

Supporting Information

CHEMICAL SPECIATION OF PM_{2.5} PARTICLES AT URBAN BACKGROUND AND RURAL SITES IN THE UK ATMOSPHERE

Roy M. Harrison* and Jianxin Yin

Table S1. Abbreviations for individual organic marker compounds

*** To whom correspondence should be addressed**

Division of Environmental Health & Risk Management, School of Geography, Earth & Environmental Sciences,
University of Birmingham, Edgbaston, Birmingham B15 2TT, United Kingdom

Tel: +44 (0)121 41 43494; Fax: +44 (0)121 41 43709; email: r.m.harrison@bham.ac.uk

Analyte	Abbreviation	Analyte	Abbreviation
<i>PAHs</i>		<i>Alkanes</i>	
Benz[de]anthracen-7-one	B[de]AO	<i>n</i> -Tetracosane	C24
Benz[a]anthracene-7,12-dione	B[a]ADIO	<i>n</i> -Pentacosane	C25
Benzo[b]fluoranthene	B[b]F	<i>n</i> -Hexacosane	C26
Benzo[k]fluoranthene	B[k]F	<i>n</i> -Heptacosane	C27
Benzo[e]pyrene	B[e]P	<i>n</i> -Octacosane	C28
Benzo[a]pyrene	B[a]P	<i>n</i> -Nonacosane	C29
Perylene	PER	<i>n</i> -Triacontane	C30
Indeno[1,2,3-cd]fluoranthene	IF	<i>n</i> -Hentriacontane	C31
Indeno[1,2,3-cd]pyrene	IP	<i>n</i> -Dotriacontane	C32
Dibenz[a,h]anthracene	D[ah]A	<i>n</i> -Tritriacontane	C33
Picene/Dibenzo[a,i]phenanthrene	PIC	<i>n</i> -Tetratriacontane	C34
Benzo[ghi]perylene	B[ghi]PER	<i>n</i> -Pentatriacontane	C35
Coronene	COR		
<i>Acids</i>		<i>Hopanes</i>	
Butanedioic acid	ButDiA	17 α (H)-22,29,30-Trisnorhopane	17 α TNohop
Pentanedioic acid	PentDiA	17 α (H),21 β (H)-30-norhopane	17 α Nohop
Hexanedioic acid	HexDiA	17 α (H),21 β (H)-Hopane	17 α Hop
Heptanedioic acid	HeptDiA	22S-17 α (H),21 β (H)-30-Homohopane	22S $\alpha\beta$ HH
Octanedioic acid	OctDiA	22R-17 α (H),21 β (H)-30-Homohopane	22R $\alpha\beta$ HH
Nonanedioic acid	NonDiA	22S-17 α (H),21 β (H)-30-Bishomohopane	22S $\alpha\beta$ BHH
1,2-Benzenedicarboxylic acid	1,2BZDiA	22R-17 α (H),21 β (H)-30-Bishomohopane	22R $\alpha\beta$ BHH
1,4-Benzenedicarboxylic acid	1,4BZDiA	22S-17 α (H),21 β (H)-30,31,32-trishomohopane	22S $\alpha\beta$ THH
1,3-Benzenedicarboxylic acid	1,3BZDiA	22R-17 α (H),21 β (H)-30,31,32-trishomohopane	22R $\alpha\beta$ THH
1,2,3-Benzenetricarboxylic acid	1,2,3BZTrA		
1,2,4-Benzenetricarboxylic acid	1,2,4BZTrA	<i>Sterols</i>	
1,3,5-Benzenetricarboxylic acid	1,3,5BZTrA	Levoglucosan	Levo
Pimaric acid	PimaA	Cholesterol	Chol
Isopimaric acid	IsoPimaA		

Table S2. Inter-species correlation for *n*-alkanes at EROS (bottom) and CPSS (top)

	<i>PM2.5</i>	<i>SO4</i>	<i>NO3</i>	<i>OC</i>	<i>EC</i>	<i>TC</i>	<i>C24</i>	<i>C25</i>	<i>C26</i>	<i>C27</i>	<i>C28</i>	<i>C29</i>	<i>C30</i>	<i>C31</i>	<i>C32</i>	<i>C33</i>	<i>C34</i>	<i>C35</i>
<i>PM2.5</i>		0.90	0.54	0.40	-0.08	0.27	-0.33	0.04	-0.32	0.08	-0.21	-0.21	-0.13	-0.41	-0.25	-0.14	-0.35	0.25
<i>SO4</i>	0.90		0.26	0.17	-0.24	0.01	-0.32	0.11	-0.27	0.10	-0.21	-0.08	-0.17	-0.35	-0.20	-0.26	-0.26	0.16
<i>NO3</i>	0.81	0.55		0.29	0.04	0.23	-0.11	-0.06	-0.36	-0.05	-0.20	-0.30	0.01	-0.35	-0.25	-0.16	-0.34	0.27
<i>OC</i>	0.78	0.46	0.74		0.19	0.87	0.04	0.44	0.19	0.64	0.28	0.10	0.30	0.08	0.11	0.56	-0.34	0.16
<i>EC</i>	0.20	-0.12	0.17	0.47		0.60	0.10	-0.13	0.03	-0.16	-0.04	-0.36	-0.08	-0.18	-0.09	-0.19	-0.08	-0.25
<i>TC</i>	0.68	0.30	0.62	0.94	0.75		0.00	0.23	0.09	0.41	0.10	-0.13	0.11	0.02	-0.05	0.34	-0.30	-0.02
<i>C24</i>	0.14	-0.01	0.11	0.37	0.51	0.48		0.26	0.63	0.04	0.64	0.13	0.62	0.12	0.59	0.23	0.05	0.15
<i>C25</i>	0.25	0.09	0.21	0.53	0.18	0.47	0.59		0.51	0.87	0.46	0.49	0.38	0.12	0.36	0.18	0.02	0.13
<i>C26</i>	0.18	-0.01	0.09	0.43	0.41	0.48	0.62	0.47		0.31	0.87	0.17	0.74	0.32	0.84	0.48	0.24	0.30
<i>C27</i>	0.25	0.17	0.18	0.49	-0.05	0.35	0.34	0.91	0.22		0.33	0.58	0.28	0.25	0.19	0.39	-0.09	0.01
<i>C28</i>	0.38	-0.04	0.31	0.54	0.85	0.74	0.64	0.33	0.57	0.05		0.17	0.90	0.31	0.91	0.50	0.10	0.23
<i>C29</i>	-0.26	-0.15	-0.06	-0.01	-0.29	-0.12	0.28	0.44	0.15	0.54	-0.15		0.14	0.37	0.01	0.27	0.34	-0.13
<i>C30</i>	-0.01	-0.24	0.11	0.33	0.52	0.46	0.33	0.02	0.47	-0.14	0.47	-0.13		0.35	0.84	0.44	0.02	0.24
<i>C31</i>	0.08	0.28	-0.08	0.08	-0.03	0.05	0.20	0.03	0.11	0.02	-0.04	0.32	0.06		0.42	0.43	0.47	0.01
<i>C32</i>	0.39	0.53	0.11	0.13	0.06	0.12	0.35	0.03	0.06	-0.07	0.11	-0.04	-0.09	0.68		0.41	0.14	0.28
<i>C33</i>	0.26	0.28	0.26	0.22	0.09	0.20	0.51	0.29	0.02	0.22	0.21	0.30	-0.05	0.53	0.68		-0.03	0.34
<i>C34</i>	-0.19	-0.11	-0.32	-0.14	0.11	-0.06	0.34	0.17	0.02	0.17	0.03	0.38	0.15	0.36	0.22	0.35		0.01
<i>C35</i>	0.04	-0.07	-0.01	0.19	0.55	0.37	0.46	0.03	0.26	-0.16	0.47	-0.17	0.54	0.42	0.43	0.45	0.53	

Table S3. Inter-species correlation for hopanes at EROS (bottom) and CPSS (top)

	<i>PM2.5</i>	<i>SO4</i>	<i>NO3</i>	<i>OC</i>	<i>EC</i>	<i>TC</i>	<i>17aTNohop</i>	<i>17aNohop</i>	<i>17aHop</i>	<i>22SabHH</i>	<i>22RabHH</i>	<i>22SabBHH</i>	<i>22RabBHH</i>	<i>22SabTHH</i>	<i>22RabTHH</i>
<i>PM2.5</i>		0.90	0.54	0.40	-0.08	0.27	0.50	0.21	0.38	0.43	0.39	0.48	0.45	0.43	0.46
<i>SO4</i>	0.90		0.26	0.17	-0.24	0.01	0.41	0.20	0.30	0.35	0.25	0.39	0.35	0.35	0.37
<i>NO3</i>	0.81	0.55		0.29	0.04	0.23	0.37	0.02	0.25	0.28	0.21	0.30	0.31	0.32	0.34
<i>OC</i>	0.78	0.46	0.74		0.19	0.87	0.21	0.13	0.10	0.17	0.39	0.18	0.15	0.10	0.12
<i>EC</i>	0.20	-0.12	0.17	0.47		0.60	0.19	0.05	0.00	0.02	0.08	-0.02	-0.01	-0.08	-0.06
<i>TC</i>	0.68	0.30	0.62	0.94	0.75		0.27	0.16	0.09	0.15	0.35	0.13	0.11	0.04	0.06
<i>17aTNohop</i>	0.30	0.02	0.29	0.42	0.76	0.62		0.79	0.79	0.78	0.71	0.78	0.77	0.75	0.74
<i>17aNohop</i>	0.24	-0.09	0.23	0.41	0.85	0.65	0.95		0.89	0.87	0.84	0.84	0.83	0.80	0.79
<i>17aHop</i>	0.20	-0.12	0.20	0.41	0.87	0.66	0.94	0.99		0.98	0.90	0.98	0.98	0.97	0.97
<i>22SabHH</i>	0.21	-0.13	0.21	0.47	0.87	0.70	0.91	0.98	0.99		0.90	0.99	0.99	0.97	0.97
<i>22RabHH</i>	0.15	-0.17	0.18	0.39	0.88	0.65	0.91	0.99	0.99	0.99		0.91	0.91	0.88	0.90
<i>22SabBHH</i>	0.21	-0.14	0.20	0.43	0.86	0.67	0.91	0.97	0.98	0.98	0.99		0.99	0.99	0.99
<i>22RabBHH</i>	0.23	-0.13	0.20	0.44	0.87	0.67	0.90	0.98	0.99	0.98	0.99	1.00		0.99	0.99
<i>22SabTHH</i>	0.23	-0.11	0.20	0.42	0.85	0.65	0.90	0.96	0.98	0.97	0.98	0.99	0.99		0.99
<i>22RabTHH</i>	0.20	-0.14	0.17	0.41	0.85	0.64	0.90	0.97	0.98	0.97	0.98	0.99	0.99	0.99	

Table S4. Inter-species correlation for PAHs at EROS (bottom) and CPSS (top)

	<i>PM2.5</i>	<i>SO4</i>	<i>NO3</i>	<i>OC</i>	<i>EC</i>	<i>TC</i>	<i>B[de]AO</i>	<i>B[a]ADIO</i>	<i>B[b]F</i>	<i>B[k]F</i>	<i>B[e]P</i>	<i>B[a]P</i>	<i>PER</i>	<i>IF</i>	<i>IP</i>	<i>D[ah]A</i>	<i>PIC</i>	<i>B[ghi]PER</i>	<i>COR</i>
PM2.5		0.90	0.54	0.40	-0.08	0.27	0.28	0.60	0.60	0.50	0.57	0.40	0.37	0.35	0.55	0.49	0.29	0.56	0.67
SO4	0.90		0.26	0.17	-0.24	0.01	0.03	0.42	0.45	0.35	0.41	0.26	0.24	0.16	0.41	0.34	0.11	0.40	0.50
NO3	0.81	0.55		0.29	0.04	0.23	0.16	0.27	0.26	0.19	0.23	0.15	0.08	0.13	0.19	0.17	0.07	0.26	0.39
OC	0.78	0.46	0.74		0.19	0.87	0.71	0.67	0.60	0.53	0.61	0.51	0.50	0.59	0.62	0.64	0.72	0.55	0.55
EC	0.20	-0.12	0.17	0.47		0.60	0.59	0.48	0.58	0.70	0.62	0.73	0.68	0.66	0.58	0.56	0.32	0.64	0.50
TC	0.68	0.30	0.62	0.94	0.75		0.80	0.72	0.71	0.72	0.74	0.72	0.69	0.74	0.73	0.73	0.69	0.70	0.64
B[de]AO	0.35	-0.05	0.19	0.48	0.89	0.72		0.87	0.83	0.85	0.85	0.84	0.83	0.94	0.87	0.90	0.91	0.82	0.75
B[a]ADIO	0.72	0.38	0.46	0.73	0.67	0.81	0.82		0.95	0.92	0.94	0.85	0.85	0.90	0.96	0.94	0.81	0.93	0.91
B[b]F	0.62	0.30	0.37	0.63	0.78	0.79	0.88	0.90		0.98	0.99	0.94	0.92	0.91	0.98	0.95	0.73	0.98	0.93
B[k]F	0.47	0.12	0.26	0.55	0.84	0.75	0.94	0.86	0.97		0.99	0.97	0.96	0.94	0.98	0.95	0.71	0.98	0.91
B[e]P	0.50	0.17	0.30	0.59	0.83	0.77	0.93	0.86	0.98	0.99		0.95	0.93	0.92	0.99	0.96	0.74	0.98	0.92
B[a]P	0.41	0.06	0.16	0.49	0.85	0.70	0.94	0.77	0.92	0.95	0.96		0.98	0.94	0.96	0.94	0.70	0.96	0.88
PER	0.28	0.00	0.11	0.42	0.82	0.64	0.90	0.74	0.90	0.93	0.93	0.96		0.95	0.94	0.94	0.73	0.94	0.88
IF	0.17	-0.10	0.05	0.38	0.83	0.62	0.95	0.76	0.85	0.93	0.91	0.94	0.93		0.94	0.95	0.84	0.92	0.85
IP	0.47	0.12	0.18	0.52	0.79	0.70	0.94	0.85	0.93	0.95	0.96	0.97	0.93	0.95		0.98	0.78	0.98	0.94
D[ah]A	0.50	0.23	0.20	0.54	0.71	0.69	0.87	0.87	0.95	0.95	0.95	0.92	0.90	0.90	0.96		0.86	0.95	0.90
PIC	0.53	0.41	0.21	0.49	0.57	0.60	0.68	0.74	0.86	0.81	0.83	0.80	0.79	0.73	0.82	0.88		0.70	0.67
B[ghi]PER	0.25	-0.06	0.11	0.42	0.80	0.63	0.95	0.75	0.84	0.91	0.90	0.96	0.91	0.95	0.96	0.88	0.69		0.97
COR	0.21	-0.03	0.07	0.34	0.67	0.52	0.86	0.67	0.76	0.82	0.82	0.89	0.84	0.90	0.93	0.84	0.67	0.97	

Table S5. Inter-species correlation for acids at EROS (bottom) and CPSS (top)

	<i>PM2.5</i>	<i>SO4</i>	<i>NO3</i>	<i>OC</i>	<i>EC</i>	<i>TC</i>	<i>ButDiA</i>	<i>PentDiA</i>	<i>HexDiA</i>	<i>HeptDiA</i>	<i>OctDiA</i>	<i>NonDiA</i>	<i>1,2BZDiA</i>	<i>1,4BZDiA</i>	<i>1,3BZDiA</i>	<i>1,2,3BZTrA</i>	<i>1,2,4BZTrA</i>	<i>1,3,5BZTrA</i>	<i>PimaA</i>	<i>IsoPimaA</i>
<i>PM2.5</i>		0.90	0.54	0.40	-0.08	0.27	0.58	0.63	0.54	0.30	0.15	0.05	0.83	0.53	0.40	0.57	0.49	0.15	0.04	0.25
<i>SO4</i>	0.90		0.26	0.17	-0.24	0.01	0.55	0.59	0.35	0.04	-0.07	-0.18	0.84	0.40	0.17	0.51	0.34	0.09	-0.23	0.04
<i>NO3</i>	0.81	0.55		0.29	0.04	0.23	0.60	0.60	0.67	0.42	0.10	0.01	0.22	0.10	0.33	0.36	0.40	-0.10	0.06	0.13
<i>OC</i>	0.78	0.46	0.74		0.19	0.87	0.12	0.21	0.38	0.67	0.69	0.69	0.33	0.63	0.53	0.45	0.37	0.26	0.68	0.51
<i>EC</i>	0.20	-0.12	0.17	0.47		0.60	-0.11	-0.10	0.05	0.15	-0.09	0.05	0.14	0.35	0.74	0.22	0.46	0.16	0.27	0.70
<i>TC</i>	0.68	0.30	0.62	0.94	0.75		0.04	0.12	0.31	0.57	0.48	0.55	0.31	0.64	0.75	0.49	0.48	0.32	0.66	0.71
<i>ButDiA</i>	0.57	0.57	0.38	0.17	-0.26	0.03		0.95	0.83	0.40	-0.03	-0.19	0.38	0.10	0.19	0.31	0.29	-0.16	-0.17	0.06
<i>PentDiA</i>	0.81	0.62	0.47	0.30	-0.18	0.15	0.93		0.85	0.45	0.04	-0.11	0.38	0.10	0.20	0.30	0.22	-0.17	-0.12	0.01
<i>HexDiA</i>	0.54	0.37	0.62	0.42	0.04	0.33	0.80	0.83		0.69	0.29	0.15	0.30	0.19	0.40	0.29	0.36	-0.04	0.17	0.20
<i>HeptDiA</i>	0.24	0.32	0.30	0.15	0.03	0.13	0.77	0.75	0.69		0.76	0.68	0.06	0.36	0.41	0.08	0.14	-0.14	0.65	0.37
<i>OctDiA</i>	0.51	0.20	0.46	0.65	0.55	0.71	0.32	0.36	0.58	0.51		0.95	-0.07	0.42	0.16	-0.10	-0.05	0.04	0.86	0.32
<i>NonDiA</i>	0.15	-0.14	0.28	0.44	0.79	0.65	-0.03	-0.03	0.27	0.33	0.68		-0.12	0.44	0.22	-0.15	-0.05	0.03	0.87	0.38
<i>1,2BZDiA</i>	0.87	0.83	0.68	0.68	0.16	0.58	0.35	0.45	0.40	0.22	0.36	0.17		0.69	0.59	0.78	0.72	0.28	-0.04	0.41
<i>1,4BZDiA</i>	0.25	-0.06	0.21	0.50	0.67	0.64	-0.27	-0.22	-0.05	0.10	0.41	0.73	0.33		0.71	0.55	0.61	0.25	0.52	0.77
<i>1,3BZDiA</i>	0.20	-0.10	0.20	0.47	0.82	0.68	-0.18	-0.14	0.07	0.21	0.56	0.87	0.23	0.88		0.64	0.79	0.23	0.38	0.79
<i>1,2,3BZTrA</i>	0.59	0.31	0.68	0.76	0.56	0.79	0.14	0.21	0.45	0.15	0.52	0.60	0.63	0.45	0.47		0.83	0.42	0.06	0.42
<i>1,2,4BZTrA</i>	0.39	0.04	0.46	0.58	0.80	0.76	-0.05	0.01	0.31	0.16	0.56	0.86	0.38	0.65	0.72	0.86		0.39	0.22	0.62
<i>1,3,5BZTrA</i>	0.30	0.37	0.23	0.33	-0.12	0.20	0.13	0.35	0.19	0.05	0.12	-0.22	0.45	-0.01	-0.17	0.14	-0.08		0.24	0.31
<i>PimaA</i>	0.23	-0.17	0.22	0.49	0.88	0.72	-0.15	-0.12	0.14	0.15	0.63	0.86	0.07	0.69	0.80	0.56	0.82	-0.25		0.61
<i>IsoPimaA</i>	0.25	-0.13	0.31	0.48	0.66	0.63	-0.10	-0.08	0.20	0.28	0.55	0.80	0.20	0.77	0.71	0.60	0.81	-0.08	0.82	

Table S6 Correlation matrix for daily data at EROS (bottom) & CPSS (top)

	<i>PM2.5</i>	<i>Cl⁻</i>	<i>SO4</i>	<i>NO3</i>	<i>OC</i>	<i>EC</i>	<i>Si</i>	<i>Al</i>	<i>Fe</i>	<i>Ti</i>	<i>Mn</i>	<i>Ni</i>	<i>Cu</i>	<i>Zn</i>	<i>Pb</i>	<i>Mg</i>	<i>Ca</i>	<i>K</i>	<i>Na</i>
<i>PM2.5</i>		-0.31	0.86	0.58	0.64	0.17	0.41	0.41	0.79	0.45	0.77	0.63	0.13	0.65	0.59	-0.21	0.35	0.56	-0.40
<i>Cl⁻</i>	-0.08		-0.32	-0.14	-0.40	-0.07	-0.21	-0.06	-0.35	-0.10	-0.31	-0.29	-0.20	-0.24	-0.21	0.70	-0.13	0.06	0.77
<i>SO4</i>	0.85	-0.28		0.23	0.35	-0.04	0.26	0.51	0.69	0.47	0.74	0.65	-0.10	0.59	0.58	-0.23	0.22	0.23	-0.37
<i>NO3</i>	0.80	-0.09	0.56		0.47	0.08	0.24	0.20	0.41	0.29	0.37	0.27	0.19	0.36	0.34	-0.26	0.12	0.40	-0.33
<i>OC</i>	0.83	-0.13	0.51	0.75		0.39	0.26	0.02	0.52	0.29	0.44	0.26	0.40	0.50	0.41	-0.19	0.22	0.72	-0.33
<i>EC</i>	0.38	-0.14	0.04	0.35	0.57		0.02	-0.34	0.31	0.06	0.15	-0.07	0.69	0.44	0.21	0.03	-0.02	0.48	-0.05
<i>Si</i>	0.63	-0.07	0.48	0.46	0.52	0.31		0.36	0.61	0.17	0.50	0.29	0.04	0.14	0.35	0.09	0.93	0.35	-0.25
<i>Al</i>	-0.01	-0.11	0.08	-0.21	-0.08	-0.01	0.23		0.40	0.18	0.44	0.27	-0.21	0.20	0.31	-0.01	0.28	0.00	-0.15
<i>Fe</i>	0.72	-0.21	0.56	0.50	0.69	0.51	0.71	-0.06		0.32	0.87	0.52	0.34	0.68	0.69	-0.16	0.46	0.46	-0.41
<i>Ti</i>	0.16	-0.12	0.14	0.12	0.12	0.14	0.09	0.29	0.07		0.27	0.17	-0.14	0.32	0.32	-0.02	0.18	0.28	-0.14
<i>Mn</i>	0.39	-0.24	0.35	0.31	0.38	0.07	0.32	-0.09	0.61	0.01		0.61	0.06	0.66	0.73	-0.15	0.37	0.39	-0.36
<i>Ni</i>	0.37	-0.10	0.22	0.34	0.40	0.23	0.27	-0.05	0.34	0.23	0.19		-0.06	0.38	0.44	-0.11	0.26	0.23	-0.24
<i>Cu</i>	-0.05	-0.08	-0.16	-0.02	0.24	0.58	0.14	0.07	0.30	-0.05	0.09	-0.07		0.23	0.12	-0.18	-0.05	0.28	-0.21
<i>Zn</i>	0.30	-0.06	0.16	0.28	0.44	0.22	0.29	-0.12	0.55	-0.02	0.80	0.14	0.29		0.70	-0.18	0.08	0.37	-0.33
<i>Pb</i>	0.39	0.12	0.20	0.24	0.48	0.24	0.42	-0.03	0.52	-0.06	0.42	0.08	0.28	0.63		0.01	0.27	0.39	-0.18
<i>Mg</i>	0.00	0.70	-0.16	-0.21	0.00	-0.10	0.15	0.06	0.12	-0.19	-0.04	0.00	0.07	0.22	0.43		0.23	0.25	0.93
<i>Ca</i>	0.54	0.03	0.40	0.26	0.45	0.12	0.33	0.06	0.44	-0.08	0.13	0.36	-0.24	0.16	0.34	0.39		0.31	-0.10
<i>K</i>	0.19	0.54	0.00	-0.01	0.27	0.12	0.33	0.17	0.25	-0.10	0.01	0.01	0.29	0.27	0.59	0.76	0.28		0.07
<i>Na</i>	-0.19	0.72	-0.29	-0.30	-0.21	-0.23	-0.09	-0.06	-0.06	-0.23	-0.08	0.00	-0.10	0.10	0.18	0.91	0.31	0.49	

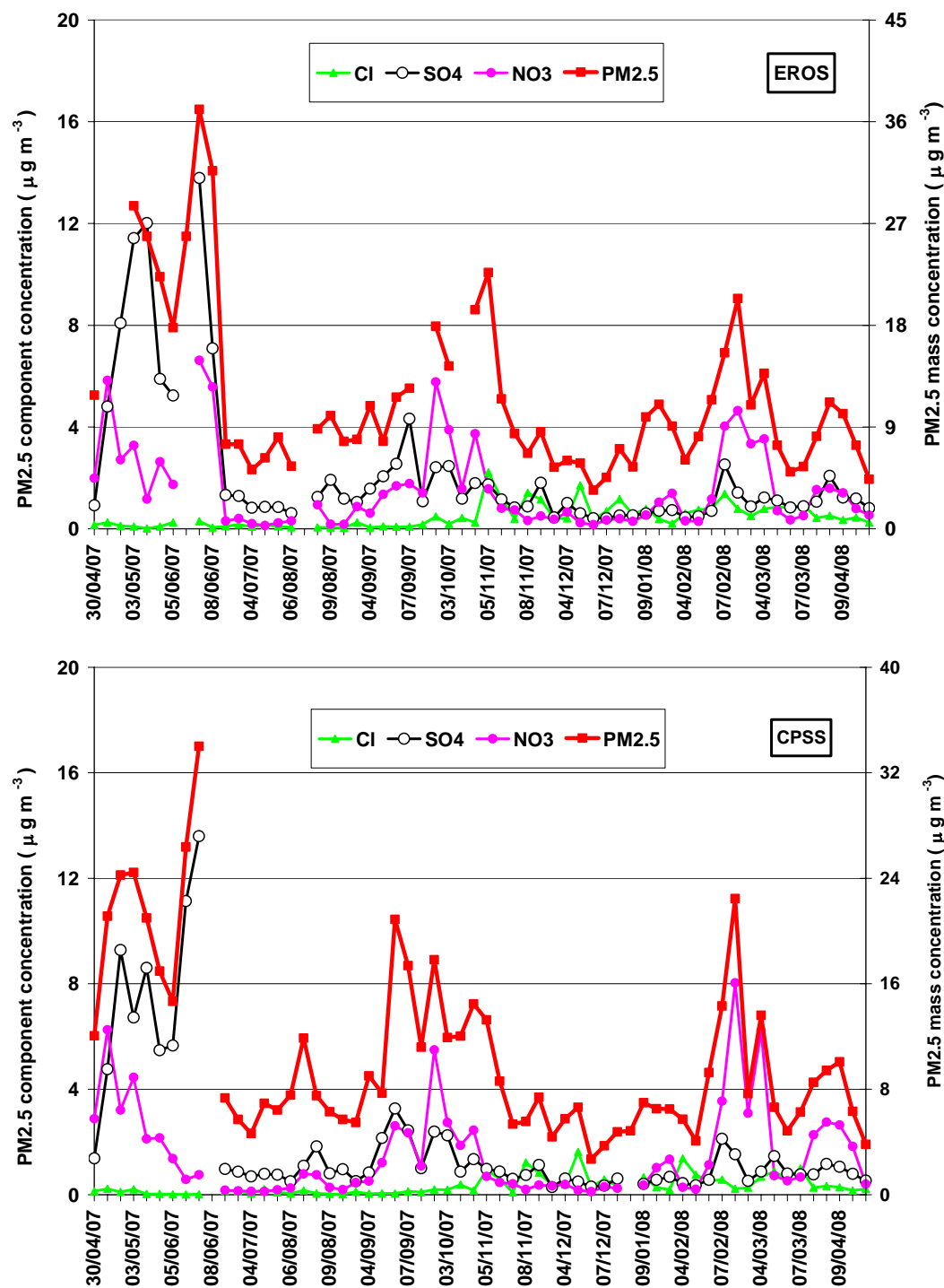


Figure S1. Daily variations for PM_{2.5}, chloride, nitrate and sulphate at EROS and CPSS

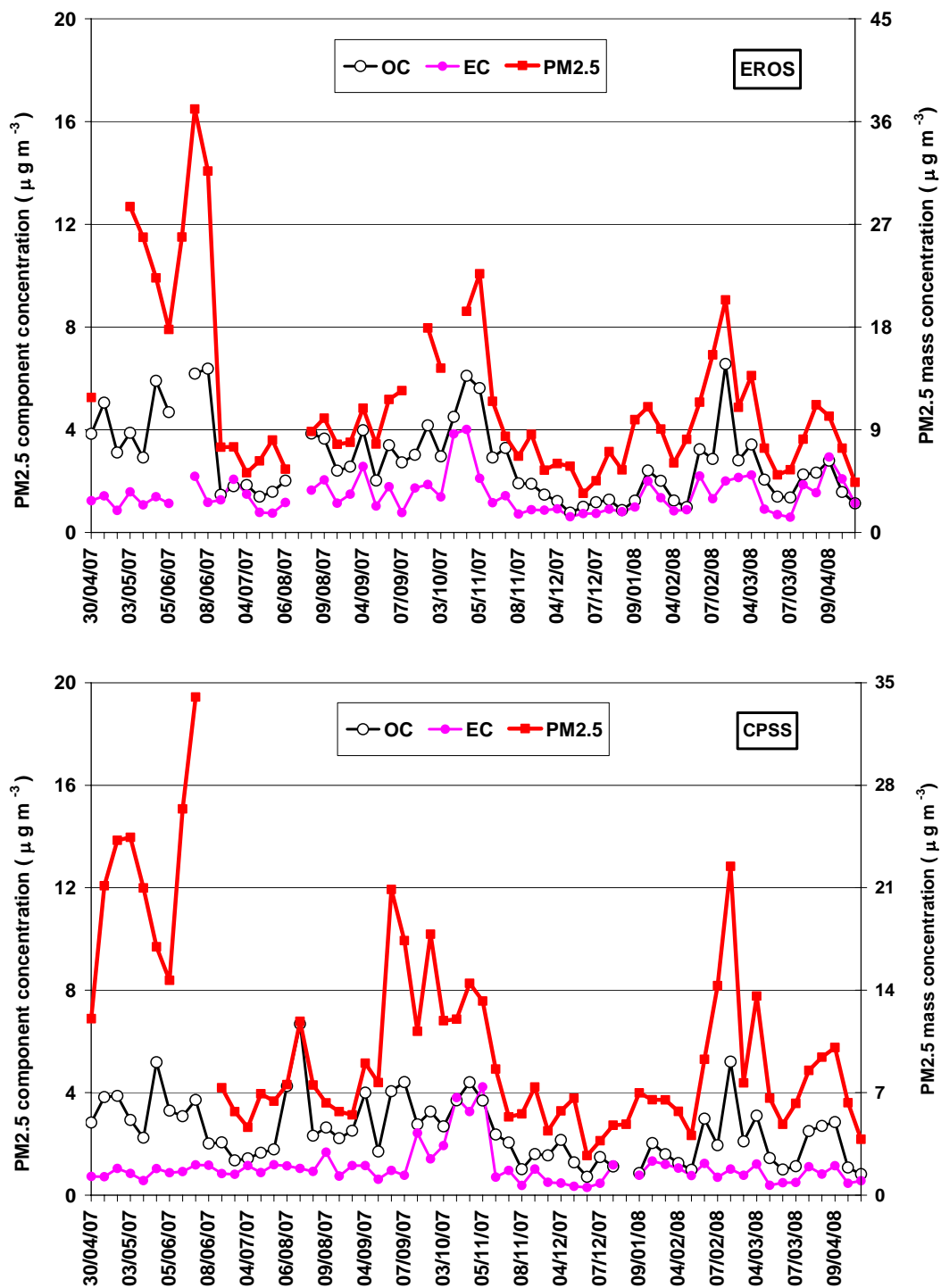


Figure S2. Daily variations for $\text{PM}_{2.5}$, EC and OC at EROS and CPSS