.013	0.006	0.013	0.024	0.005	0.067	0.011	0.068	0.086	0.050
175.074	C11H10O2H+	0.076	0.029	0.081	0.116	0.037	0.247	0.050	0.244	0.337	0.168
176.04	C9H5O3NH+	0.012	0.007	0.011	0.026	0.004	0.063	0.011	0.061	0.081	0.047
176.073	C10H9O2NH+	0.026	0.013	0.026	0.062	0.012	0.073	0.017	0.070	0.106	0.047
177.055	C10H8O3H+	0.237	0.327	0.107	1.262	0.052	0.495	0.086	0.489	0.666	0.355
177.162	C13H20H+	0.078	0.031	0.073	0.132	0.034	0.169	0.031	0.168	0.213	0.114
178.059	13CC9H8O3H+	0.020	0.011	0.017	0.048	0.008	0.044	0.010	0.043	0.063	0.029
179.071	C10H10O3H+	0.046	0.022	0.050	0.086	0.011	0.272	0.049	0.259	0.397	0.222
179.104	C11H14O2H+	0.100	0.056	0.092	0.191	0.032	0.269	0.043	0.268	0.342	0.200
179.179	C13H22H+	0.047	0.015	0.050	0.068	0.022	0.144	0.025	0.138	0.184	0.105
180.087	C6H13O5NH+	0.023	0.012	0.023	0.053	0.008	0.105	0.021	0.098	0.154	0.084
181.08	C5H12O5N2H+	0.054	0.029	0.051	0.121	0.015	0.771	0.129	0.765	1.026	0.584
181.125	C11H16O2H+	0.061	0.026	0.066	0.093	0.026	0.215	0.040	0.219	0.282	0.159
182.072	C9H11O3NH+	0.021	0.010	0.019	0.044	0.006	0.169	0.028	0.167	0.227	0.126
184.081	C5H13O6NH+	0.015	0.008	0.014	0.033	0.004	0.052	0.011	0.050	0.076	0.040
185.062	C12H8O2H+	0.042	0.023	0.040	0.106	0.017	0.253	0.048	0.248	0.335	0.182
185.126	C9H16O2N2H+	0.036	0.015	0.037	0.062	0.015	0.179	0.033	0.184	0.231	0.125
186.065		0.016	0.009	0.014	0.039	0.007	0.061	0.013	0.057	0.089	0.046
187.076	C12H10O2H+	0.039	0.019	0.039	0.092	0.016	0.261	0.052	0.252	0.361	0.190
188.041	C3H9O8NH+	0.008	0.005	0.007	0.015	0.001	0.058	0.009	0.057	0.074	0.045
188.075	13CC11H10O2H+	0.017	0.008	0.014	0.031	0.008	0.056	0.011	0.054	0.079	0.039
189.023	C3H8O9H+	0.012	0.008	0.009	0.026	0.002	0.247	0.043	0.247	0.327	0.191
189.055	C11H8O3H+	0.022	0.010	0.021	0.046	0.009	0.174	0.034	0.171	0.235	0.125
189.088	C12H12O2H+	0.045	0.017	0.047	0.073	0.019	0.171	0.037	0.168	0.244	0.111
189.124	C13H16OH+	0.033	0.012	0.036	0.048	0.015	0.083	0.016	0.083	0.104	0.055
190.053	C10H7O3NH+	0.012	0.008	0.010	0.032	0.004	0.074	0.012	0.073	0.095	0.057
190.084	C11H11O2NH+	0.022	0.009	0.022	0.037	0.009	0.061	0.013	0.059	0.087	0.041

Table S2: continue.

m/z	Formula	LDV					HDV				
		Ave	Std Dev	Med	Max	Min	Ave	Std Dev	Med	Max	Min
191.037	C10H6O4H+	0.017	0.013	0.014	0.041	0.002	0.204	0.040	0.199	0.267	0.149
191.072	C11H10O3H+	0.058	0.023	0.053	0.104	0.023	0.257	0.049	0.254	0.356	0.194
191.178	C14H22H+	0.065	0.018	0.067	0.098	0.034	0.172	0.033	0.171	0.221	0.117
192.035	C9H5O4NH+	0.014	0.009	0.012	0.029	0.003	0.061	0.011	0.063	0.075	0.041
192.072	C10H9O3NH+	0.019	0.008	0.018	0.037	0.007	0.074	0.015	0.070	0.108	0.054
193.015	C9H4O5H+	0.028	0.049	0.007	0.175	0.001	0.440	0.171	0.404	0.647	0.155
193.102	C15H12H+	0.041	0.020	0.041	0.083	0.013	0.479	0.075	0.466	0.600	0.360
194.019	C5H7O7NH+	0.014	0.012	0.010	0.043	0.003	0.079	0.021	0.073	0.111	0.047
194.104	13CC14H12H+	0.022	0.010	0.021	0.041	0.007	0.120	0.019	0.115	0.162	0.093
195.086	C7H14O6H+	0.054	0.025	0.053	0.111	0.015	0.441	0.070	0.423	0.590	0.359
196.093	C10H13O3NH+	0.024	0.012	0.026	0.051	0.008	0.133	0.024	0.131	0.193	0.106
197.063	C13H8O2H+	0.031	0.018	0.029	0.080	0.008	0.476	0.081	0.463	0.633	0.369
197.126	C10H16O2N2H+	0.043	0.017	0.042	0.074	0.017	0.267	0.046	0.277	0.340	0.193
198.059	C5H11O7NH+	0.019	0.010	0.017	0.043	0.007	0.172	0.029	0.171	0.229	0.138
199.041	C12H6O3H+	0.056	0.036	0.043	0.141	0.020	1.452	0.201	1.454	1.776	1.124
200.045		0.019	0.011	0.013	0.043	0.008	0.235	0.034	0.230	0.297	0.186
200.198	C12H25ONH+	0.021	0.010	0.020	0.035	0.008	0.035	0.006	0.034	0.049	0.025
201.058	C12H8O3H+	0.020	0.009	0.019	0.042	0.008	0.132	0.025	0.127	0.188	0.100
201.087	C13H12O2H+	0.042	0.014	0.041	0.071	0.020	0.158	0.036	0.154	0.224	0.097
201.184	C12H24O2H+	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
202.087	C12H11O2NH+	0.020	0.009	0.018	0.038	0.008	0.068	0.014	0.066	0.101	0.050
202.187	13CC11H24O2H+	0.020	0.015	0.015	0.061	0.006	0.038	0.011	0.034	0.063	0.027
203.087	C9H14O5H+	0.082	0.032	0.080	0.146	0.027	1.007	0.152	0.974	1.353	0.829
203.176	C15H22H+	0.056	0.019	0.060	0.083	0.025	0.198	0.036	0.201	0.254	0.143
204.089	C8H13O5NH+	0.032	0.013	0.031	0.063	0.010	0.233	0.037	0.227	0.322	0.189
205.135	C12H16ON2H+	0.027	0.013	0.029	0.054	0.013	0.042	0.006	0.039	0.053	0.035
205.089	C12H12O3H+	0.016	0.007	0.016	0.030	0.007	0.029	0.004	0.029	0.036	0.021
205.193	C15H24H+	0.060	0.017	0.065	0.082	0.031	0.174	0.033	0.176	0.225	0.124
206.061	C10H7O4NH+	0.012	0.006	0.011	0.022	0.005	0.049	0.007	0.048	0.064	0.041
207.063	C11H10O4H+	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	--	--	--	--	--
207.032	C10H6O5H+	0.006	0.004	0.005	0.018	0.001	0.049	0.011	0.049	0.073	0.035
207.117	C16H14H+	0.047	0.017	0.049	0.081	0.016	0.746	0.134	0.692	0.974	0.542
208.033		0.010	0.006	0.008	0.023	0.003	0.036	0.007	0.035	0.048	0.024
208.118	13CC15H14H+	0.030	0.011	0.033	0.046	0.012	0.162	0.028	0.165	0.213	0.120
209.02	C8H4O5N2H+	0.023	0.011	0.019	0.039	0.007	0.149	0.026	0.142	0.205	0.118
209.096	C15H12OH+	0.052	0.023	0.049	0.104	0.015	0.549	0.094	0.523	0.737	0.436
209.156	C13H20O2H+	0.051	0.020	0.049	0.081	0.022	0.313	0.053	0.324	0.401	0.234
210.128	C15H15NH+	0.016	0.006	0.015	0.028	0.005	0.106	0.018	0.098	0.144	0.084
210.147	C12H19O2NH+	0.014	0.006	0.013	0.023	0.006	0.061	0.011	0.060	0.082	0.049
211.088	C13H10ON2H+	0.025	0.014	0.024	0.066	0.008	0.213	0.041	0.208	0.296	0.165
211.141	C11H18O2N2H+	0.048	0.019	0.049	0.083	0.019	0.318	0.057	0.331	0.416	0.227
212.069	C13H9O2NH+	0.019	0.009	0.017	0.041	0.007	0.100	0.019	0.098	0.140	0.074
213.06	C6H12O8H+	0.037	0.019	0.035	0.089	0.016	0.630	0.099	0.632	0.819	0.496
214.062	C5H11O8NH+	0.010	0.005	0.009	0.020	0.004	0.066	0.010	0.064	0.086	0.053
214.085	C13H11O2NH+	0.013	0.006	0.013	0.025	0.006	0.044	0.008	0.043	0.062	0.033
215.036	C12H6O4H+	0.022	0.012	0.019	0.049	0.008	0.359	0.055	0.342	0.459	0.284
215.193	C13H26O2H+	0.031	0.012	0.030	0.052	0.015	0.142	0.030	0.147	0.193	0.086
216.036	C4H9O9NH+	0.014	0.008	0.013	0.028	0.004	0.094	0.016	0.091	0.122	0.074
217.015	C11H4O5H+	0.018	0.011	0.015	0.038	0.003	0.464	0.075	0.437	0.588	0.350
217.104	C10H16O5H+	0.058	0.023	0.060	0.112	0.020	0.434	0.080	0.430	0.618	0.331

Table S2: continue.

m/z	Formula	LDV					HDV				
		Ave	Std Dev	Med	Max	Min	Ave	Std Dev	Med	Max	Min
217.19	C11H24O2N2H+	0.060	0.021	0.061	0.094	0.027	0.192	0.038	0.194	0.253	0.137
218.012	C10H3O5NH+	0.015	0.009	0.013	0.038	0.005	0.178	0.037	0.172	0.233	0.118
218.104	C9H15O5NH+	0.027	0.011	0.026	0.051	0.011	0.110	0.019	0.107	0.156	0.084
219.047	C8H10O7H+	0.013	0.010	0.010	0.036	0.001	0.160	0.038	0.157	0.243	0.106
219.11	C12H14O2N2H+	0.072	0.029	0.079	0.119	0.017	0.332	0.083	0.304	0.518	0.240
219.173	C15H22OH+	0.107	0.049	0.107	0.237	0.048	0.183	0.033	0.180	0.239	0.130
221.08	C12H12O4H+	0.027	0.014	0.027	0.065	0.009	0.244	0.048	0.235	0.355	0.186
221.134	C10H20O5H+	0.064	0.025	0.066	0.115	0.019	0.538	0.101	0.513	0.736	0.388
222.068	C11H11O4NH+	0.014	0.007	0.013	0.032	0.004	0.068	0.013	0.069	0.098	0.053
222.135	C9H19O5NH+	0.021	0.008	0.022	0.033	0.008	0.124	0.022	0.115	0.168	0.096
223.062	C11H10O5H+	0.087	0.039	0.070	0.146	0.035	0.222	0.040	0.211	0.317	0.177
223.143	C12H18O2N2H+	0.058	0.022	0.061	0.089	0.022	0.461	0.085	0.432	0.607	0.331
224.064		0.019	0.009	0.020	0.037	0.008	0.080	0.014	0.078	0.111	0.062
225.048	C9H8O5N2H+	0.022	0.012	0.021	0.052	0.007	0.223	0.040	0.213	0.310	0.171
227.084	C13H10O2N2H+	0.124	0.044	0.117	0.191	0.058	0.518	0.088	0.499	0.711	0.420
227.175	C17H22H+	0.048	0.018	0.044	0.078	0.019	0.185	0.036	0.188	0.249	0.131
228.088	C10H13O5NH+	0.027	0.011	0.026	0.055	0.010	0.115	0.022	0.114	0.171	0.089
229.102	C6H16O7N2H+	0.116	0.050	0.103	0.215	0.049	0.265	0.056	0.258	0.404	0.188
229.214	C14H28O2H+	0.072	0.047	0.067	0.211	0.023	0.235	0.056	0.223	0.341	0.170
230.106	C10H15O5NH+	0.030	0.013	0.027	0.058	0.010	0.074	0.015	0.072	0.111	0.053
230.215	13CC13H28O2H+	0.023	0.011	0.021	0.044	0.008	0.054	0.011	0.051	0.074	0.041
231.084	C10H14O6H+	0.051	0.028	0.049	0.128	0.015	0.169	0.041	0.165	0.269	0.107
231.112	C13H14O2N2H+	0.051	0.018	0.053	0.086	0.018	0.254	0.048	0.251	0.362	0.188
231.205	C12H26O2N2H+	0.057	0.018	0.059	0.078	0.026	0.184	0.038	0.187	0.247	0.127
233.108	C10H16O6H+	0.026	0.013	0.027	0.061	0.008	0.128	0.027	0.125	0.194	0.098
233.133	C13H16O2N2H+	0.038	0.013	0.041	0.063	0.014	0.195	0.038	0.185	0.272	0.147
233.223	C17H28H+	0.060	0.019	0.065	0.087	0.028	0.178	0.035	0.179	0.230	0.127
235.149	C18H18H+	0.068	0.026	0.060	0.120	0.027	0.313	0.054	0.291	0.412	0.248
235.202	C16H26OH+	0.081	0.043	0.075	0.165	0.033	0.166	0.039	0.157	0.230	0.113
237.117	C13H16O4H+	0.060	0.025	0.051	0.099	0.027	0.200	0.037	0.190	0.278	0.162
237.16	C18H20H+	0.037	0.012	0.039	0.052	0.015	0.237	0.047	0.230	0.321	0.165
237.215	C16H28OH+	0.039	0.015	0.039	0.068	0.016	0.131	0.026	0.129	0.171	0.094
239.039	C7H10O9H+	0.019	0.011	0.016	0.048	0.006	0.217	0.038	0.210	0.293	0.163
239.176	C18H22H+	0.040	0.013	0.041	0.059	0.018	0.273	0.053	0.275	0.364	0.188
240.038	C6H9O9NH+	0.010	0.006	0.008	0.023	0.003	0.058	0.011	0.057	0.083	0.044
241.102	C7H16O7N2H+	0.048	0.018	0.048	0.094	0.017	0.259	0.054	0.240	0.381	0.208
241.193	C18H24H+	0.037	0.013	0.039	0.052	0.015	0.181	0.036	0.184	0.241	0.122
242.103	C11H15O5NH+	0.020	0.008	0.019	0.039	0.008	0.064	0.013	0.065	0.096	0.051
243.119	C12H18O5H+	0.056	0.022	0.056	0.117	0.022	0.157	0.038	0.151	0.247	0.110
243.228	C15H30O2H+	0.032	0.021	0.030	0.091	0.004	0.204	0.038	0.194	0.282	0.161
244.229	C14H29O2NH+	0.017	0.007	0.016	0.028	0.004	0.051	0.009	0.050	0.069	0.041
245.129	C14H16O2N2H+	0.058	0.020	0.061	0.103	0.021	0.219	0.049	0.207	0.334	0.160
245.223	C18H28H+	0.055	0.018	0.055	0.076	0.023	0.245	0.055	0.246	0.350	0.168
247.149	C14H18O2N2H+	0.049	0.017	0.052	0.079	0.018	0.230	0.047	0.218	0.333	0.176
247.237	C13H30O2N2H+	0.068	0.021	0.073	0.097	0.032	0.216	0.043	0.220	0.294	0.158
249.061	C9H12O8H+	0.032	0.018	0.030	0.081	0.011	0.109	0.027	0.104	0.168	0.066
249.168	C12H24O5H+	0.048	0.018	0.051	0.075	0.019	0.230	0.048	0.218	0.328	0.175
251.037	C8H10O9H+	0.013	0.008	0.012	0.027	0.001	0.108	0.023	0.105	0.155	0.072
251.09	C13H14O5H+	0.029	0.014	0.029	0.061	0.007	0.110	0.025	0.102	0.171	0.079
251.176	C19H22H+	0.048	0.016	0.049	0.071	0.017	0.278	0.054	0.269	0.379	0.201

Table S2: continue.

m/z	Formula	LDV					HDV				
		Ave	Std Dev	Med	Max	Min	Ave	Std Dev	Med	Max	Min
252.163	C14H21O3NH+	0.019	0.007	0.018	0.032	0.008	0.039	0.007	0.037	0.053	0.032
253.102	C13H16O5H+	0.194	0.108	0.163	0.460	0.067	0.102	0.030	0.095	0.163	0.059
253.192	C19H24H+	0.085	0.033	0.085	0.142	0.035	0.233	0.044	0.226	0.317	0.173
254.103	C12H15O5NH+	0.058	0.029	0.049	0.129	0.024	0.035	0.009	0.033	0.056	0.023
255.086	C12H14O6H+	0.065	0.035	0.058	0.165	0.021	0.113	0.024	0.106	0.165	0.086
255.176	C18H22OH+	0.015	0.005	0.015	0.025	0.007	0.031	0.006	0.030	0.044	0.023
255.115	C15H14O2N2H+	0.010	0.004	0.010	0.015	0.004	0.017	0.003	0.017	0.024	0.014
255.213	C19H26H+	0.045	0.019	0.044	0.074	0.016	0.101	0.016	0.098	0.131	0.080
256.26		0.023	0.014	0.018	0.056	0.007	0.037	0.008	0.037	0.055	0.024
259.242	C19H30H+	0.072	0.024	0.077	0.107	0.033	0.215	0.040	0.207	0.288	0.158
261.165	C13H24O5H+	0.046	0.013	0.049	0.069	0.023	0.183	0.036	0.172	0.254	0.141
261.251	C14H32O2N2H+	0.060	0.018	0.062	0.083	0.030	0.195	0.038	0.196	0.262	0.143
263.089	C14H14O5H+	0.038	0.016	0.039	0.068	0.015	0.057	0.016	0.054	0.097	0.034
263.237	C18H30OH+	0.042	0.014	0.043	0.060	0.015	0.415	0.115	0.360	0.666	0.265
264.24	13CC17H30OH+	0.015	0.006	0.014	0.025	0.005	0.099	0.026	0.088	0.153	0.067
265.104	C14H16O5H+	0.044	0.016	0.042	0.087	0.017	0.082	0.019	0.080	0.127	0.060
265.25	C18H32OH+	0.030	0.021	0.027	0.093	0.005	0.326	0.082	0.293	0.514	0.223
266.258	13CC17H32OH+	0.013	0.008	0.012	0.029	0.002	0.082	0.019	0.077	0.123	0.060
267.118	C14H18O5H+	0.054	0.029	0.049	0.137	0.018	0.090	0.020	0.087	0.135	0.068
267.206	C20H26H+	0.040	0.013	0.042	0.065	0.013	0.192	0.036	0.192	0.258	0.143
269.009	C7H8O11H+	0.020	0.010	0.018	0.046	0.008	0.032	0.007	0.033	0.045	0.024
269.134	C14H20O5H+	0.049	0.020	0.048	0.099	0.018	0.117	0.025	0.113	0.172	0.092
269.226	C20H28H+	0.053	0.018	0.050	0.080	0.022	0.207	0.042	0.203	0.280	0.144
272.264	C16H33O2NH+	0.059	0.030	0.062	0.112	0.021	0.365	0.114	0.343	0.597	0.192
273.178	C13H24O4N2H+	0.055	0.017	0.058	0.083	0.026	0.129	0.027	0.123	0.186	0.098
273.254	C20H32H+	0.063	0.021	0.061	0.095	0.026	0.221	0.047	0.223	0.304	0.157
275.179	C16H22O2N2H+	0.044	0.014	0.046	0.066	0.019	0.151	0.029	0.147	0.202	0.114
275.268	C20H34H+	0.061	0.019	0.060	0.089	0.029	0.178	0.033	0.178	0.238	0.138
277.101	C10H16O7N2H+	0.052	0.023	0.051	0.095	0.020	0.032	0.011	0.033	0.056	0.016
277.196	C14H28O5H+	0.042	0.013	0.043	0.057	0.019	0.165	0.034	0.159	0.237	0.126
278.103	C14H15O5NH+	0.026	0.010	0.025	0.044	0.011	0.016	0.006	0.016	0.027	0.009
279.154	C16H22O4H+	0.151	0.068	0.138	0.242	0.060	0.091	0.026	0.082	0.154	0.061
280.159	13CC15H22O4H+	0.014	0.006	0.012	0.028	0.006	0.017	0.004	0.017	0.025	0.011
281.05	C9H12O10H+	0.010	0.004	0.009	0.020	0.004	0.009	0.003	0.009	0.016	0.006
281.228	C21H28H+	0.037	0.012	0.039	0.059	0.015	0.182	0.037	0.180	0.249	0.140
282.13	C14H19O5NH+	0.001	0.001	0.001	0.002	0.000	0.001	0.001	0.001	0.003	0.001
282.05	C8H11O10NH+	0.001	0.001	0.001	0.003	0.000	0.001	0.000	0.002	0.003	0.001
283.046	C12H10O8H+	0.022	0.007	0.022	0.031	0.012	0.018	0.004	0.019	0.025	0.012
283.256	C18H34O2H+	0.036	0.018	0.037	0.080	0.009	0.186	0.038	0.183	0.260	0.143
284.288	C18H37ONH+	0.017	0.011	0.014	0.036	0.003	0.041	0.008	0.041	0.055	0.028
287.271	C21H34H+	0.076	0.025	0.080	0.117	0.034	0.231	0.042	0.225	0.309	0.184
289.198	C15H28O5H+	0.047	0.014	0.048	0.068	0.020	0.137	0.025	0.135	0.183	0.108
289.282	C16H36O2N2H+	0.075	0.025	0.074	0.125	0.038	0.186	0.032	0.181	0.243	0.149
291.122	C16H18O5H+	0.029	0.011	0.030	0.054	0.015	0.033	0.008	0.033	0.049	0.022
291.213	C15H30O5H+	0.040	0.012	0.044	0.051	0.017	0.147	0.030	0.141	0.207	0.112
293.174	C17H24O4H+	0.024	0.010	0.023	0.039	0.009	0.043	0.011	0.040	0.064	0.030
293.234	C15H32O5H+	0.028	0.010	0.031	0.042	0.008	0.213	0.051	0.201	0.321	0.149
295.255	C19H34O2H+	0.072	0.026	0.064	0.116	0.038	0.404	0.097	0.385	0.605	0.284
296.254	C18H33O2NH+	0.014	0.005	0.014	0.021	0.005	0.108	0.025	0.100	0.160	0.079
297.077	C10H16O10H+	0.022	0.006	0.023	0.031	0.013	0.028	0.009	0.028	0.045	0.017

Table S2: continue.

m/z	Formula	LDV					HDV				
		Ave	Std Dev	Med	Max	Min	Ave	Std Dev	Med	Max	Min
297.272	C19H36O2H+	0.120	0.051	0.102	0.213	0.063	0.584	0.138	0.572	0.860	0.407
298.274	C18H35O2NH+	0.014	0.006	0.014	0.020	0.004	0.135	0.032	0.134	0.197	0.091
299.289	C19H38O2H+	0.243	0.127	0.189	0.476	0.112	1.012	0.224	0.993	1.470	0.749
300.293	C18H37O2NH+	0.058	0.028	0.045	0.111	0.030	0.236	0.052	0.238	0.343	0.174
301.1	C12H16O7N2H+	0.013	0.007	0.012	0.024	0.000	0.014	0.006	0.016	0.025	0.006
301.284	C22H36H+	0.055	0.014	0.058	0.071	0.028	0.268	0.052	0.256	0.364	0.208
302.286	C21H35NH+	0.018	0.006	0.020	0.026	0.008	0.074	0.014	0.075	0.100	0.055
303.217	C16H30O5H+	0.037	0.011	0.039	0.054	0.016	0.127	0.024	0.121	0.177	0.100
303.299	C22H38H+	0.046	0.012	0.048	0.062	0.022	0.177	0.034	0.172	0.236	0.136
305.132	C12H20O7N2H+	0.022	0.010	0.020	0.045	0.010	0.030	0.008	0.028	0.048	0.017
305.229	C16H32O5H+	0.035	0.010	0.036	0.048	0.015	0.132	0.025	0.129	0.180	0.099
307.143	C13H22O8H+	0.010	0.011	0.008	0.033	0.000	0.003	0.003	0.002	0.011	0.000
307.241	C23H30H+	0.039	0.014	0.041	0.056	0.013	0.148	0.031	0.141	0.207	0.107
309.255	C23H32H+	0.037	0.011	0.041	0.052	0.018	0.196	0.041	0.191	0.273	0.147
311.271	C23H34H+	0.042	0.012	0.046	0.060	0.022	0.221	0.044	0.221	0.302	0.166
313.288	C23H36H+	0.042	0.013	0.045	0.061	0.018	0.232	0.046	0.221	0.312	0.172
314.291	13CC22H36H+	0.014	0.005	0.015	0.023	0.006	0.071	0.014	0.072	0.095	0.053
315.224	C16H30O4N2H+	0.042	0.012	0.043	0.060	0.019	0.111	0.020	0.104	0.152	0.087
315.299	C23H38H+	0.048	0.012	0.052	0.065	0.025	0.259	0.052	0.241	0.348	0.194
316.304	13CC22H38H+	0.018	0.005	0.020	0.025	0.008	0.084	0.016	0.082	0.112	0.061
317.231	C17H32O5H+	0.057	0.017	0.057	0.093	0.027	0.143	0.023	0.140	0.185	0.112
317.314	C23H40H+	0.051	0.013	0.055	0.065	0.027	0.214	0.040	0.204	0.281	0.160
318.318	13CC22H40H+	0.020	0.006	0.021	0.028	0.009	0.070	0.013	0.067	0.092	0.052
319.244	C17H34O5H+	0.043	0.011	0.044	0.058	0.020	0.153	0.027	0.145	0.197	0.112
321.257	C24H32H+	0.041	0.011	0.041	0.061	0.021	0.169	0.032	0.162	0.226	0.119
322.259	C23H31NH+	0.013	0.005	0.014	0.020	0.005	0.048	0.010	0.048	0.065	0.034
323.271	C24H34H+	0.040	0.011	0.041	0.054	0.019	0.197	0.039	0.189	0.267	0.145
324.272	13CC23H34H+	0.013	0.005	0.013	0.023	0.005	0.064	0.013	0.065	0.087	0.047
325.287	C24H36H+	0.048	0.012	0.050	0.069	0.024	0.233	0.047	0.224	0.320	0.172
326.289	13CC23H36H+	0.017	0.005	0.018	0.025	0.007	0.074	0.014	0.072	0.098	0.052
327.301	C24H38H+	0.045	0.012	0.047	0.067	0.021	0.285	0.055	0.270	0.384	0.218
328.307		0.017	0.005	0.018	0.027	0.007	0.087	0.017	0.085	0.116	0.064
329.315	C24H40H+	0.060	0.015	0.062	0.086	0.030	0.324	0.063	0.304	0.436	0.243
330.319	C23H39NH+	0.021	0.005	0.022	0.029	0.010	0.098	0.019	0.095	0.130	0.070
331.247	C18H34O5H+	0.040	0.011	0.040	0.055	0.020	0.143	0.027	0.137	0.193	0.104
331.332	C24H42H+	0.051	0.013	0.054	0.073	0.027	0.256	0.050	0.245	0.345	0.192
332.335	13CC23H42H+	0.019	0.005	0.021	0.028	0.010	0.084	0.016	0.079	0.112	0.062
333.257	C18H36O5H+	0.034	0.009	0.034	0.046	0.018	0.124	0.024	0.122	0.171	0.092
333.341	C24H44H+	0.029	0.008	0.030	0.044	0.015	0.109	0.022	0.102	0.150	0.081
334.258	C24H31NH+	0.014	0.004	0.014	0.020	0.006	0.048	0.010	0.047	0.069	0.034
335.271	C25H34H+	0.040	0.010	0.041	0.054	0.022	0.163	0.032	0.158	0.222	0.120
336.275	C24H33NH+	0.014	0.004	0.014	0.020	0.006	0.054	0.010	0.052	0.074	0.039
337.286	C25H36H+	0.046	0.011	0.046	0.060	0.025	0.206	0.040	0.195	0.281	0.153
338.29	C24H35NH+	0.008	0.004	0.007	0.014	0.001	0.049	0.012	0.046	0.071	0.033
339.302	C25H38H+	0.053	0.013	0.054	0.076	0.030	0.236	0.046	0.226	0.322	0.171
340.306	13CC24H38H+	0.015	0.006	0.014	0.025	0.005	0.074	0.014	0.073	0.102	0.051
341.316	C25H40H+	0.053	0.014	0.055	0.077	0.027	0.275	0.051	0.265	0.371	0.207
342.319	C24H39NH+	0.020	0.005	0.022	0.028	0.009	0.088	0.017	0.085	0.119	0.064
343.331	C25H42H+	0.073	0.018	0.076	0.103	0.037	0.356	0.069	0.347	0.485	0.265
344.333	C24H41NH+	0.023	0.006	0.023	0.034	0.012	0.109	0.021	0.105	0.146	0.080

Table S2: continue.

m/z	Formula	LDV					HDV				
		Ave	Std Dev	Med	Max	Min	Ave	Std Dev	Med	Max	Min
345.259	C19H36O5H+	0.048	0.012	0.049	0.068	0.026	0.151	0.028	0.145	0.201	0.113
345.346	C25H44H+	0.063	0.015	0.065	0.089	0.033	0.294	0.057	0.289	0.400	0.219
346.35	C24H43NH+	0.023	0.006	0.024	0.030	0.011	0.099	0.020	0.096	0.136	0.072
347.272	C26H34H+	0.038	0.010	0.038	0.052	0.019	0.121	0.022	0.118	0.161	0.090
347.357	C25H46H+	0.031	0.008	0.031	0.047	0.016	0.117	0.023	0.113	0.158	0.085
348.276	13CC25H34H+	0.015	0.004	0.016	0.020	0.008	0.047	0.009	0.045	0.064	0.033
349.287	C26H36H+	0.050	0.012	0.049	0.068	0.028	0.171	0.032	0.166	0.233	0.126
350.289	C25H35NH+	0.018	0.005	0.018	0.025	0.008	0.058	0.011	0.058	0.079	0.042
351.301	C26H38H+	0.059	0.013	0.060	0.076	0.032	0.222	0.041	0.213	0.297	0.163
352.305	C25H37NH+	0.020	0.005	0.020	0.029	0.010	0.073	0.014	0.071	0.098	0.054
353.316	C26H40H+	0.070	0.015	0.071	0.095	0.038	0.251	0.049	0.250	0.345	0.183
354.32	13CC25H40H+	0.024	0.006	0.025	0.034	0.013	0.082	0.016	0.080	0.114	0.058
355.333	C26H42H+	0.080	0.018	0.086	0.105	0.040	0.337	0.063	0.334	0.461	0.256
356.336	13CC25H42H+	0.028	0.009	0.029	0.050	0.014	0.108	0.020	0.105	0.147	0.078
357.345	C26H44H+	0.092	0.020	0.093	0.122	0.047	0.387	0.074	0.390	0.521	0.286
358.35	C25H43NH+	0.031	0.007	0.033	0.041	0.016	0.124	0.024	0.122	0.171	0.090
359.275	C20H38O5H+	0.055	0.014	0.055	0.080	0.029	0.156	0.031	0.152	0.209	0.114
359.36	C21H46O2N2H+	0.080	0.017	0.081	0.105	0.042	0.325	0.062	0.330	0.445	0.244
360.279	13CC19H38O5H+	0.019	0.005	0.020	0.026	0.010	0.054	0.011	0.051	0.073	0.038
360.366	13CC20H46O2N2H+	0.025	0.006	0.026	0.036	0.014	0.100	0.020	0.099	0.141	0.073
361.287	C27H36H+	0.041	0.011	0.040	0.058	0.023	0.122	0.023	0.120	0.165	0.089
361.372	C26H48H+	0.033	0.008	0.033	0.048	0.018	0.120	0.023	0.119	0.162	0.089
362.291	13CC26H36H+	0.017	0.004	0.018	0.024	0.009	0.051	0.010	0.050	0.069	0.036
363.301	C27H38H+	0.058	0.014	0.058	0.077	0.029	0.170	0.030	0.167	0.229	0.127
364.303	13CC26H38H+	0.020	0.005	0.021	0.029	0.011	0.066	0.014	0.067	0.089	0.045
365.315	C27H40H+	0.071	0.016	0.075	0.094	0.036	0.225	0.041	0.232	0.302	0.166
366.319	C26H39NH+	0.025	0.006	0.027	0.034	0.014	0.076	0.014	0.074	0.102	0.055
367.332	C27H42H+	0.088	0.019	0.090	0.113	0.047	0.266	0.049	0.275	0.353	0.199
368.334	13CC26H42H+	0.030	0.007	0.031	0.042	0.017	0.089	0.016	0.091	0.120	0.064
369.346	C27H44H+	0.117	0.035	0.111	0.185	0.056	0.383	0.078	0.380	0.519	0.275
370.349	13CC26H44H+	0.042	0.013	0.041	0.065	0.023	0.126	0.025	0.127	0.169	0.088
371.361	C27H46H+	0.147	0.029	0.151	0.183	0.076	0.512	0.092	0.531	0.686	0.385
372.365	C26H45NH+	0.047	0.010	0.048	0.061	0.025	0.166	0.030	0.168	0.222	0.121
373.292	C21H40O5H+	0.063	0.015	0.062	0.088	0.033	0.152	0.030	0.149	0.204	0.109
373.375	C23H48O3H+	0.105	0.021	0.109	0.130	0.054	0.354	0.067	0.366	0.489	0.263
374.381	C26H47NH+	0.039	0.008	0.041	0.049	0.021	0.125	0.023	0.128	0.170	0.092
375.302	C28H38H+	0.044	0.011	0.043	0.059	0.023	0.114	0.021	0.111	0.155	0.086
375.387	C27H50H+	0.037	0.008	0.038	0.051	0.020	0.119	0.023	0.117	0.165	0.086
376.306	13CC27H38H+	0.020	0.005	0.021	0.027	0.010	0.051	0.011	0.050	0.072	0.035
377.317	C28H40H+	0.061	0.015	0.063	0.085	0.031	0.158	0.029	0.162	0.213	0.119
378.32	C27H39NH+	0.024	0.006	0.026	0.033	0.013	0.058	0.011	0.056	0.081	0.042
379.333	C28H42H+	0.083	0.018	0.084	0.110	0.042	0.212	0.038	0.218	0.282	0.159
380.336	C27H41NH+	0.029	0.007	0.030	0.039	0.016	0.074	0.014	0.073	0.102	0.054
381.346	C28H44H+	0.100	0.021	0.103	0.128	0.051	0.251	0.046	0.257	0.336	0.184
382.35	C27H43NH+	0.034	0.008	0.035	0.046	0.020	0.087	0.016	0.089	0.115	0.064
383.361	C28H46H+	0.148	0.030	0.156	0.184	0.075	0.374	0.069	0.381	0.511	0.277
384.365	C27H45NH+	0.051	0.011	0.052	0.065	0.026	0.127	0.023	0.129	0.171	0.093
385.375	C24H48O3H+	0.180	0.034	0.187	0.228	0.096	0.493	0.091	0.502	0.671	0.365
386.38	C27H47NH+	0.059	0.012	0.063	0.073	0.031	0.163	0.030	0.166	0.219	0.119
387.306	C22H42O5H+	0.065	0.015	0.065	0.091	0.034	0.134	0.028	0.129	0.184	0.093

Table S2: continue.

m/z	Formula	LDV					HDV				
		Ave	Std Dev	Med	Max	Min	Ave	Std Dev	Med	Max	Min
387.39	C24H50O3H+	0.124	0.023	0.130	0.154	0.068	0.345	0.065	0.348	0.474	0.257
388.395	C27H49NH+	0.048	0.010	0.049	0.058	0.026	0.128	0.023	0.126	0.173	0.095
389.317	C29H40H+	0.046	0.012	0.045	0.061	0.023	0.104	0.020	0.103	0.142	0.077
389.401		0.042	0.009	0.042	0.056	0.023	0.113	0.022	0.113	0.156	0.082
390.323	13CC28H40H+	0.021	0.006	0.022	0.030	0.011	0.050	0.010	0.048	0.069	0.035
391.253	C23H34O5H+	0.020	0.014	0.015	0.046	0.007	0.028	0.011	0.027	0.051	0.011
391.327	C25H42O3H+	0.058	0.017	0.057	0.086	0.030	0.132	0.022	0.131	0.179	0.102
392.328	13CC24H42O3H+	0.025	0.009	0.024	0.042	0.014	0.054	0.011	0.054	0.079	0.040
393.346	C29H44H+	0.089	0.020	0.092	0.116	0.046	0.195	0.036	0.196	0.263	0.147
394.348	C28H43NH+	0.030	0.007	0.031	0.038	0.016	0.069	0.013	0.069	0.094	0.050
395.361	C29H46H+	0.116	0.028	0.118	0.161	0.055	0.247	0.046	0.249	0.332	0.184
396.366	13CC28H46H+	0.041	0.010	0.043	0.057	0.023	0.089	0.017	0.090	0.120	0.063
397.377	C29H48H+	0.203	0.041	0.210	0.256	0.103	0.397	0.076	0.395	0.541	0.301
398.38	C28H47NH+	0.068	0.014	0.071	0.085	0.037	0.137	0.026	0.139	0.184	0.101
399.391	C25H50O3H+	0.227	0.042	0.242	0.289	0.124	0.494	0.095	0.491	0.674	0.370
400.395	C28H49NH+	0.079	0.016	0.082	0.098	0.042	0.171	0.032	0.169	0.229	0.128
401.32	C23H44O5H+	0.065	0.015	0.065	0.085	0.031	0.106	0.019	0.104	0.138	0.072
401.406	C25H52O3H+	0.137	0.026	0.143	0.173	0.074	0.312	0.060	0.302	0.430	0.237
402.41	13CC24H52O3H+	0.051	0.010	0.054	0.063	0.029	0.117	0.021	0.115	0.156	0.088
403.332	C30H42H+	0.042	0.011	0.041	0.057	0.021	0.085	0.017	0.083	0.120	0.062
403.417		0.043	0.009	0.044	0.055	0.024	0.100	0.018	0.099	0.138	0.075
404.335	13CC29H42H+	0.021	0.005	0.022	0.030	0.010	0.043	0.009	0.042	0.062	0.030
405.347	C30H44H+	0.061	0.013	0.062	0.081	0.030	0.120	0.022	0.120	0.164	0.093
406.35	C29H43NH+	0.024	0.006	0.024	0.033	0.012	0.048	0.010	0.046	0.066	0.034
407.361	C30H46H+	0.084	0.019	0.087	0.111	0.042	0.159	0.030	0.152	0.221	0.120
408.364	C29H45NH+	0.031	0.008	0.032	0.044	0.018	0.062	0.013	0.061	0.089	0.044
409.375	C26H48O3H+	0.114	0.028	0.115	0.150	0.055	0.207	0.042	0.198	0.293	0.157
410.38	C29H47NH+	0.045	0.011	0.046	0.067	0.025	0.080	0.016	0.077	0.115	0.058
411.39	C26H50O3H+	0.196	0.044	0.198	0.264	0.100	0.307	0.063	0.282	0.419	0.225
412.395	C29H49NH+	0.074	0.016	0.078	0.100	0.041	0.114	0.022	0.114	0.153	0.086
413.405	C26H52O3H+	0.203	0.038	0.213	0.265	0.115	0.357	0.071	0.340	0.496	0.268
414.409	13CC25H52O3H+	0.077	0.015	0.080	0.096	0.045	0.131	0.025	0.128	0.181	0.099
415.42	C26H54O3H+	0.144	0.027	0.152	0.180	0.082	0.257	0.053	0.238	0.363	0.194
416.425	13CC25H54O3H+	0.051	0.011	0.054	0.068	0.029	0.093	0.018	0.091	0.131	0.069
417.348	C31H44H+	0.037	0.009	0.036	0.053	0.020	0.065	0.013	0.064	0.090	0.047
417.432		0.040	0.008	0.041	0.050	0.022	0.082	0.015	0.081	0.114	0.061
419.357	C27H46O3H+	0.059	0.014	0.061	0.085	0.030	0.087	0.016	0.085	0.118	0.064
420.363	13CC26H46O3H+	0.022	0.007	0.023	0.033	0.012	0.038	0.008	0.037	0.053	0.027
421.375	C27H48O3H+	0.068	0.015	0.070	0.096	0.035	0.109	0.020	0.106	0.146	0.082
422.379	C30H47NH+	0.028	0.007	0.029	0.041	0.015	0.046	0.010	0.046	0.066	0.033
423.389	C27H50O3H+	0.089	0.020	0.094	0.120	0.046	0.133	0.027	0.123	0.182	0.098
424.393	13CC26H50O3H+	0.035	0.008	0.035	0.050	0.020	0.053	0.010	0.054	0.070	0.039
425.405	C27H52O3H+	0.142	0.030	0.148	0.177	0.079	0.175	0.044	0.156	0.252	0.127
426.408	13CC26H52O3H+	0.060	0.013	0.062	0.080	0.035	0.071	0.014	0.067	0.097	0.051
427.42	C27H54O3H+	0.145	0.029	0.155	0.182	0.083	0.197	0.043	0.184	0.279	0.145
428.423	C30H53NH+	0.058	0.013	0.061	0.079	0.033	0.079	0.015	0.075	0.109	0.060
429.436	C27H56O3H+	0.107	0.021	0.110	0.131	0.059	0.154	0.034	0.141	0.218	0.113
430.077	C13H19O15NH+	0.001	0.000	0.001	0.001	0.000	--	--	--	--	--
430.44	13CC26H56O3H+	0.043	0.010	0.045	0.060	0.024	0.064	0.012	0.061	0.086	0.046
431.363	C32H46H+	0.042	0.011	0.043	0.064	0.024	0.063	0.011	0.062	0.086	0.046

Table S2: continue.

m/z	Formula	LDV					HDV				
		Ave	Std Dev	Med	Max	Min	Ave	Std Dev	Med	Max	Min
433.375	C28H48O3H+	0.044	0.012	0.044	0.072	0.023	0.064	0.012	0.062	0.088	0.048
434.378	C31H47NH+	0.018	0.006	0.019	0.028	0.009	0.030	0.007	0.029	0.042	0.021
435.392	C32H50H+	0.059	0.015	0.063	0.093	0.031	0.075	0.013	0.074	0.102	0.056
436.395	C31H49NH+	0.024	0.007	0.024	0.037	0.012	0.035	0.007	0.035	0.047	0.025
437.407	C28H52O3H+	0.067	0.015	0.070	0.096	0.036	0.084	0.017	0.079	0.118	0.062
438.409	13CC27H52O3H+	0.028	0.008	0.029	0.044	0.015	0.038	0.008	0.039	0.054	0.027
439.42	C28H54O3H+	0.096	0.023	0.098	0.133	0.052	0.100	0.024	0.094	0.148	0.071
440.424	13CC27H54O3H+	0.045	0.011	0.046	0.068	0.025	0.048	0.008	0.049	0.063	0.035
441.436	C28H56O3H+	0.098	0.021	0.106	0.133	0.055	0.110	0.025	0.101	0.156	0.083
442.438	13CC27H56O3H+	0.045	0.012	0.046	0.071	0.026	0.050	0.009	0.050	0.067	0.035
443.451	C28H58O3H+	0.078	0.018	0.083	0.111	0.042	0.092	0.020	0.086	0.130	0.072
444.455	C31H57NH+	0.036	0.011	0.037	0.061	0.020	0.044	0.008	0.044	0.058	0.030
445.382	C26H52O5H+	0.039	0.012	0.038	0.065	0.021	0.047	0.009	0.048	0.062	0.035
447.389	C29H50O3H+	0.040	0.013	0.040	0.069	0.019	0.045	0.008	0.045	0.060	0.033
449.405	C29H52O3H+	0.047	0.013	0.047	0.075	0.025	0.051	0.009	0.051	0.067	0.037
450.41	13CC28H52O3H+	0.022	0.008	0.021	0.035	0.011	0.028	0.006	0.027	0.040	0.019
451.421	C29H54O3H+	0.054	0.015	0.054	0.086	0.029	0.052	0.010	0.048	0.070	0.037
452.426	13CC28H54O3H+	0.025	0.009	0.025	0.044	0.014	0.029	0.006	0.030	0.039	0.021
453.435	C29H56O3H+	0.068	0.020	0.068	0.108	0.034	0.063	0.012	0.062	0.085	0.046
454.44	13CC28H56O3H+	0.033	0.011	0.031	0.057	0.018	0.033	0.006	0.034	0.041	0.023
455.451	C29H58O3H+	0.073	0.022	0.075	0.126	0.036	0.068	0.014	0.065	0.093	0.048
456.456	13CC28H58O3H+	0.036	0.013	0.034	0.064	0.019	0.036	0.006	0.038	0.044	0.025
457.466	C29H60O3H+	0.063	0.021	0.066	0.113	0.031	0.059	0.011	0.058	0.075	0.043
458.468	13CC28H60O3H+	0.029	0.011	0.027	0.056	0.015	0.031	0.006	0.032	0.041	0.020
459.389	C30H50O3H+	0.028	0.011	0.027	0.055	0.014	0.033	0.006	0.032	0.043	0.023
461.406	C30H52O3H+	0.032	0.012	0.030	0.062	0.017	0.032	0.006	0.032	0.043	0.023
463.42	C30H54O3H+	0.039	0.014	0.038	0.069	0.019	0.036	0.006	0.036	0.046	0.026
464.427	C33H53NH+	0.019	0.008	0.019	0.036	0.008	0.022	0.006	0.022	0.035	0.012
465.436	C30H56O3H+	0.043	0.016	0.041	0.080	0.022	0.037	0.006	0.038	0.047	0.026
466.438	C33H55NH+	0.019	0.009	0.018	0.038	0.010	0.021	0.006	0.022	0.031	0.013
467.45	C30H58O3H+	0.052	0.020	0.052	0.099	0.025	0.042	0.007	0.046	0.052	0.029
468.454	13CC29H58O3H+	0.028	0.013	0.026	0.057	0.013	0.025	0.006	0.026	0.035	0.016
469.466	C30H60O3H+	0.058	0.023	0.058	0.115	0.025	0.045	0.007	0.048	0.055	0.033
470.468	13CC29H60O3H+	0.028	0.012	0.026	0.057	0.014	0.026	0.006	0.028	0.036	0.016
471.48	C30H62O3H+	0.048	0.019	0.047	0.095	0.025	0.040	0.007	0.041	0.052	0.028
475.42	C31H54O3H+	0.025	0.011	0.022	0.051	0.011	0.024	0.006	0.024	0.035	0.015
477.436	C31H56O3H+	0.028	0.013	0.026	0.062	0.012	0.026	0.006	0.027	0.035	0.015
479.451	C31H58O3H+	0.034	0.016	0.031	0.075	0.016	0.027	0.006	0.026	0.039	0.018
481.466	C31H60O3H+	0.043	0.019	0.043	0.089	0.021	0.030	0.007	0.027	0.041	0.019
482.465	C34H59NH+	0.021	0.010	0.021	0.045	0.009	0.019	0.006	0.019	0.031	0.010
483.48	C31H62O3H+	0.043	0.020	0.040	0.094	0.020	0.032	0.007	0.030	0.044	0.019
484.483	13CC30H62O3H+	0.022	0.010	0.020	0.046	0.009	0.020	0.006	0.021	0.032	0.011
485.493	C31H64O3H+	0.038	0.018	0.037	0.084	0.016	0.028	0.007	0.025	0.038	0.018
489.434	C32H56O3H+	0.019	0.009	0.018	0.040	0.008	0.018	0.006	0.018	0.032	0.010
491.445	C32H58O3H+	0.023	0.011	0.020	0.050	0.009	0.020	0.006	0.020	0.031	0.011
493.463	C32H60O3H+	0.024	0.012	0.021	0.053	0.009	0.020	0.007	0.019	0.032	0.011
495.477	C32H62O3H+	0.031	0.016	0.028	0.074	0.011	0.020	0.006	0.021	0.030	0.010
497.493	C32H64O3H+	0.031	0.016	0.028	0.072	0.012	0.022	0.007	0.022	0.034	0.011
499.509	C32H66O3H+	0.028	0.014	0.024	0.061	0.011	0.020	0.007	0.020	0.032	0.009
505.043	C19H20O16H+	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000	--	--	--	--	--



**Table 2:** Continue

m/z	Formula	LDV					HDV				
		Ave	Std Dev	Med	Max	Min	Ave	Std Dev	Med	Max	Min
507.476	C33H62O3H+	0.018	0.010	0.016	0.044	0.007	0.013	0.006	0.013	0.025	0.005
509.491	C33H64O3H+	0.022	0.011	0.019	0.051	0.009	0.015	0.006	0.014	0.026	0.006
511.508	C33H66O3H+	0.023	0.012	0.019	0.055	0.009	0.015	0.006	0.015	0.028	0.006
651.101		0.005	0.002	0.005	0.011	0.002	0.006	0.002	0.005	0.012	0.002