Electronic supplementary information:

Absolute electron-impact total ionization cross-sections: molecular analogues of DNA and RNA nucleobase and sugar constituents

James N. Bull, Jason W. L. Lee, and Claire Vallance

1. Molecular structures for the model species studied experimentally



1,4,5,6-tetrahydropyrmidine

piperidine



ethyl acetamide

2. Structures for the DNA and RNA constituents







	Ехрегин	circaily uct	er mineu (Jections /
EE / eV	indene	toluene	aniline	benzene	pyridine	pyrrole
285	15.62	11.51	11.83	9.68	8.85	7.72
280	15.89	11.76	12.04	9.86	8.95	7.82
275	16.05	11.95	12.18	9.97	9.01	7.91
270	16.20	12.10	12.26	10.06	9.16	8.00
265	16.32	12.19	12.41	10.20	9.30	8.10
260	16.47	12.48	12.68	10.35	9.48	8.21
255	16.61	12.57	12.82	10.44	9.56	8.29
250	16.77	12.87	12.94	10.56	9.68	8.35
245	17.01	12.93	13.10	10.72	9.88	8.43
240	17.54	13.00	13.33	10.85	9.99	8.51
233	17.00	13.23	13.34	11.00	10.18	8.02 9.74
230	17.77	13.50	13.05	11.23	10.34	0.74
225	18.13	13.57	14.01	11.37	10.43	8 03
215	18.15	13.98	14.01	11.41	10.33	9.03
210	18.47	14 10	14.20	11.57	10.70	9.10
205	18.62	14.23	14.50	11.07	10.71	9.16
200	19.03	14.43	14.69	11.73	11.04	9.24
195	19.35	14.68	14.98	12.12	11.18	9.37
190	19.60	14.87	15.11	12.43	11.31	9.52
185	19.68	15.15	15.43	12.56	11.50	9.65
180	19.87	15.20	15.51	12.58	11.67	9.75
175	20.09	15.47	15.74	12.82	11.84	9.84
170	20.32	15.68	15.90	13.15	11.89	9.91
165	20.51	16.05	16.09	13.26	12.16	10.02
160	20.58	16.18	16.17	13.56	12.40	10.17
155	20.62	16.42	16.42	13.62	12.50	10.34
150	20.84	16.54	16.64	13.69	12.70	10.43
145	21.10	16.77	16.91	13.98	13.00	10.54
140	21.33	16.95	16.93	14.15	13.17	10.68
135	21.47	17.15	17.03	14.14	13.26	10.89
130	21.72	17.25	17.20	14.23	13.44	10.98
125	21.98	17.53	17.18	14.39	13.63	11.13
120	22.10	17.57	17.31	14.63	13.78	11.22
115	22.23	17.76	17.36	14.81	13.88	11.39
110	22.41	17.89	17.33	14.85	14.04	11.50
105	22.42	17.96	17.42	14.92	14.11	11.67
100	22.39	17.97	17.24	14.97	14.14	11.75
95	22.54	18.05	17.03	15.01	14.20	11.84
90	22.60	18.13	16.95	14.98	14.16	11.96
85 80	22.05	18.00	16.08	15.05	14.04	11.98
80 75	22.09	18.05	10.42	14.91	14.00	12.00
73	22.07	17.70	15.90	14.94	13.70	11.93
65	22.34	17.30	14.99	14.00	13.39	11.92
60	22.10	16.91	14.55	13.98	13.10	11.77
55	21.77	16 44	13.54	13.80	12.60	11.39
50	20.74	15.80	13.03	13.00	12.00	10.95
45	20.02	15.11	12.18	12.82	11.85	10.63
40	19.23	14.55	11.13	12.01	11.13	10.12
35	18.27	12.79	10.27	10.88	10.02	9.29
30	16.78	11.32	9.03	9.65	8.50	8.43
25	14.57	8.94	7.30	7.04	6.30	6.74
20	11.57	5.14	4.74	3.95	3.36	5.53
15	6.74	1.58	1.80	1.12	1.21	2.54
10	1.38	0.42	0.60	0.18	0.56	0.80

4.	Experimentally	y determined total ionization	cross-sections / Å ² : Aromatic molecules
----	----------------	-------------------------------	--

EE / eV	tetrahvdro-	piperidine	1.4.5.6-	2-methyl-	tetrahvdro-
	furfuryl	F F F F F F F F F F	tetrahvdro-	tetrahvdro-	furan
	alcohol		pyrimidine	furan	
285	9.81	10.26	8 91	8 21	7 42
280	10.01	10.40	9.02	8.35	7.57
275	10.14	10.53	9.13	8.43	7.67
270	10.20	10.62	9.23	8.50	7.71
265	10.40	10.75	9.35	8.58	7.86
260	10.56	10.89	9.48	8.75	7.98
255	10.73	10.99	9.57	8.82	8.11
250	10.85	11.05	9.64	8.91	8.21
245	11.09	11.18	9.72	8.99	8.39
240	11.25	11.28	9.82	9.12	8.51
235	11.26	11.35	9.95	9.18	8.51
230	11.50	11.52	10.09	9.26	8.70
225	11.63	11.66	10.22	9.29	8.79
220	11.70	11.71	10.31	9.44	8.85
215	11.88	11.91	10.42	9.60	8.98
210	11.99	11.99	10.50	9.71	9.07
205	12.06	12.05	10.57	9.82	9.12
200	12.19	12.21	10.67	9.94	9.22
195	12.31	12.36	10.81	9.99	9.30
190	12.38	12.56	10.99	10.07	9.36
185	12.43	12.67	11.14	10.19	9.40
180	12.71	12.81	11.25	10.31	9.61
175	12.80	12.93	11.36	10.42	9.68
170	13.00	13.09	11.44	10.44	9.83
165	13.10	13.26	11.56	10.65	9.91
160	13.33	13.31	11.74	10.76	10.08
155	13.47	13.48	11.93	10.93	10.19
150	13.59	13.61	12.04	11.02	10.28
145	13.70	13./3	12.10	11.12	10.36
140	13.09	13.92	12.32	11.28	10.55
133	14.02	14.03	12.30	11.50	10.00
130	14.22	14.12	12.07	11.50	10.73
123	14.20	14.22	12.04	11.30	10.75
120	14.50	14.38	12.94	11.77	11.01
110	14.57	14.55	13.02	11.05	11.01
105	14.05	14.33	13.27	12.06	11.00
100	14.98	14.70	13.17	12.00	11.23
95	15.08	14.86	13.80	12.22	11.55
90	15.15	14 93	13.80	12.24	11.45
85	15.32	15.02	13.96	12.25	11.58
80	15.27	15.10	13.85	12.27	11.55
75	15.26	15.10	13.78	12.26	11.54
70	15.05	15.11	13.83	12.22	11.38
65	15.17	15.06	13.71	12.19	11.47
60	14.90	14.97	13.59	12.04	11.27
55	14.66	14.78	13.46	11.78	11.08
50	14.26	14.47	13.21	11.57	10.78
45	13.90	13.99	12.73	11.34	10.51
40	13.35	13.53	12.31	10.73	10.09
35	12.66	12.49	11.42	10.27	9.57
30	11.02	11.53	10.29	8.94	8.34
25	9.69	10.04	7.88	7.87	7.33
20	7.41	8.51	4.37	6.00	5.61
15	3.94	5.36	1.42	3.18	2.98
10	0.74	0.95	0.29	0.61	0.56

5. Experimentally determined total ionization cross-sections / Å²: non-aromatic cyclic molecules

EE / eV	hexane	cyclohexane	cyclohexene	cyclopentane
285	11.68	10.79	10.10	8.93
280	11.75	10.92	10.28	9.05
275	11.79	11.05	10.45	9.18
270	11.98	11.20	10.54	9.32
265	12.07	11.37	10.70	9.45
260	12.19	11.41	10.89	9.58
255	12.35	11.54	11.01	9.69
250	12.51	11.62	11.17	9.77
245	12.59	11.84	11.22	9.89
240	12.83	11.91	11.39	9.95
235	12.90	11.99	11.59	10.05
230	12.90	12.13	11.72	10.23
225	13.11	12.26	11.88	10.32
220	13.29	12.36	11.91	10.44
215	13.40	12.45	12.09	10.56
210	13.48	12.55	12.20	10.69
205	13.60	12.71	12.26	10.77
200	13.77	12.89	12.47	10.92
195	13.96	13.07	12.63	11.03
190	14.15	13 20	12.89	11.16
185	14.23	13.36	13.04	11.38
180	14 45	13.53	13.15	11.50
175	14.66	13.68	13 30	11.60
170	14 80	13.82	13.49	11.00
165	15.00	13.02	13.76	11.72
160	15.00	14.08	13.85	12.00
155	15.02	14.21	14.02	12.00
150	15.20	14.36	14.12	12.10
145	15.20	14.50	14.12	12.00
140	15.80	14.75	14.58	12.20
135	16.04	14.75	14.50	12.57
130	16.08	15.03	14.03	12.52
125	16.31	15.05	14.75	12.02
120	16.53	15.12	14.90	12.70
120	16.69	15.30	15.17	12.89
115	16.72	15.48	15.20	13.00
105	16.72	15.58	15.35	13.08
103	16.94	15.72	15.57	13.20
100	10.94	15.77	15.40	13.24
93	17.02	15.78	15.30	13.23
90	16.93	15.65	15.41	13.31
83	16.93	15.91	15.30	13.30
80 75	10.85	15.85	15.50	13.29
75	16.70	15.82	15.21	13.29
70	16.50	15./1	15.04	13.19
65	10.12	15.00	14.//	13.10
60 55	15.81	15.23	14.28	12.79
33	15.44	14.90	13.70	12.56
50	15.02	14.41	13.08	12.10
45	14.27	13.62	12.64	11.38
40	13.52	12.84	11.39	10.39
35	12.28	11.8/	10.63	9.46
30	11.07	10.39	8.85	8.06
25	8.81	8.66	7.29	5.94
20	5.44	5.20	4.36	3.65
15	2.13	2.05	1.53	1.34
10	0.49	0.44	0.16	0.27

6. Experimentally determined total ionization cross-sections / Å²: hydrocarbons

EE / eV	water	ethylacetamide
285	1.61	9.95
280	1.63	10.08
275	1.65	10.20
270	1.69	10.32
265	1.70	10.47
260	1.72	10.61
255	1.73	10.73
250	1.74	10.82
245	1.74	10.92
240	1.76	11.00
235	1.77	11.09
230	1.79	11.25
225	1.80	11.38
220	1.82	11.48
215	1.86	11.61
210	1.85	11.72
205	1.88	11.78
200	1.90	11.93
195	1.90	12.04
190	1.91	12.19
185	1.95	12.36
180	1.96	12.51
175	1.99	12.63
170	1.99	12.72
165	2.00	12.86
160	2.01	12.98
155	2.02	13.12
150	2.06	13.26
145	2.07	13.40
140	2.07	13.53
135	2.10	13.59
130	2.10	13.63
125	2.12	13.74
120	2.13	13.76
115	2.13	13.82
110	2.13	13.76
105	2.15	13.73
100	2.15	13.61
95	2.13	13.57
90	2.12	13.44
85	2.09	13.38
80	2.09	13.11
75	2.08	12.85
70	2.01	12.55
65	1.97	12.09
60	1.87	11.67
55	1.83	11.14
50	1.73	10.53
45	1.67	9.57
40	1.54	9.01
35	1.37	8.13
30	1.16	6.66
25	0.94	5.01
20	0.66	3.14
15	0.27	1.24
10	0.07	0.34

7. Expendence	rimentally	determined to	otal ionization	cross-sections	/ Å ² : wate	r and ethy	lacetamide
---------------	------------	---------------	-----------------	----------------	-------------------------	------------	------------

EE / eV	guanine	adenine	thymine	cytosine	uracil	α-D-	α-D-	α-deoxy-	α-deoxy-
						ribo-	ribo-	D-ribo-	D-ribo-
						furanose	pyranose	furanose	pyranose
205	18.59	17.30	15.26	13.96	12.91	15.25	15.02	14.37	14.04
200	18.83	17.53	15.46	14.14	13.07	15.41	15.18	14.53	14.20
195	19.10	17.78	15.67	14.34	13.25	15.56	15.33	14.68	14.34
190	19.35	18.03	15.88	14.53	13.42	15.72	15.48	14.83	14.49
185	19.59	18.26	16.07	14.70	13.58	15.86	15.62	14.96	14.62
180	19.70	18.37	16.16	14.79	13.65	16.04	15.80	15.14	14.79
175	19.95	18.61	16.36	14.97	13.81	16.16	15.92	15.26	14.90
170	20.15	18.80	16.51	15.12	13.94	16.32	16.08	15.42	15.06
165	20.40	19.05	16.71	15.31	14.10	16.48	16.23	15.57	15.21
160	20.61	19.25	16.88	15.46	14.24	16.62	16.37	15.72	15.34
155	20.78	19.42	17.01	15.59	14.34	16.78	16.53	15.87	15.50
150	20.95	19.59	17.14	15.71	14.45	16.86	16.60	15.95	15.57
145	21.23	19.86	17.37	15.92	14.63	17.00	16.74	16.09	15.71
140	21.40	20.03	17.50	16.04	14.73	17.11	16.85	16.20	15.81
135	21.52	20.16	17.59	16.13	14.80	17.31	17.04	16.39	16.00
130	21.66	20.31	17.69	16.23	14.88	17.42	17.15	16.50	16.10
125	21.83	20.48	17.82	16.36	14.98	17.46	17.19	16.56	16.16
120	21.95	20.61	17.91	16.44	15.04	17.62	17.35	16.72	16.31
115	22.07	20.74	18.00	16.53	15.11	17.70	17.43	16.81	16.39
110	22.13	20.81	18.03	16.57	15.12	17.78	17.50	16.89	16.47
105	22.17	20.87	18.05	16.60	15.13	17.88	17.60	17.00	16.57
100	22.08	20.81	17.96	16.53	15.04	17.90	17.61	17.02	16.59
95	22.03	20.78	17.90	16.48	14.98	17.92	17.63	17.06	16.62
90	21.95	20.74	17.82	16.42	14.90	17.87	17.58	17.02	16.58
85	21.75	20.57	17.63	16.26	14.73	17.89	17.60	17.06	16.61
80	21.54	20.40	17.44	16.10	14.55	17.71	17.41	16.90	16.45
75	21.16	20.08	17.11	15.81	14.25	17.55	17.25	16.77	16.32
70	20.67	19.65	16.69	15.44	13.88	17.30	17.00	16.55	16.09
65	20.17	19.21	16.25	15.06	13.50	17.08	16.77	16.35	15.89
60	19.55	18.67	15.72	14.59	13.03	16.60	16.30	15.92	15.46
55	18.77	17.97	15.04	14.00	12.45	16.11	15.80	15.47	15.01
50	17.82	17.11	14.23	13.29	11.75	15.42	15.12	14.84	14.37
45	16.94	16.33	13.47	12.63	11.09	14.61	14.30	14.08	13.62
40	15.74	15.24	12.43	11.73	10.21	13.54	13.23	13.08	12.62
35	14.11	13.74	11.04	10.51	9.03	12.32	12.01	11.93	11.48
30	12.28	12.05	9.49	9.15	7.73	10.54	10.24	10.24	9.79
25	9.51	9.42	7.14	7.07	5.80	8.39	8.09	8.18	7.75
20	5.85	5.93	4.15	4.36	3.34	5.22	4.97	5.12	4.76
15	2.38	2.50	1.36	1.76	1.14	1.98	1.78	1.95	1.68
10	0.23	0.28	0.06	0.13	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01

8. Total ionization cross sections calculated using the BEB model / Å²: DNA/RNA constituents