

Table S1: List of the POP standards investigated in this study, along with their experimentally measured ${}^{\text{TMS}}\text{CCS}_{\text{N}_2}$.

Halogenated biphenyls

Compound class	Compound	CAS #	Averaged [M] ⁻ _{TMS} CCS _{N₂} (n=4) [Å ²]	RSD (%) (n=4)
PCBs	2-Chlorobiphenyl (PCB 1)	2051-60-7	133,9	0,10
	4-Chlorobiphenyl (PCB 3)	2051-62-9	134,1	0,07
	2,2'-Dichlorobiphenyl (PCB 4)	13029-08-8	140,3	0,08
	2,3'-Dichlorobiphenyl (PCB 6)	25569-80-6	142,1	0,07
	2,4'-Dichlorobiphenyl (PCB 8)	34883-43-7	141,0	0,07
	2,6-Dichlorobiphenyl (PCB 10)	33146-45-1	140,3	0,08
	4,4'-Dichlorobiphenyl (PCB 15)	2050-68-2	141,8	0,09
	2,2',3-Trichlorobiphenyl (PCB 16)	38444-78-9	146,9	0,04
	2,2',5-Trichlorobiphenyl (PCB 18)	37680-65-2	147,6	0,03
	2,2',6-Trichlorobiphenyl (PCB 19)	38444-73-4	145,3	0,04
	2,3,4'-Trichlorobiphenyl (PCB 22)	38444-85-8	147,8	0,03
	2,4,4'-Trichlorobiphenyl (PCB 28)	7012-37-5	149,0	0,07
	2,4',5-Trichlorobiphenyl (PCB 31)	16606-02-3	149,0	0,07
	2,3',4'-Trichlorobiphenyl (PCB 33)	38444-86-9	148,1	0,00
	3,4,4'-Trichlorobiphenyl (PCB 37)	38444-90-5	149,2	0,04
	2,2',3,3'-Tetrachlorobiphenyl (PCB 40)	38444-93-8	153,4	0,03
	2,2',3,4-Tetrachlorobiphenyl (PCB 41)	52663-59-9	152,9	0,08
	2,2',3,5'-Tetrachlorobiphenyl (PCB 44)	41464-39-5	154,7	0,06
	2,2',4,5'-Tetrachlorobiphenyl (PCB 49)	41464-40-8	155,0	0,03
	2,2',5,5'-Tetrachlorobiphenyl (PCB 52)	35693-99-3	155,8	0,04
	2,2',6,6'-Tetrachlorobiphenyl (PCB 54)	15968-05-5	150,6	0,06
	2,3,4,4'-Tetrachlorobiphenyl (PCB 60)	33025-41-1	153,8	0,04
	2,3',4,4'-Tetrachlorobiphenyl (PCB 66)	32598-10-1	155,2	0,05
	2,3',4',5-Tetrachlorobiphenyl (PCB 70)	32598-11-1	156,1	0,05
	2,4,4',5-Tetrachlorobiphenyl (PCB 74)	32690-93-0	155,2	0,06
	3,3',4,4'-Tetrachlorobiphenyl (PCB 77)	32598-13-3	156,4	0,05
	3,4,4',5-Tetrachlorobiphenyl (PCB 81)	70362-50-4	155,9	0,08
	2,2',3,3',6-Pentachlorobiphenyl (PCB 84)	52663-60-2	158,5	0,03
	2,2',3,4,4'-Pentachlorobiphenyl (PCB 85)	65510-45-4	159,9	0,06
	2,2',3,4,5'-Pentachlorobiphenyl (PCB 87)	38380-02-8	160,6	0,03
	2,2',3,4',5-Pentachlorobiphenyl (PCB 90)	68194-07-0	161,3	0,06
	2,2',3,5',6-Pentachlorobiphenyl (PCB 95)	38379-99-6	159,6	0,06
	2,2',3,4',5'-Pentachlorobiphenyl (PCB 97)	41464-51-1	160,4	0,03
	2,2',4,4',5'-Pentachlorobiphenyl (PCB 99)	38380-01-7	160,9	0,05
	2,2',4,5,5'-Pentachlorobiphenyl (PCB 101)	37680-73-2	161,3	0,06
	2,2',4,6,6'-Pentachlorobiphenyl (PCB 104)	56558-16-8	156,5	0,03
	2,3,3',4,4'-Pentachlorobiphenyl (PCB 105)	32598-14-4	160,6	0,03
	2,3,3',4',6-Pentachlorobiphenyl (PCB 110)	38380-03-9	160,6	0,03
	2,3,4,4',5-Pentachlorobiphenyl (PCB 114)	74472-37-0	160,2	0,03
	2,3',4,4',5-Pentachlorobiphenyl (PCB 118)	31508-00-6	162,2	0,03
	2,3',4,4',6-Pentachlorobiphenyl (PCB 119)	56558-17-9	160,9	0,03
	2,3',4,4',5'-Pentachlorobiphenyl (PCB 123)	65510-44-3	161,6	0,06
	3,3',4,4',5-Pentachlorobiphenyl (PCB 126)	57465-28-8	162,9	0,03
	2,2',2,3',4,4'-Hexachlorobiphenyl (PCB 128)	38380-07-3	165,3	0,03
	2,2',3,3',4,5-Hexachlorobiphenyl (PCB 129)	55215-18-4	165,3	0,03
	2,2',3,3',5,6-Hexachlorobiphenyl (PCB 135)	52744-13-5	165,4	0,00
	2,2',3,4,4',5-Hexachlorobiphenyl (PCB 137)	35694-06-5	166,1	0,03
	2,2',3,4,4',5'-Hexachlorobiphenyl (PCB 138)	35065-28-2	166,4	0,06
2,2',3,4,5,5'-Hexachlorobiphenyl (PCB 141)	52712-04-6	166,9	0,06	
2,2',3,4',5',6-Hexachlorobiphenyl (PCB 149)	38380-04-0	165,4	0,05	
2,2',3,5,5',6-Hexachlorobiphenyl (PCB 151)	52663-63-5	166,0	0,03	
2,2',4,4',5,5'-Hexachlorobiphenyl (PCB 153)	35065-27-1	167,4	0,03	
2,2',4,4',6,6'-Hexachlorobiphenyl (PCB 155)	33979-03-2	163,9	0,06	
2,3,3',4,4',5-Hexachlorobiphenyl (PCB 156)	38380-08-4	167,2	0,08	
2,3,3',4,4',5'-Hexachlorobiphenyl (PCB 157)	69782-90-7	167,1	0,03	
2,3,3',4,4',6-Hexachlorobiphenyl (PCB 158)	74472-42-7	166,4	0,06	
2,3',4,4',5,5'-Hexachlorobiphenyl (PCB 167)	52663-72-6	168,5	0,05	
3,3',4,4',5,5'-Hexachlorobiphenyl (PCB 168)	59291-65-5	167,4	0,03	
3,3',4,4',5,5'-Hexachlorobiphenyl (PCB 169)	32774-16-6	169,6	0,07	
2,2',3,3',4,4',5-Heptachlorobiphenyl (PCB 170)	35065-30-6	171,4	0,06	
2,2',3,3',4,4',6-Heptachlorobiphenyl (PCB 171)	52663-71-5	170,0	0,05	
2,2',3,3',4,5,6-Heptachlorobiphenyl (PCB 174)	38411-25-5	170,2	0,08	
2,2',3,3',4,5',6-Heptachlorobiphenyl (PCB 177)	52663-70-4	170,7	0,03	
2,2',3,3',5,5',6-Heptachlorobiphenyl (PCB 178)	52663-67-9	172,0	0,08	
2,2',3,4,4',5,5'-Heptachlorobiphenyl (PCB 180)	35065-29-3	172,6	0,03	
2,2',3,4,4',5',6-Heptachlorobiphenyl (PCB 183)	52663-69-1	171,4	0,06	
2,2',3,4',5,5',6-Heptachlorobiphenyl (PCB 187)	52663-68-0	171,9	0,09	
2,2',3,4',5,6,6'-Heptachlorobiphenyl (PCB 188)	74487-85-7	168,7	0,10	
2,3,3',4,4',5,5'-Heptachlorobiphenyl (PCB 189)	39635-31-9	173,4	0,03	
2,3,3',4,4',5',6-Heptachlorobiphenyl (PCB 191)	74472-50-7	172,4	0,07	
2,3,3',4',5,5',6-Heptachlorobiphenyl (PCB 193)	69782-91-8	172,6	0,03	
2,2',3,3',4,4',5,5'-Octachlorobiphenyl (PCB 194)	35694-08-7	178,0	0,03	
2,2',3,3',4,4',5,5',6-Octachlorobiphenyl (PCB 199)	52663-75-9	177,1	0,07	
2,2',3,3',4,5,6,6'-Octachlorobiphenyl (PCB 200)	52663-73-7	173,9	0,03	
2,2',3,3',4,5',6,6'-Octachlorobiphenyl (PCB 201)	40186-71-8	174,7	0,03	
2,2',3,3',5,5',6,6'-Octachlorobiphenyl (PCB 202)	2136-99-4	175,1	0,12	
2,2',3,4,4',5,5',6-Octachlorobiphenyl (PCB 203)	52663-76-0	176,7	0,07	
2,3,3',4,4',5,5',6-Octachlorobiphenyl (PCB 205)	74472-53-0	177,2	0,08	
2,2',3,3',4,4',5,5',6-Nonachlorobiphenyl (PCB 206)	40186-72-9	181,7	0,07	
2,2',3,3',4,4',5,6,6'-Nonachlorobiphenyl (PCB 207)	52663-79-3	180,0	0,07	
2,2',3,3',4,5,5',6,6'-Nonachlorobiphenyl (PCB 208)	52663-77-1	180,0	0,08	
Decachlorobiphenyl (PCB 209)	2051-24-3	185,1	0,11	
PBBs	4-Bromobiphenyl (PBB 3)	92-66-0	136,7	0,07
	4,4'-Dibromobiphenyl (PBB 15)	92-86-4	147,8	0,03
	2,2',5-Tribromobiphenyl (PBB 18)	59080-34-1	153,5	0,07
	2,2',5,5'-Tetrabromobiphenyl (PBB 52)	59080-37-4	164,9	0,06
	3,3',4,4'-Tetrabromobiphenyl (PBB 77)	77102-82-0	166,6	0,03
	2,2',4,5,5'-Pentabromobiphenyl (PBB 101)	67888-96-4	172,6	0,03
	2,2',4,4',5,5'-Hexabromobiphenyl (PBB 153)	59080-40-9	180,9	0,05
	3,3',4,4',5,5'-Hexabromobiphenyl (PBB 169)	60044-26-0	183,8	0,05
	2,2',3,4,4',5,5'-Heptabromobiphenyl (PBB 180)	67733-52-2	186,6	0,03
	2,2',3,3',4,4',5,5'-Octabromobiphenyl (PBB 194)	67889-00-3	193,0	0,10
	2,2',3,3',4,4',5,5',6-Nonabromobiphenyl (PBB 206)	69278-62-2	197,2	0,07
	Decabromobiphenyl (PBB 209)	13654-09-6	199,7	/
PXBs	4'-Bromo-2,3,4,5-Tetrachlorobiphenyl	1075110-93-8	164,6	0,05
	4'-Bromo-2,3,3',4-Tetrachlorobiphenyl	Not available	163,2	0,00
	4'-Bromo-3,3',4,5-Tetrachlorobiphenyl	Not available	165,5	0,03
	4'-Bromo-2,3,3',4,5-Pentachlorobiphenyl	Not available	169,6	0,03
	4'-Bromo-3,3',4,5,5'-Pentachlorobiphenyl	1075110-99-4	171,8	0,09
	3,4-Dibromo-3',4',5'-Dichlorobiphenyl	88194-42-7	161,3	0,04
	3,4-Dibromo-3',4',5'-Trichlorobiphenyl	1353756-41-8	167,9	0,06
	3,4-Dichloro-3',4',5'-Tribromobiphenyl	1075111-00-0	169,8	0,03

Halogenated dibenzodioxins

Compound class	Compound	CAS #	Averaged [M] ⁻ _{TMS} CCS _{N₂} (n=4) [Å ²]	RSD (%) (n=4)	
PCDDs	2,3,7,8-Tetrachlorodibenzo-p-dioxin	1746-01-6	159,3	0,03	
	1,2,3,7,8-Pentachlorodibenzo-p-dioxin	40321-76-4	165,2	0,05	
	1,2,3,4,7,8-Hexachlorodibenzo-p-dioxin	39227-28-6	170,9	0,03	
	1,2,3,6,7,8-Hexachlorodibenzo-p-dioxin	57653-85-7	170,7	0,05	
	1,2,3,7,8,9-Hexachlorodibenzo-p-dioxin	19408-74-3	169,0	0,06	
	1,2,3,4,6,7,8-Heptachlorodibenzo-p-dioxin	35822-46-9	174,9	0,07	
	Octachlorodibenzo-p-dioxin	3268-87-9	178,9	0,03	
	PBDDs	1-Bromodibenzo-p-dioxin	105908-71-2	141,4	0,06
		2,3,7-Tribromodibenzo-p-dioxin	51974-40-4	161,0	0,06
		1,3,7,8-Tetrabromodibenzo-p-dioxin	109333-31-5	170,2	0,08
1,2,3,4-Tetrabromodibenzo-p-dioxin		104549-41-9	165,2	0,06	
2,3,7,8-Tetrabromodibenzo-p-dioxin		50585-41-6	169,4	0,06	
1,2,4,7,8-Pentabromodibenzo-p-dioxin		109333-35-9	177,4	0,03	
1,2,3,7,8-Pentabromodibenzo-p-dioxin		109333-34-8	176,7	0,03	
1,2,3,4,7,8-Hexabromodibenzo-p-dioxin		110999-44-5	183,9	0,05	
1,2,3,6,7,8-Hexabromodibenzo-p-dioxin		110999-45-6	183,9	0,05	
1,2,3,7,8,9-Hexabromodibenzo-p-dioxin		110999-46-7	181,5	0,08	
1,2,3,4,6,7,8-Heptabromodibenzo-p-dioxin		110999-47-8	188,7	0,10	
Octabromodibenzo-p-dioxin		2170-45-8	192,9	/	
PXDDs	7-Bromo-2,3-Dichlorodibenzo-p-dioxin	97741-74-7	155,9	0,03	
	2-Bromo-3,7,8-Trichlorodibenzo-p-dioxin	109333-33-7	162,0	0,03	
	2-Bromo-1,3,7,8-Tetrachlorodibenzo-p-dioxin	131167-13-0	167,4	0,06	
2,3-Dibromo-7,8-Dichlorodibenzo-p-dioxin	50585-40-5	164,4	0,03		

Halogenated dibenzofurans

Compound class	Compound	CAS #	Averaged [M] ⁻ _{TMS} CCS _{N₂} (n=4) [Å ²]	RSD (%) (n=4)	
PCDFs	2,3,7,8-Tetrachlorodibenzofuran	51207-31-9	155,1	0,05	
	1,2,3,7,8-Pentachlorodibenzofuran	57117-41-6	159,5	0,05	
	2,3,4,7,8-Pentachlorodibenzofuran	57117-31-4	161,0	0,04	
	1,2,3,4,7,8-Hexachlorodibenzofuran	70648-26-9	165,3	0,06	
	1,2,3,6,7,8-Hexachlorodibenzofuran	57117-44-9	165,4	0,03	
	2,3,4,6,7,8-Hexachlorodibenzofuran	60851-34-5	166,7	0,11	
	1,2,3,7,8,9-Hexachlorodibenzofuran	72918-21-9	163,5	0,08	
	1,2,3,4,6,7,8-Heptachlorodibenzofuran	67562-39-4	170,8	0,03	
	1,2,3,4,7,8,9-Heptachlorodibenzofuran	55673-89-7	169,1	0,07	
	Octachlorodibenzofuran	39001-02-0	174,7	0,09	
	PBDFs	4-Bromodibenzofuran	89827-45-2	137,9	0,11
		2,4-Dibromodibenzofuran	133953-36-3	147,0	0,06
		2,8-Dibromodibenzofuran	10016-52-1	148,4	0,03
1,3,8-Tribromodibenzofuran		142408-19-3	156,3	0,11	
2,4,7-Tribromodibenzofuran		617707-53-6	157,8	0,04	
2,3,4-Tribromodibenzofuran		Not available	153,5	0,06	
2,4,6,8-Tetrabromodibenzofuran		617707-91-2	166,7	0,03	
1,2,7,8-Tetrabromodibenzofuran		84761-80-8	163,1	0,08	
2,3,7,8-Tetrabromodibenzofuran		67733-57-7	165,4	0,06	
1,2,3,7,8-Pentabromodibenzofuran		107555-93-1	171,6	0,10	
2,3,4,7,8-Pentabromodibenzofuran		131166-92-2	173,6	0,09	
1,2,3,4,7,8-Hexabromodibenzofuran		129880-08-6	179,5	0,11	
1,2,3,4,6,7,8-Heptabromodibenzofuran	107555-95-3	185,2	0,04		
PXDFs	8-Bromo-2,3-Dichlorodibenzofuran	103124-75-0	151,9	0,05	
	3-Bromo-2,3,4-Trichlorodibenzofuran	103124-82-7	157,9	0,03	
	4-Bromo-2,3,7,8-Tetrachlorodibenzofuran	115656-08-1	163,6	0,04	
	1,2-Dibromo-7,8-Dichlorodibenzofuran	Not available	158,0	0,04	
	2,3-Dibromo-7,8-Dichlorodibenzofuran	Not available	159,9	0,03	
	1,3-Dibromo-2,7,8-Trichlorodibenzofuran	Not available	164,0	0,06	

Halogenated diphenyl ethers

Compound class	Compound	CAS #	Averaged [M] ⁻ _{TMS} CCS _{N₂} (n=4) [Å ²]	RSD (%) (n=4)
PBDEs	4-Bromodiphenyl ether (PBDE 3)	101-55-3	142,5	0,07
	2,4-Dibromodiphenyl ether (PBDE 7)	171977-44-9	151,7	0,03
	4,4'-Dibromodiphenyl ether (PBDE 15)	2050-47-7	154,5	0,03
	2,2',4-Tribromodiphenyl ether (PBDE 17)	147217-75-2	157,9	0,07
	2,2',4,4'-Tribromodiphenyl ether (PBDE 28)	41318-75-6	162,3	0,04
	2,2',4,4'-Tetrabromodiphenyl ether (PBDE 47)	5436-43-1	169,4	0,03
	2,2',4,5'-Tetrabromodiphenyl ether (PBDE 49)	243982-82-3	169,4	0,03
	2,3',4,4'-Tetrabromodiphenyl ether (PBDE 66)	189084-61-5	170,5	0,03
	3,3',4,6-Tetrabromodiphenyl ether (PBDE 71)	189084-62-6	166,4	0,03
	3,3',4,4'-Tetrabromodiphenyl ether (PBDE 77)	93703-48-1	171,5	0,05
	2,2',3,4,4'-Pentabromodiphenyl ether (PBDE 85)	182346-21-0	176,1	0,05
	2,2',4,4',5-Pentabromodiphenyl ether (PBDE 99)	60348-60-9	177,3	0,03
	2,2',4,4',6-Pentabromodiphenyl ether (PBDE 100)	189084-64-8	175,9	0,06
	2,3',4,4',6-Pentabromodiphenyl ether (PBDE 119)	189084-66-0	176,9	0,03
	3,3',4,4',5-Pentabromodiphenyl ether (PBDE 126)	366791-32-4	179,6	0,03
	2,2',3,4,4',5'-Hexabromodiphenyl ether (PBDE 138)	182677-30-1	183,6	0,04
	2,2',4,4',5,5'-Hexabromodiphenyl ether (PBDE 153)	686		