

## SUPPLEMENTARY INFORMATION

# Conformers selection by electrostatic hexapoles: a theoretical study on 1-chloroethanol and 2-chloroethanol

Concetta Caglioti<sup>1,2</sup>, Masaaki Nakamura<sup>3</sup>, Dock-Chil Che<sup>4</sup>, Po-Yu Tsai<sup>5</sup>, Federico Palazzetti<sup>1,\*</sup>

<sup>1</sup> Dipartimento di Chimica, Biologia e Biotecnologie, Università degli Studi di Perugia, Perugia, Italy.

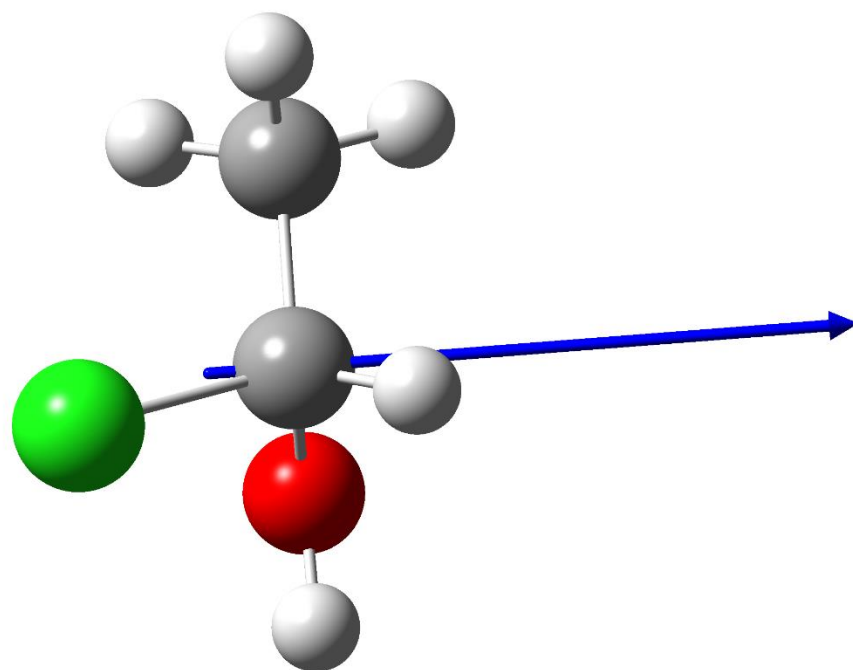
<sup>2</sup> Dipartimento di Medicina, Università degli Studi di Perugia, Perugia, Italy.

<sup>3</sup> Department of Chemistry, School of Science, Tokyo Institute of Technology, Meguro, Tokyo 152-8550, Japan

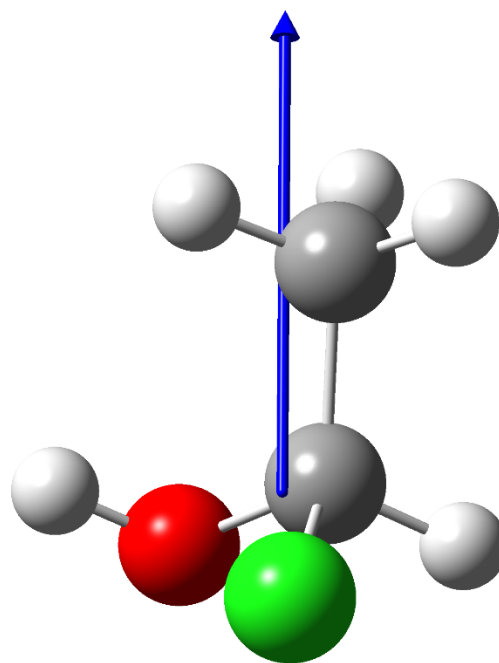
<sup>4</sup> Department of Chemistry, Graduate School of Science, Osaka University, Toyonaka, Osaka 560-0043, Japan.

<sup>5</sup> Department of Chemistry, National Chung Hsing University, Taichung 402, Taiwan

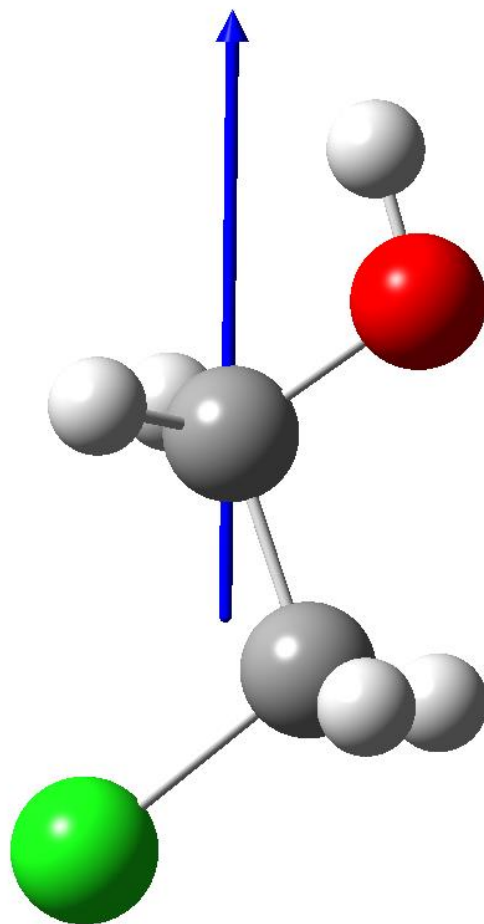
\* Corresponding author: federicopalazzetti@yahoo.it



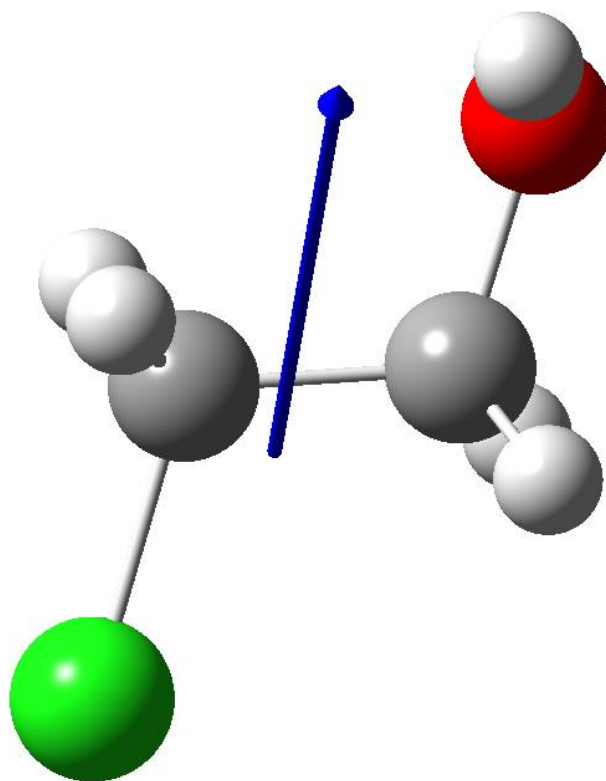
**Figure S1.** The permanent electric dipole moment vector (blue arrow) in (A) 1-chloroethanol. In grey the carbon atoms, in white the hydrogens, in red the oxygen, and in green the chlorine atom.



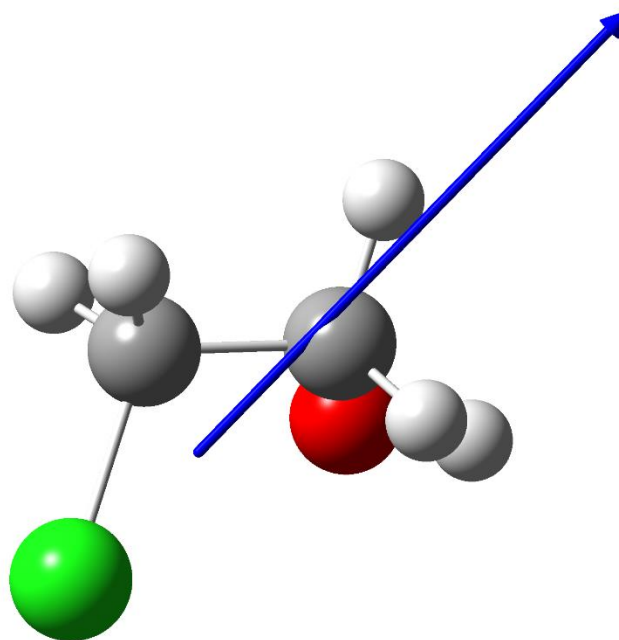
**Figure S2.** The permanent electric dipole moment vector (blue arrow) in (S) 1-chloroethanol. In grey the carbon atoms, in white the hydrogens, in red the oxygen, and in green the chlorine atom.



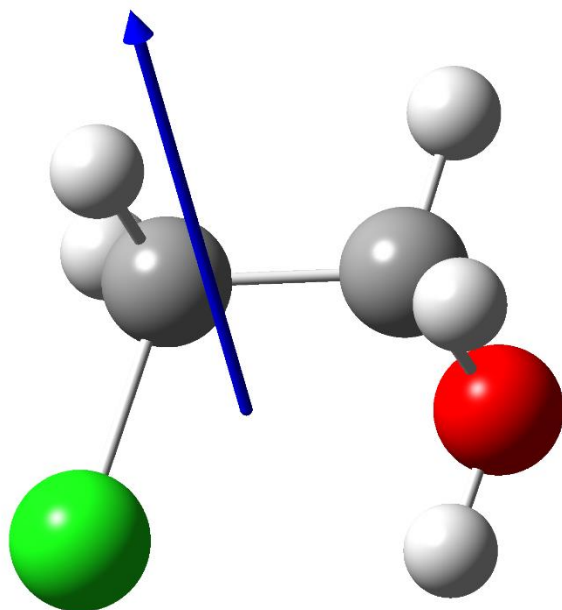
**Figure S3.** The permanent electric dipole moment vector (blue arrow) in (Aa) 2-chloroethanol. In grey the carbon atoms, in white the hydrogens, in red the oxygen, and in green the chlorine atom.



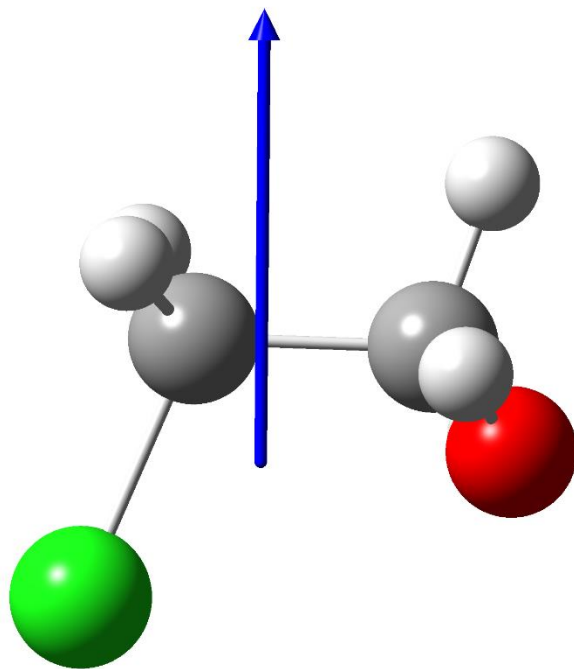
**Figure S4.** The permanent electric dipole moment vector (blue arrow) in (As) 2-chloroethanol. In grey the carbon atoms, in white the hydrogens, in red the oxygen, and in green the chlorine atom.



**Figure S5.** The permanent electric dipole moment vector (blue arrow) in (S)-2-chloroethanol. In grey the carbon atoms, in white the hydrogens, in red the oxygen, and in green the chlorine atom.

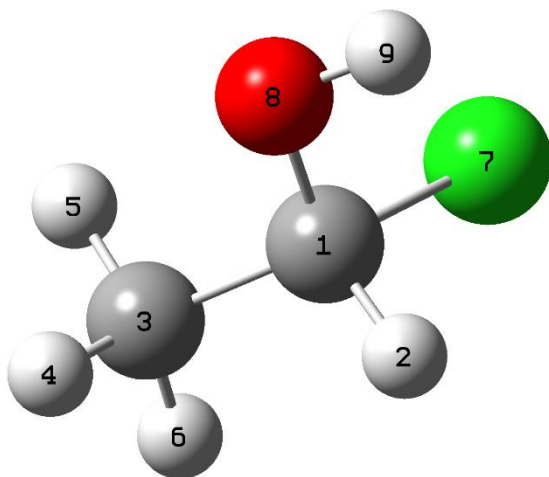


**Figure S6.** The permanent electric dipole moment vector (blue arrow) in (Ss+) 2-chloroethanol. In grey the carbon atoms, in white the hydrogens, in red the oxygen, and in green the chlorine atom.



**Figure S7.** The permanent electric dipole moment vector (blue arrow) in (Ss-) 2-chloroethanol. In grey the carbon atoms, in white the hydrogens, in red the oxygen, and in green the chlorine atom.





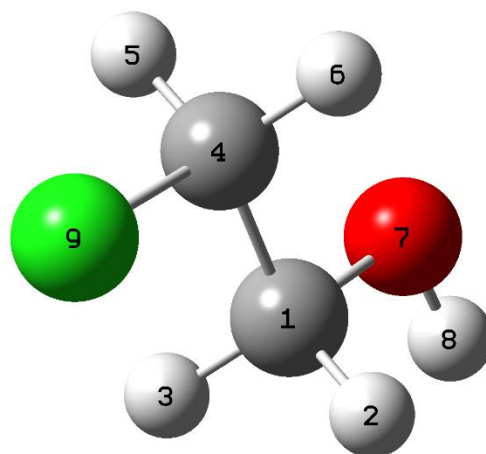
**Figure S8.** Structure of 1-chloroethanol with atoms labeled from 1 to 9, to be used as reference in Tables S1 and S2.

**Table S1.** Equilibrium geometry of (A)-1-chloroethanol (in Cartesian coordinates *xyz*) optimized at MP2/aug-cc-pVTZ.

Atom	Tag	X	Y	Z
C	1	-0.42105	0.092544	0.382499
H	2	-0.41853	0.163101	1.473433
C	3	-1.20922	-1.09947	-0.10168
H	4	-2.25474	-0.97889	0.193346
H	5	-1.14528	-1.15953	-1.18982
H	6	-0.81404	-2.01934	0.331834
Cl	7	1.324158	-0.10966	-0.05822
O	8	-0.95211	1.237458	-0.20581
H	9	-0.47965	2.00083	0.142509

**Table S2.** Equilibrium geometry of (S) 1-chloroethanol (in Cartesian coordinates *xyz*) optimized at MP2/aug-cc-pVTZ.

Atom	Tag	X	Y	Z
C	1	0.425882	-0.08761	0.399038
H	2	0.426263	-0.14733	1.482894
C	3	1.168564	1.121678	-0.11473
H	4	2.215487	1.044222	0.176144
H	5	1.099732	1.16642	-1.20168
H	6	0.743839	2.034664	0.295339
Cl	7	-1.32588	0.077045	-0.05717
O	8	0.940236	-1.29363	-0.05798
H	9	0.966153	-1.26318	-1.02287



**Figure S9.** Structure of 2-chloroethanol with atoms labeled from 1 to 9, to be used as reference in Tables S3 - S7.

**Table S3.** Equilibrium geometry of (Aa) 2-chloroethanol (in Cartesian coordinates *xyz*) optimized at MP2/aug-cc-pVTZ.

Atom	Tag	X	Y	Z
C	1	0.991645	-0.48561	-4E-06
H	2	0.864092	-1.1093	0.887531
H	3	0.864018	-1.10931	-0.88753
C	4	-0.04627	0.612598	0.000036
H	5	0.043783	1.23077	-0.88811
H	6	0.043767	1.2307	0.88823
O	7	2.253585	0.174076	-6.5E-05
H	8	2.945948	-0.49427	0.000321
Cl	9	-1.67427	-0.11195	-7E-06

**Table S4.** Equilibrium geometry of (As) 2-chloroethanol (in Cartesian coordinates *xyz*) optimized at MP2/aug-cc-pVTZ.

Atom	Tag	X	Y	Z
C	1	0.994771	-0.49371	0.003251
H	2	0.861614	-1.09238	0.906711
H	3	0.871824	-1.14716	-0.8577
C	4	-0.04239	0.611316	-0.0429
H	5	0.039547	1.181407	-0.96347
H	6	0.048662	1.279445	0.810531
O	7	2.30668	0.048409	-0.08527
H	8	2.532076	0.436206	0.76639
Cl	9	-1.67773	-0.10297	0.015152

**Table S5.** Equilibrium geometry of (Sa) 2-chloroethanol (in Cartesian coordinates *xyz*) optimized at MP2/aug-cc-pVTZ.

Atom	Tag	X	Y	Z
C	1	1.168982	0.457013	0.365529
H	2	1.873937	1.287344	0.246399
H	3	0.99738	0.291886	1.431587
C	4	-0.12382	0.848251	-0.30093
H	5	-0.00349	0.861453	-1.38113
H	6	-0.45295	1.823569	0.047874
O	7	1.65534	-0.71383	-0.27244
H	8	2.357445	-1.0878	0.268131
Cl	9	-1.42859	-0.31161	0.069356

**Table S6.** Equilibrium geometry of (Ss+) 2-chloroethanol (in Cartesian coordinates *xyz*) optimized at MP2/aug-cc-pVTZ.

Atom	Tag	X	Y	Z
C	1	1.201537	0.452901	0.33932
H	2	1.966686	1.198874	0.123069
H	3	1.081333	0.3838	1.424053
C	4	-0.09852	0.902459	-0.28691
H	5	-0.01329	0.96108	-1.36839
H	6	-0.42767	1.855404	0.119995
O	7	1.669663	-0.76485	-0.20756
H	8	0.980139	-1.42414	-0.05941
Cl	9	-1.38604	-0.29343	0.065101

**Table S7.** Equilibrium geometry of (Ss-) 2-chloroethanol (in Cartesian coordinates *xyz*) optimized at MP2/aug-cc-pVTZ.

Atom	Tag	X	Y	Z
C	1	1.180091	0.457373	-0.36063
H	2	1.02796	0.34901	-1.43264
H	3	1.899833	1.267449	-0.19594
C	4	-0.12065	0.852206	0.3032
H	5	-0.4441	1.828432	-0.05189
H	6	-0.01849	0.883023	1.386796
O	7	1.692927	-0.78447	0.085433
H	8	1.884395	-0.7144	1.026606
Cl	9	-1.42645	-0.3056	-0.06305

**Table S8.** Rotational population as a function of the hexapole voltage (HV) as a function of the hexapole voltage (HV) of Aa 2-chloroethanol in 0.5 m hexapole

HV	M=0	M=1	M=2	M=3	M=4	M=5	M=6	M=7	M=8	M=9	M=10	M=11	M=12	M=13	M=14	M=15	M=16	M=17	M=18	M=19	M=20	M=21	M=22	M=23
0.00	0.03	0.03	0.03	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
666.60	0.03	0.03	0.03	0.03	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
1333.20	0.03	0.04	0.04	0.03	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
1999.80	0.03	0.04	0.04	0.04	0.03	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2666.40	0.03	0.04	0.04	0.04	0.04	0.03	0.03	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3333.00	0.03	0.04	0.05	0.06	0.06	0.05	0.04	0.03	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3999.60	0.03	0.04	0.10	0.12	0.10	0.09	0.07	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4666.20	0.03	0.04	0.15	0.13	0.16	0.12	0.10	0.07	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5332.80	0.03	0.06	0.14	0.19	0.19	0.17	0.13	0.10	0.07	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5999.40	0.03	0.12	0.16	0.27	0.20	0.22	0.16	0.13	0.10	0.07	0.05	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6666.00	0.03	0.15	0.17	0.29	0.28	0.23	0.21	0.15	0.12	0.09	0.06	0.05	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7332.60	0.03	0.14	0.19	0.26	0.35	0.26	0.22	0.19	0.14	0.11	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7999.20	0.03	0.15	0.24	0.26	0.35	0.33	0.23	0.21	0.17	0.13	0.10	0.07	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8665.80	0.03	0.17	0.31	0.31	0.33	0.38	0.27	0.22	0.20	0.15	0.11	0.09	0.07	0.05	0.04	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
9332.40	0.03	0.18	0.36	0.38	0.35	0.39	0.31	0.24	0.21	0.17	0.13	0.11	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
9999.00	0.03	0.19	0.38	0.40	0.40	0.38	0.34	0.26	0.22	0.19	0.16	0.12	0.10	0.07	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
10665.60	0.03	0.19	0.38	0.39	0.43	0.40	0.35	0.29	0.23	0.20	0.18	0.14	0.11	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
11332.20	0.03	0.19	0.37	0.37	0.45	0.42	0.36	0.32	0.24	0.21	0.19	0.15	0.12	0.09	0.07	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00
11998.80	0.03	0.19	0.36	0.38	0.44	0.44	0.37	0.34	0.27	0.22	0.19	0.17	0.13	0.10	0.07	0.06	0.04	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00
12665.40	0.04	0.20	0.39	0.41	0.45	0.45	0.37	0.34	0.29	0.23	0.20	0.17	0.14	0.11	0.08	0.06	0.05	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00
13332.00	0.04	0.22	0.42	0.46	0.46	0.45	0.38	0.35	0.31	0.24	0.20	0.17	0.15	0.12	0.09	0.07	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00
13998.60	0.04	0.23	0.45	0.51	0.48	0.45	0.39	0.36	0.32	0.26	0.20	0.18	0.15	0.13	0.10	0.07	0.06	0.04	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.00
14665.20	0.05	0.25	0.47	0.53	0.50	0.46	0.39	0.36	0.32	0.27	0.21	0.18	0.16	0.13	0.10	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.00

**Table S9.** Rotational population as a function of the hexapole voltage (HV) as a function of the hexapole voltage (HV) of As 2-chloroethanol in 0.5 m hexapole

HV	M=0	M=1	M=2	M=3	M=4	M=5	M=6	M=7	M=8	M=9	M=10	M=11	M=12	M=13	M=14	M=15	M=16	M=17	M=18	M=19	M=20	M=21	M=22	M=23
0.00	0.04	0.03	0.03	0.03	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
666.60	0.04	0.03	0.03	0.03	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
1333.20	0.04	0.03	0.03	0.03	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
1999.80	0.04	0.03	0.03	0.03	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2666.40	0.04	0.04	0.04	0.03	0.03	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3333.00	0.04	0.04	0.04	0.04	0.03	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3999.60	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4666.20	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5332.80	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5999.40	0.04	0.04	0.04	0.05	0.06	0.05	0.04	0.03	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6666.00	0.04	0.04	0.06	0.09	0.08	0.07	0.05	0.04	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7332.60	0.04	0.04	0.10	0.12	0.10	0.09	0.07	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7999.20	0.04	0.04	0.14	0.13	0.13	0.11	0.09	0.06	0.04	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8665.80	0.04	0.04	0.16	0.14	0.17	0.13	0.10	0.08	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9332.40	0.04	0.05	0.15	0.17	0.19	0.15	0.12	0.09	0.07	0.05	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9999.00	0.04	0.08	0.15	0.21	0.20	0.18	0.14	0.11	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10665.60	0.04	0.13	0.15	0.26	0.20	0.20	0.16	0.12	0.09	0.07	0.05	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11332.20	0.04	0.16	0.16	0.29	0.22	0.22	0.18	0.14	0.11	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11998.80	0.05	0.17	0.17	0.30	0.25	0.23	0.20	0.15	0.12	0.09	0.06	0.04	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
12665.40	0.05	0.16	0.18	0.29	0.30	0.23	0.22	0.17	0.13	0.10	0.07	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13332.00	0.06	0.16	0.20	0.27	0.33	0.24	0.23	0.19	0.15	0.11	0.08	0.06	0.05	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13998.60	0.07	0.17	0.24	0.26	0.35	0.27	0.23	0.21	0.16	0.12	0.09	0.07	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
14665.20	0.08	0.18	0.29	0.26	0.35	0.31	0.24	0.22	0.18	0.13	0.10	0.07	0.06	0.04	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00

**Table S10.** Rotational population as a function of the hexapole voltage (HV) as a function of the hexapole voltage (HV) of Sa 2-chloroethanol in 0.5 m hexapole

HV	M=0	M=1	M=2	M=3	M=4	M=5	M=6	M=7	M=8	M=9	M=10	M=11	M=12	M=13	M=14	M=15	M=16	M=17	M=18	M=19	M=20	M=21	M=22	M=23
0.00	0.04	0.04	0.04	0.04	0.03	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
666.60	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.03	0.03	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
1333.20	0.04	0.04	0.05	0.05	0.04	0.04	0.04	0.03	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
1999.80	0.04	0.04	0.05	0.05	0.05	0.05	0.04	0.04	0.03	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2666.40	0.04	0.05	0.06	0.08	0.10	0.10	0.09	0.08	0.07	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3333.00	0.04	0.05	0.15	0.17	0.19	0.21	0.20	0.17	0.14	0.10	0.08	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3999.60	0.04	0.05	0.17	0.25	0.33	0.31	0.31	0.25	0.20	0.16	0.12	0.09	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4666.20	0.04	0.06	0.21	0.40	0.38	0.44	0.38	0.32	0.28	0.21	0.17	0.13	0.09	0.07	0.05	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
5332.80	0.04	0.11	0.24	0.47	0.49	0.47	0.47	0.40	0.34	0.27	0.22	0.17	0.12	0.09	0.06	0.05	0.03	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00
5999.40	0.04	0.17	0.31	0.47	0.60	0.52	0.51	0.47	0.38	0.32	0.26	0.20	0.14	0.11	0.09	0.07	0.06	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
6666.00	0.04	0.22	0.42	0.52	0.60	0.57	0.56	0.51	0.45	0.35	0.28	0.23	0.17	0.14	0.12	0.10	0.09	0.07	0.05	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
7332.60	0.04	0.24	0.50	0.63	0.61	0.62	0.60	0.55	0.48	0.37	0.29	0.25	0.21	0.18	0.15	0.12	0.10	0.07	0.05	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
7999.20	0.04	0.24	0.54	0.70	0.63	0.67	0.63	0.58	0.48	0.39	0.32	0.28	0.25	0.22	0.17	0.13	0.09	0.07	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
8665.80	0.04	0.25	0.55	0.71	0.67	0.70	0.67	0.58	0.50	0.41	0.36	0.32	0.28	0.23	0.17	0.12	0.09	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
9332.40	0.04	0.26	0.57	0.72	0.72	0.73	0.69	0.60	0.51	0.44	0.40	0.35	0.28	0.23	0.17	0.12	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
9999.00	0.04	0.29	0.60	0.74	0.77	0.73	0.70	0.61	0.52	0.47	0.43	0.37	0.28	0.23	0.16	0.11	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
10665.60	0.04	0.31	0.67	0.76	0.82	0.75	0.72	0.64	0.55	0.51	0.45	0.37	0.28	0.22	0.15	0.11	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
11332.20	0.04	0.35	0.73	0.79	0.84	0.77	0.74	0.67	0.59	0.54	0.46	0.37	0.28	0.22	0.15	0.10	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
11998.80	0.04	0.38	0.78	0.83	0.85	0.80	0.77	0.71	0.63	0.56	0.46	0.37	0.28	0.21	0.15	0.10	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
12665.40	0.04	0.42	0.79	0.85	0.85	0.83	0.79	0.75	0.66	0.57	0.46	0.37	0.27	0.21	0.15	0.10	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
13332.00	0.05	0.46	0.81	0.88	0.85	0.86	0.83	0.80	0.69	0.57	0.46	0.37	0.27	0.21	0.15	0.10	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
13998.60	0.06	0.49	0.82	0.92	0.87	0.89	0.87	0.85	0.70	0.58	0.47	0.37	0.27	0.21	0.15	0.10	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
14665.20	0.08	0.52	0.84	0.96	0.89	0.93	0.91	0.89	0.72	0.58	0.47	0.37	0.27	0.21	0.15	0.10	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00



**Table S11.** Rotational population as a function of the hexapole voltage (HV) of Ss+ 2-chloroethanol in 0.5 m hexapole.

HV	M=0	M=1	M=2	M=3	M=4	M=5	M=6	M=7	M=8	M=9	M=10	M=11	M=12	M=13	M=14	M=15	M=16	M=17	M=18	M=19	M=20	M=21	M=22	M=23
0.00	0.04	0.04	0.04	0.04	0.03	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
666.60	0.04	0.04	0.04	0.04	0.03	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
1333.20	0.04	0.04	0.04	0.04	0.03	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
1999.80	0.04	0.04	0.04	0.04	0.03	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2666.40	0.04	0.04	0.04	0.04	0.03	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3333.00	0.04	0.04	0.04	0.04	0.03	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3999.60	0.04	0.04	0.04	0.04	0.03	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4666.20	0.04	0.04	0.04	0.04	0.03	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5332.80	0.04	0.04	0.04	0.04	0.03	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5999.40	0.04	0.04	0.04	0.04	0.03	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6666.00	0.04	0.04	0.04	0.04	0.03	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7332.60	0.04	0.04	0.04	0.04	0.03	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7999.20	0.04	0.04	0.04	0.04	0.03	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8665.80	0.04	0.04	0.04	0.04	0.03	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9332.40	0.04	0.04	0.04	0.04	0.03	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9999.00	0.04	0.04	0.04	0.04	0.03	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10665.60	0.04	0.04	0.04	0.04	0.03	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11332.20	0.04	0.04	0.04	0.04	0.03	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11998.80	0.04	0.04	0.05	0.04	0.03	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
12665.40	0.04	0.05	0.05	0.05	0.04	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13332.00	0.04	0.05	0.05	0.05	0.04	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
13998.60	0.05	0.06	0.06	0.06	0.04	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00
14665.20	0.05	0.06	0.06	0.06	0.04	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00

**Table S12.** Rotational population as a function of the hexapole voltage (HV) of Ss- 2-chloroethanol in 0.5 m hexapole.

HV	M=0	M=1	M=2	M=3	M=4	M=5	M=6	M=7	M=8	M=9	M=10	M=11	M=12	M=13	M=14	M=15	M=16	M=17	M=18	M=19	M=20	M=21	M=22	M=23
0.00	0.04	0.04	0.04	0.04	0.03	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
666.60	0.04	0.04	0.04	0.04	0.03	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
1333.20	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
1999.80	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.03	0.03	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2666.40	0.04	0.04	0.05	0.05	0.05	0.04	0.04	0.03	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3333.00	0.04	0.04	0.05	0.05	0.05	0.05	0.04	0.04	0.03	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3999.60	0.04	0.05	0.05	0.06	0.07	0.07	0.07	0.05	0.05	0.04	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
4666.20	0.04	0.05	0.07	0.13	0.14	0.14	0.12	0.11	0.09	0.07	0.05	0.04	0.03	0.02	0.02	0.02	0.02	0.02	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.00
5332.80	0.04	0.05	0.15	0.17	0.20	0.21	0.19	0.18	0.14	0.11	0.08	0.06	0.04	0.04	0.05	0.05	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00
5999.40	0.04	0.05	0.17	0.21	0.29	0.27	0.27	0.25	0.19	0.14	0.11	0.09	0.09	0.09	0.09	0.07	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00
6666.00	0.04	0.05	0.18	0.29	0.35	0.35	0.34	0.31	0.23	0.18	0.16	0.15	0.15	0.13	0.10	0.07	0.05	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00
7332.60	0.04	0.06	0.22	0.37	0.38	0.44	0.40	0.36	0.28	0.25	0.23	0.22	0.19	0.15	0.10	0.07	0.05	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00
7999.20	0.05	0.08	0.26	0.43	0.44	0.49	0.47	0.40	0.35	0.33	0.30	0.27	0.22	0.17	0.10	0.07	0.05	0.03	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00
8665.80	0.06	0.13	0.30	0.47	0.55	0.53	0.53	0.46	0.41	0.41	0.35	0.31	0.24	0.18	0.11	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.00
9332.40	0.09	0.21	0.36	0.50	0.65	0.59	0.57	0.52	0.48	0.46	0.38	0.32	0.25	0.18	0.12	0.09	0.06	0.04	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.00
9999.00	0.14	0.31	0.44	0.57	0.71	0.64	0.60	0.59	0.53	0.49	0.39	0.32	0.25	0.19	0.13	0.10	0.07	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
10665.60	0.18	0.38	0.52	0.66	0.74	0.68	0.64	0.64	0.58	0.50	0.41	0.33	0.25	0.19	0.14	0.10	0.07	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
11332.20	0.20	0.40	0.58	0.75	0.76	0.71	0.68	0.68	0.62	0.51	0.42	0.33	0.25	0.19	0.14	0.10	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
11998.80	0.20	0.39	0.62	0.81	0.77	0.73	0.73	0.72	0.64	0.52	0.43	0.33	0.26	0.20	0.14	0.10	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
12665.40	0.20	0.38	0.64	0.84	0.77	0.75	0.77	0.76	0.65	0.53	0.44	0.33	0.26	0.20	0.15	0.11	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
13332.00	0.19	0.38	0.66	0.84	0.77	0.78	0.82	0.79	0.65	0.53	0.45	0.34	0.26	0.21	0.15	0.11	0.09	0.06	0.05	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01
13998.60	0.20	0.40	0.69	0.84	0.77	0.80	0.86	0.81	0.66	0.54	0.45	0.34	0.26	0.21	0.15	0.11	0.09	0.07	0.05	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01
14665.20	0.20	0.42	0.73	0.85	0.78	0.83	0.90	0.82	0.66	0.54	0.45	0.34	0.27	0.21	0.16	0.12	0.09	0.07	0.05	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01

**Table S13.** Rotational population as a function of the hexapole voltage (HV) of Aa 2-chloroethanol in 1 m hexapole.

HV	M=0	M=1	M=2	M=3	M=4	M=5	M=6	M=7	M=8	M=9	M=10	M=11	M=12	M=13	M=14	M=15	M=16	M=17	M=18	M=19	M=20	M=21	M=22	M=23
0.00	0.03	0.03	0.03	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
666.60	0.03	0.03	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
1333.20	0.03	0.03	0.03	0.05	0.05	0.04	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
1999.80	0.03	0.04	0.11	0.13	0.14	0.12	0.09	0.07	0.05	0.04	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2666.40	0.03	0.11	0.13	0.21	0.25	0.17	0.17	0.13	0.10	0.08	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3333.00	0.03	0.14	0.24	0.25	0.24	0.29	0.21	0.17	0.15	0.12	0.09	0.07	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3999.60	0.03	0.14	0.29	0.30	0.33	0.30	0.27	0.22	0.17	0.15	0.13	0.10	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
4666.20	0.03	0.15	0.27	0.29	0.33	0.34	0.28	0.26	0.21	0.17	0.15	0.13	0.11	0.08	0.06	0.05	0.04	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00
5332.80	0.04	0.17	0.35	0.38	0.36	0.34	0.31	0.27	0.25	0.20	0.16	0.14	0.12	0.10	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00
5999.40	0.05	0.23	0.34	0.40	0.40	0.36	0.30	0.29	0.25	0.22	0.17	0.14	0.12	0.10	0.08	0.07	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00
6666.00	0.08	0.29	0.35	0.43	0.41	0.37	0.33	0.29	0.26	0.22	0.19	0.14	0.12	0.10	0.08	0.07	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00
7332.60	0.09	0.29	0.44	0.47	0.45	0.38	0.33	0.30	0.26	0.22	0.19	0.15	0.12	0.10	0.08	0.07	0.05	0.04	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.00
7999.20	0.10	0.28	0.46	0.50	0.48	0.40	0.35	0.31	0.26	0.23	0.19	0.16	0.13	0.10	0.08	0.07	0.05	0.04	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.00
8665.80	0.11	0.29	0.45	0.53	0.48	0.42	0.36	0.32	0.27	0.23	0.20	0.17	0.13	0.10	0.08	0.06	0.05	0.04	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.00
9332.40	0.12	0.34	0.47	0.57	0.48	0.45	0.36	0.35	0.27	0.24	0.21	0.17	0.13	0.10	0.08	0.06	0.04	0.03	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00
9999.00	0.13	0.41	0.50	0.61	0.49	0.47	0.38	0.36	0.29	0.25	0.22	0.18	0.13	0.10	0.07	0.05	0.04	0.03	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00
10665.60	0.14	0.44	0.52	0.61	0.52	0.47	0.42	0.38	0.30	0.26	0.22	0.18	0.13	0.10	0.07	0.06	0.04	0.03	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00
11332.20	0.16	0.45	0.54	0.59	0.56	0.48	0.45	0.41	0.31	0.27	0.22	0.17	0.12	0.09	0.07	0.06	0.04	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00
11998.80	0.17	0.44	0.57	0.58	0.61	0.51	0.47	0.44	0.32	0.27	0.23	0.17	0.12	0.09	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00
12665.40	0.18	0.46	0.60	0.60	0.62	0.55	0.49	0.47	0.33	0.27	0.23	0.17	0.12	0.10	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00
13332.00	0.20	0.50	0.64	0.61	0.61	0.60	0.51	0.47	0.35	0.27	0.23	0.18	0.13	0.11	0.08	0.07	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00
13998.60	0.22	0.54	0.69	0.65	0.61	0.64	0.54	0.48	0.36	0.29	0.24	0.18	0.14	0.11	0.09	0.07	0.05	0.03	0.03	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00
14665.20	0.24	0.57	0.73	0.70	0.62	0.66	0.56	0.49	0.38	0.30	0.24	0.19	0.16	0.12	0.09	0.07	0.05	0.03	0.03	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00

**Table S14.** Rotational population as a function of the hexapole voltage (HV) of As 2-chloroethanol in 1 m hexapole.

HV	M=0	M=1	M=2	M=3	M=4	M=5	M=6	M=7	M=8	M=9	M=10	M=11	M=12	M=13	M=14	M=15	M=16	M=17	M=18	M=19	M=20	M=21	M=22	M=23
0.00	0.04	0.03	0.03	0.03	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
666.60	0.04	0.03	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
1333.20	0.04	0.03	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
1999.80	0.04	0.03	0.03	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2666.40	0.04	0.03	0.05	0.08	0.07	0.06	0.04	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3333.00	0.04	0.03	0.11	0.10	0.13	0.10	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3999.60	0.04	0.08	0.12	0.19	0.15	0.15	0.11	0.09	0.06	0.05	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4666.20	0.04	0.12	0.12	0.23	0.21	0.17	0.17	0.11	0.10	0.07	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5332.80	0.05	0.11	0.17	0.19	0.28	0.21	0.17	0.16	0.12	0.09	0.07	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5999.40	0.07	0.16	0.28	0.23	0.23	0.28	0.20	0.17	0.16	0.11	0.09	0.07	0.05	0.04	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
6666.00	0.08	0.19	0.33	0.33	0.26	0.27	0.25	0.19	0.17	0.14	0.11	0.08	0.07	0.05	0.04	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
7332.60	0.09	0.19	0.31	0.34	0.32	0.28	0.28	0.23	0.18	0.15	0.14	0.11	0.08	0.07	0.05	0.04	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00
7999.20	0.10	0.21	0.30	0.32	0.32	0.31	0.28	0.26	0.20	0.17	0.16	0.14	0.10	0.08	0.06	0.05	0.04	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00
8665.80	0.12	0.23	0.33	0.34	0.33	0.32	0.29	0.27	0.23	0.19	0.17	0.16	0.13	0.10	0.08	0.06	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00
9332.40	0.13	0.25	0.39	0.40	0.37	0.33	0.31	0.28	0.26	0.21	0.18	0.17	0.14	0.12	0.09	0.07	0.06	0.05	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.00
9999.00	0.15	0.27	0.44	0.43	0.41	0.34	0.33	0.29	0.27	0.24	0.21	0.19	0.15	0.13	0.11	0.08	0.07	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
10665.60	0.16	0.32	0.44	0.43	0.43	0.37	0.33	0.31	0.29	0.26	0.23	0.20	0.17	0.14	0.12	0.09	0.07	0.06	0.04	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01
11332.20	0.17	0.37	0.44	0.46	0.45	0.39	0.35	0.32	0.30	0.28	0.26	0.21	0.18	0.15	0.13	0.10	0.08	0.06	0.05	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01
11998.80	0.19	0.40	0.45	0.50	0.45	0.40	0.37	0.34	0.32	0.30	0.27	0.23	0.19	0.16	0.13	0.11	0.09	0.07	0.05	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01
12665.40	0.20	0.42	0.50	0.53	0.47	0.41	0.39	0.36	0.33	0.32	0.28	0.23	0.20	0.16	0.13	0.11	0.09	0.07	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01
13332.00	0.20	0.42	0.55	0.55	0.49	0.43	0.41	0.38	0.34	0.34	0.29	0.24	0.20	0.16	0.13	0.11	0.09	0.07	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01
13998.60	0.21	0.43	0.59	0.58	0.53	0.45	0.43	0.40	0.35	0.35	0.30	0.25	0.20	0.17	0.13	0.11	0.09	0.07	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01
14665.20	0.22	0.43	0.59	0.60	0.55	0.46	0.45	0.41	0.37	0.35	0.30	0.25	0.21	0.17	0.13	0.11	0.09	0.07	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01

**Table S15.** Rotational population as a function of the hexapole voltage (HV) of Sa 2-chloroethanol in 1 m hexapole.

HV	M=0	M=1	M=2	M=3	M=4	M=5	M=6	M=7	M=8	M=9	M=10	M=11	M=12	M=13	M=14	M=15	M=16	M=17	M=18	M=19	M=20	M=21	M=22	M=23
0.00	0.04	0.04	0.04	0.04	0.03	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
666.60	0.04	0.03	0.03	0.03	0.03	0.03	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
1333.20	0.04	0.03	0.12	0.13	0.17	0.18	0.16	0.14	0.11	0.09	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
1999.80	0.04	0.07	0.18	0.35	0.35	0.36	0.36	0.30	0.26	0.20	0.16	0.12	0.09	0.06	0.05	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00
2666.40	0.04	0.18	0.34	0.43	0.46	0.45	0.44	0.40	0.35	0.27	0.22	0.18	0.14	0.11	0.10	0.08	0.07	0.05	0.04	0.02	0.02	0.01	0.01	0.00
3333.00	0.04	0.19	0.41	0.52	0.51	0.53	0.48	0.42	0.36	0.29	0.25	0.23	0.20	0.16	0.13	0.09	0.07	0.05	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.00
3999.60	0.04	0.22	0.49	0.57	0.63	0.54	0.50	0.46	0.37	0.33	0.31	0.26	0.20	0.16	0.11	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.00
4666.20	0.04	0.29	0.58	0.63	0.68	0.58	0.55	0.51	0.43	0.39	0.33	0.26	0.19	0.15	0.10	0.07	0.05	0.04	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.00
5332.80	0.05	0.37	0.63	0.71	0.68	0.68	0.61	0.58	0.49	0.40	0.34	0.25	0.19	0.14	0.10	0.07	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00
5999.40	0.08	0.42	0.68	0.77	0.76	0.73	0.67	0.64	0.50	0.41	0.34	0.25	0.18	0.14	0.10	0.07	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00
6666.00	0.12	0.46	0.70	0.78	0.78	0.77	0.75	0.65	0.51	0.43	0.35	0.26	0.19	0.15	0.11	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00
7332.60	0.15	0.54	0.76	0.88	0.82	0.84	0.78	0.65	0.53	0.45	0.37	0.28	0.22	0.16	0.13	0.09	0.06	0.05	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00
7999.20	0.18	0.63	0.80	0.90	0.84	0.90	0.80	0.65	0.55	0.48	0.39	0.31	0.24	0.17	0.14	0.10	0.07	0.05	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00
8665.80	0.22	0.70	0.81	0.88	0.89	0.91	0.81	0.67	0.57	0.51	0.40	0.33	0.25	0.18	0.15	0.11	0.07	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
9332.40	0.25	0.73	0.86	0.85	0.94	0.92	0.81	0.69	0.59	0.53	0.40	0.34	0.26	0.18	0.15	0.11	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01
9999.00	0.29	0.76	0.89	0.85	0.97	0.93	0.82	0.72	0.63	0.54	0.41	0.35	0.26	0.19	0.15	0.12	0.09	0.07	0.05	0.03	0.02	0.02	0.01	0.00
10665.60	0.32	0.80	0.94	0.87	0.98	0.94	0.83	0.72	0.67	0.53	0.42	0.35	0.27	0.19	0.16	0.13	0.10	0.07	0.05	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
11332.20	0.34	0.84	1.03	0.93	0.98	0.94	0.85	0.72	0.71	0.53	0.41	0.35	0.27	0.20	0.17	0.13	0.10	0.07	0.05	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
11998.80	0.36	0.88	1.11	0.98	1.01	0.94	0.85	0.72	0.72	0.52	0.42	0.35	0.28	0.21	0.17	0.14	0.10	0.07	0.05	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
12665.40	0.38	0.88	1.16	1.04	1.04	0.96	0.86	0.73	0.72	0.52	0.42	0.35	0.29	0.22	0.17	0.14	0.11	0.07	0.05	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
13332.00	0.41	0.90	1.20	1.05	1.08	0.97	0.87	0.73	0.70	0.52	0.42	0.36	0.29	0.23	0.17	0.13	0.10	0.07	0.05	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
13998.60	0.44	0.92	1.21	1.04	1.08	0.99	0.86	0.73	0.69	0.50	0.43	0.36	0.30	0.23	0.17	0.13	0.10	0.06	0.05	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01
14665.20	0.47	0.95	1.20	1.04	1.07	0.97	0.85	0.72	0.67	0.50	0.43	0.37	0.30	0.23	0.17	0.12	0.10	0.06	0.05	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00

**Table S16.** Rotational population as a function of the hexapole voltage (HV) of Ss+ 2-chloroethanol in 1 m hexapole.

HV	M=0	M=1	M=2	M=3	M=4	M=5	M=6	M=7	M=8	M=9	M=10	M=11	M=12	M=13	M=14	M=15	M=16	M=17	M=18	M=19	M=20	M=21	M=22	M=23
0.00	0.04	0.04	0.04	0.04	0.03	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
666.60	0.04	0.04	0.04	0.04	0.03	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
1333.20	0.04	0.04	0.04	0.04	0.03	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
1999.80	0.04	0.04	0.04	0.04	0.03	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2666.40	0.04	0.04	0.04	0.04	0.03	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3333.00	0.04	0.04	0.04	0.04	0.03	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3999.60	0.04	0.04	0.04	0.04	0.03	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4666.20	0.04	0.04	0.04	0.04	0.03	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5332.80	0.04	0.05	0.05	0.05	0.04	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00
5999.40	0.06	0.06	0.06	0.06	0.04	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.02	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00
6666.00	0.12	0.12	0.10	0.08	0.05	0.04	0.03	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.02	0.03	0.04	0.03	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00
7332.60	0.20	0.20	0.17	0.12	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.02	0.04	0.05	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00
7999.20	0.22	0.22	0.22	0.16	0.10	0.08	0.06	0.03	0.02	0.02	0.02	0.02	0.04	0.07	0.07	0.05	0.04	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00
8665.80	0.20	0.21	0.22	0.21	0.11	0.09	0.07	0.05	0.03	0.02	0.02	0.05	0.08	0.09	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00
9332.40	0.19	0.20	0.21	0.23	0.13	0.10	0.08	0.07	0.04	0.03	0.04	0.08	0.10	0.08	0.05	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00
9999.00	0.19	0.19	0.20	0.22	0.16	0.10	0.09	0.08	0.06	0.04	0.08	0.11	0.10	0.07	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
10665.60	0.19	0.19	0.20	0.21	0.19	0.11	0.09	0.09	0.08	0.08	0.11	0.12	0.09	0.06	0.04	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
11332.20	0.19	0.19	0.20	0.20	0.21	0.12	0.10	0.09	0.11	0.11	0.13	0.12	0.08	0.05	0.03	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
11998.80	0.20	0.20	0.22	0.20	0.21	0.13	0.11	0.09	0.13	0.14	0.13	0.11	0.07	0.04	0.03	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
12665.40	0.21	0.20	0.23	0.21	0.21	0.14	0.12	0.11	0.16	0.17	0.14	0.10	0.06	0.04	0.03	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
13332.00	0.22	0.21	0.25	0.21	0.20	0.15	0.13	0.13	0.18	0.18	0.14	0.10	0.06	0.04	0.03	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
13998.60	0.24	0.22	0.26	0.22	0.21	0.16	0.15	0.16	0.19	0.19	0.14	0.10	0.06	0.04	0.03	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
14665.20	0.26	0.24	0.27	0.23	0.21	0.18	0.17	0.18	0.20	0.20	0.14	0.10	0.07	0.05	0.03	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00

**Table S17.** Rotational population as a function of the hexapole voltage (HV) of Ss- 2-chloroethanol in 1 m hexapole.

HV	M=0	M=1	M=2	M=3	M=4	M=5	M=6	M=7	M=8	M=9	M=10	M=11	M=12	M=13	M=14	M=15	M=16	M=17	M=18	M=19	M=20	M=21	M=22	M=23
0.00	0.04	0.04	0.04	0.04	0.03	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
666.60	0.04	0.04	0.03	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
1333.20	0.04	0.03	0.03	0.03	0.03	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
1999.80	0.04	0.03	0.10	0.12	0.13	0.15	0.14	0.12	0.10	0.07	0.05	0.04	0.03	0.02	0.03	0.03	0.03	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00
2666.40	0.04	0.04	0.15	0.24	0.28	0.30	0.28	0.25	0.19	0.16	0.13	0.13	0.12	0.10	0.07	0.05	0.04	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00
3333.00	0.05	0.09	0.22	0.36	0.42	0.40	0.41	0.35	0.31	0.29	0.25	0.22	0.18	0.13	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00
3999.60	0.13	0.27	0.37	0.47	0.55	0.51	0.47	0.44	0.40	0.36	0.29	0.24	0.18	0.14	0.10	0.07	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00
4666.20	0.14	0.27	0.46	0.61	0.59	0.55	0.51	0.50	0.45	0.37	0.32	0.24	0.18	0.14	0.10	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.00
5332.80	0.14	0.29	0.50	0.61	0.58	0.58	0.56	0.55	0.46	0.39	0.32	0.23	0.18	0.14	0.11	0.08	0.06	0.05	0.04	0.02	0.02	0.01	0.01	0.00
5999.40	0.16	0.33	0.57	0.63	0.59	0.62	0.61	0.55	0.46	0.39	0.31	0.23	0.18	0.14	0.11	0.08	0.07	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
6666.00	0.19	0.36	0.64	0.65	0.65	0.67	0.65	0.56	0.48	0.39	0.31	0.24	0.18	0.14	0.11	0.09	0.07	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
7332.60	0.21	0.42	0.67	0.69	0.73	0.73	0.67	0.62	0.49	0.40	0.32	0.24	0.19	0.15	0.12	0.09	0.07	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
7999.20	0.24	0.48	0.70	0.76	0.80	0.79	0.70	0.65	0.51	0.41	0.33	0.25	0.19	0.16	0.13	0.10	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
8665.80	0.27	0.54	0.75	0.82	0.84	0.86	0.75	0.66	0.52	0.42	0.33	0.26	0.20	0.17	0.15	0.11	0.09	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
9332.40	0.31	0.59	0.79	0.88	0.87	0.90	0.80	0.68	0.54	0.42	0.33	0.27	0.22	0.19	0.16	0.12	0.09	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
9999.00	0.34	0.62	0.81	0.94	0.90	0.93	0.82	0.69	0.54	0.43	0.34	0.29	0.24	0.20	0.17	0.12	0.09	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
10665.60	0.37	0.65	0.84	1.00	0.92	0.96	0.86	0.71	0.54	0.44	0.35	0.31	0.26	0.21	0.17	0.12	0.09	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
11332.20	0.40	0.70	0.90	1.04	0.93	0.99	0.86	0.72	0.55	0.45	0.37	0.34	0.28	0.22	0.17	0.12	0.09	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
11998.80	0.42	0.74	0.95	1.08	0.94	1.04	0.87	0.74	0.56	0.47	0.40	0.36	0.29	0.22	0.16	0.12	0.09	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
12665.40	0.46	0.80	0.98	1.10	0.97	1.06	0.88	0.75	0.58	0.50	0.42	0.38	0.30	0.22	0.16	0.12	0.09	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
13332.00	0.50	0.85	1.01	1.11	1.01	1.05	0.91	0.75	0.60	0.53	0.44	0.39	0.31	0.22	0.16	0.12	0.09	0.07	0.05	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
13998.60	0.54	0.89	1.03	1.12	1.06	1.04	0.94	0.77	0.62	0.56	0.45	0.40	0.31	0.22	0.16	0.12	0.09	0.07	0.05	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
14665.20	0.59	0.94	1.06	1.12	1.10	1.03	0.94	0.77	0.63	0.57	0.45	0.40	0.31	0.23	0.16	0.12	0.09	0.07	0.05	0.03	0.02	0.02	0.01	0.00

**Table S18.** Rotational population as a function of the hexapole voltage (HV) of Aa 2-chloroethanol in 2 m hexapole.

HV	M=0	M=1	M=2	M=3	M=4	M=5	M=6	M=7	M=8	M=9	M=10	M=11	M=12	M=13	M=14	M=15	M=16	M=17	M=18	M=19	M=20	M=21	M=22	M=23
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
666.60	0.00	0.00	0.08	0.11	0.19	0.19	0.22	0.20	0.18	0.15	0.11	0.08	0.06	0.05	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
1333.20	0.00	0.11	0.25	0.30	0.29	0.27	0.22	0.18	0.16	0.13	0.11	0.09	0.07	0.06	0.05	0.04	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00
1999.80	0.00	0.13	0.35	0.34	0.33	0.34	0.39	0.36	0.31	0.28	0.27	0.22	0.17	0.13	0.11	0.08	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00
2666.40	0.00	0.26	0.39	0.36	0.47	0.52	0.48	0.44	0.44	0.37	0.28	0.22	0.17	0.12	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
3333.00	0.00	0.30	0.39	0.47	0.58	0.57	0.55	0.51	0.43	0.34	0.26	0.20	0.15	0.11	0.07	0.05	0.04	0.02	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
3999.60	0.04	0.34	0.42	0.59	0.66	0.64	0.60	0.49	0.42	0.33	0.26	0.21	0.14	0.10	0.07	0.05	0.04	0.02	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
4666.20	0.06	0.38	0.52	0.68	0.71	0.70	0.58	0.49	0.44	0.34	0.27	0.21	0.15	0.11	0.07	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
5332.80	0.07	0.43	0.61	0.74	0.76	0.70	0.61	0.53	0.46	0.38	0.30	0.23	0.17	0.13	0.09	0.07	0.05	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00
5999.40	0.08	0.43	0.66	0.73	0.81	0.67	0.63	0.57	0.51	0.43	0.34	0.26	0.21	0.16	0.12	0.09	0.07	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
6666.00	0.09	0.42	0.73	0.79	0.80	0.70	0.67	0.65	0.55	0.44	0.36	0.30	0.25	0.19	0.14	0.10	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
7332.60	0.10	0.43	0.80	0.84	0.78	0.72	0.75	0.68	0.56	0.44	0.38	0.32	0.26	0.19	0.14	0.10	0.08	0.05	0.04	0.02	0.02	0.01	0.01	0.00
7999.20	0.11	0.48	0.82	0.87	0.78	0.77	0.81	0.68	0.55	0.44	0.40	0.32	0.25	0.18	0.14	0.10	0.07	0.05	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00
8665.80	0.13	0.51	0.81	0.87	0.79	0.84	0.82	0.66	0.54	0.47	0.41	0.31	0.24	0.18	0.13	0.09	0.07	0.05	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00
9332.40	0.15	0.55	0.83	0.86	0.81	0.90	0.81	0.65	0.56	0.50	0.41	0.30	0.24	0.17	0.13	0.09	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00
9999.00	0.18	0.60	0.87	0.85	0.85	0.92	0.80	0.63	0.58	0.51	0.40	0.30	0.23	0.17	0.12	0.09	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00
10665.60	0.22	0.63	0.91	0.86	0.90	0.90	0.77	0.63	0.59	0.50	0.39	0.29	0.22	0.17	0.12	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00
11332.20	0.24	0.66	0.97	0.87	0.96	0.91	0.75	0.66	0.61	0.50	0.39	0.29	0.22	0.17	0.12	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00
11998.80	0.27	0.69	0.98	0.89	0.99	0.91	0.75	0.69	0.61	0.50	0.38	0.29	0.22	0.18	0.13	0.09	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00
12665.40	0.29	0.73	0.98	0.90	0.99	0.88	0.74	0.70	0.61	0.49	0.38	0.29	0.23	0.18	0.13	0.09	0.07	0.05	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.00
13332.00	0.31	0.76	0.96	0.94	0.99	0.86	0.75	0.70	0.61	0.49	0.38	0.30	0.24	0.19	0.14	0.10	0.07	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
13998.60	0.34	0.78	0.95	0.97	1.00	0.84	0.77	0.70	0.61	0.49	0.39	0.32	0.25	0.19	0.14	0.11	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
14665.20	0.38	0.80	0.95	1.01	1.01	0.84	0.79	0.72	0.60	0.49	0.40	0.33	0.26	0.20	0.15	0.11	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00



**Table S19.** Rotational population as a function of the hexapole voltage (HV) of As 2-chloroethanol in 2 m hexapole.

HV	M=0	M=1	M=2	M=3	M=4	M=5	M=6	M=7	M=8	M=9	M=10	M=11	M=12	M=13	M=14	M=15	M=16	M=17	M=18	M=19	M=20	M=21	M=22	M=23
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
666.60	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
1333.20	0.00	0.04	0.06	0.11	0.08	0.09	0.06	0.05	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
1999.80	0.02	0.09	0.16	0.13	0.13	0.17	0.12	0.10	0.09	0.07	0.05	0.04	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2666.40	0.04	0.11	0.17	0.18	0.19	0.18	0.17	0.16	0.12	0.10	0.09	0.08	0.06	0.04	0.04	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
3333.00	0.06	0.14	0.25	0.26	0.24	0.20	0.19	0.17	0.16	0.14	0.12	0.10	0.09	0.08	0.06	0.05	0.04	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00
3999.60	0.08	0.24	0.27	0.28	0.27	0.24	0.21	0.20	0.18	0.17	0.15	0.13	0.11	0.09	0.08	0.06	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00
4666.20	0.09	0.25	0.33	0.32	0.32	0.26	0.24	0.22	0.20	0.19	0.16	0.14	0.11	0.09	0.07	0.06	0.05	0.04	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.00
5332.80	0.10	0.27	0.33	0.37	0.32	0.30	0.26	0.23	0.23	0.20	0.17	0.14	0.12	0.09	0.07	0.06	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00
5999.40	0.12	0.34	0.38	0.42	0.36	0.32	0.28	0.24	0.25	0.20	0.17	0.14	0.12	0.09	0.07	0.06	0.04	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00
6666.00	0.14	0.37	0.40	0.44	0.42	0.31	0.30	0.26	0.25	0.22	0.18	0.15	0.12	0.09	0.07	0.06	0.04	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00
7332.60	0.17	0.37	0.45	0.44	0.44	0.35	0.29	0.29	0.26	0.22	0.19	0.15	0.12	0.09	0.07	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00
7999.20	0.22	0.41	0.51	0.47	0.43	0.41	0.32	0.32	0.28	0.22	0.19	0.15	0.12	0.09	0.07	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00
8665.80	0.26	0.47	0.58	0.53	0.44	0.41	0.35	0.33	0.28	0.24	0.19	0.15	0.12	0.09	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00
9332.40	0.30	0.49	0.61	0.57	0.49	0.41	0.36	0.34	0.28	0.24	0.20	0.16	0.13	0.10	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00
9999.00	0.33	0.49	0.62	0.56	0.52	0.43	0.37	0.35	0.29	0.25	0.21	0.17	0.13	0.10	0.08	0.07	0.05	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00
10665.60	0.35	0.52	0.63	0.55	0.52	0.44	0.38	0.36	0.29	0.25	0.22	0.18	0.14	0.11	0.09	0.07	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00
11332.20	0.37	0.56	0.64	0.57	0.51	0.44	0.41	0.37	0.30	0.26	0.22	0.19	0.15	0.12	0.09	0.07	0.05	0.04	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.00
11998.80	0.39	0.60	0.67	0.60	0.52	0.45	0.43	0.38	0.31	0.27	0.22	0.19	0.16	0.13	0.10	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.00
12665.40	0.40	0.62	0.71	0.65	0.53	0.47	0.44	0.38	0.32	0.28	0.23	0.20	0.16	0.14	0.11	0.08	0.06	0.05	0.03	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
13332.00	0.42	0.65	0.73	0.67	0.54	0.47	0.44	0.38	0.33	0.28	0.24	0.20	0.17	0.15	0.11	0.08	0.07	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
13998.60	0.44	0.67	0.73	0.66	0.56	0.47	0.45	0.39	0.34	0.29	0.25	0.21	0.17	0.15	0.12	0.09	0.07	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
14665.20	0.45	0.68	0.73	0.64	0.58	0.47	0.46	0.39	0.35	0.30	0.26	0.21	0.18	0.16	0.12	0.09	0.07	0.05	0.04	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01

**Table S20.** Rotational population as a function of the hexapole voltage (HV) of Sa 2-chloroethanol in 2 m hexapole.

HV	M=0	M=1	M=2	M=3	M=4	M=5	M=6	M=7	M=8	M=9	M=10	M=11	M=12	M=13	M=14	M=15	M=16	M=17	M=18	M=19	M=20	M=21	M=22	M=23
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
666.60	0.00	0.03	0.09	0.20	0.20	0.22	0.21	0.17	0.16	0.12	0.09	0.07	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
1333.20	0.00	0.12	0.28	0.32	0.35	0.31	0.28	0.24	0.20	0.18	0.17	0.15	0.12	0.09	0.07	0.05	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00
1999.80	0.02	0.25	0.39	0.46	0.42	0.38	0.37	0.33	0.28	0.23	0.18	0.13	0.10	0.07	0.05	0.04	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
2666.40	0.08	0.38	0.47	0.50	0.48	0.49	0.47	0.37	0.33	0.26	0.21	0.15	0.11	0.09	0.06	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00
3333.00	0.14	0.45	0.49	0.50	0.57	0.58	0.50	0.44	0.37	0.29	0.23	0.18	0.13	0.11	0.09	0.07	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00
3999.60	0.17	0.51	0.59	0.63	0.63	0.61	0.54	0.46	0.39	0.32	0.25	0.20	0.17	0.14	0.11	0.09	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00
4666.20	0.21	0.53	0.60	0.63	0.68	0.64	0.57	0.47	0.40	0.33	0.28	0.24	0.19	0.15	0.12	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00
5332.80	0.26	0.53	0.65	0.70	0.73	0.67	0.59	0.52	0.42	0.36	0.31	0.26	0.20	0.16	0.12	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00
5999.40	0.29	0.57	0.70	0.75	0.77	0.69	0.63	0.56	0.46	0.39	0.33	0.27	0.21	0.16	0.11	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.00
6666.00	0.33	0.60	0.72	0.78	0.83	0.70	0.68	0.60	0.49	0.42	0.34	0.28	0.21	0.16	0.11	0.08	0.06	0.05	0.03	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
7332.60	0.38	0.64	0.78	0.85	0.84	0.74	0.70	0.64	0.51	0.42	0.35	0.27	0.21	0.16	0.12	0.09	0.07	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
7999.20	0.43	0.70	0.83	0.91	0.84	0.77	0.73	0.67	0.53	0.44	0.35	0.28	0.21	0.17	0.13	0.10	0.07	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
8665.80	0.48	0.72	0.86	0.96	0.83	0.79	0.76	0.68	0.54	0.44	0.36	0.28	0.23	0.18	0.14	0.10	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
9332.40	0.52	0.72	0.89	0.97	0.84	0.83	0.79	0.68	0.54	0.45	0.37	0.30	0.24	0.19	0.15	0.11	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
9999.00	0.55	0.77	0.93	0.98	0.87	0.87	0.79	0.68	0.55	0.46	0.39	0.32	0.25	0.20	0.15	0.11	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
10665.60	0.59	0.81	0.96	0.95	0.88	0.88	0.78	0.67	0.55	0.46	0.41	0.33	0.26	0.20	0.15	0.11	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
11332.20	0.62	0.85	0.99	0.95	0.92	0.90	0.79	0.67	0.56	0.49	0.42	0.34	0.26	0.20	0.15	0.11	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01
11998.80	0.65	0.87	1.00	0.96	0.97	0.90	0.79	0.69	0.56	0.50	0.43	0.34	0.26	0.19	0.15	0.11	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01
12665.40	0.67	0.90	1.01	0.95	1.00	0.90	0.79	0.70	0.56	0.51	0.42	0.33	0.25	0.19	0.14	0.11	0.08	0.06	0.05	0.03	0.02	0.02	0.01	0.00
13332.00	0.70	0.92	1.01	0.96	1.01	0.91	0.79	0.71	0.57	0.52	0.41	0.32	0.25	0.20	0.14	0.11	0.08	0.06	0.05	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
13998.60	0.72	0.94	1.02	0.97	1.00	0.91	0.81	0.70	0.58	0.52	0.40	0.32	0.25	0.20	0.14	0.11	0.08	0.06	0.05	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
14665.20	0.73	0.97	1.03	1.00	0.98	0.91	0.81	0.69	0.58	0.52	0.40	0.31	0.25	0.20	0.15	0.11	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00

**Table S21.** Rotational population as a function of the hexapole voltage (HV) of Ss+ 2-chloroethanol in 2 m hexapole.

HV	M=0	M=1	M=2	M=3	M=4	M=5	M=6	M=7	M=8	M=9	M=10	M=11	M=12	M=13	M=14	M=15	M=16	M=17	M=18	M=19	M=20	M=21	M=22	M=23
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
666.60	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
1333.20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
1999.80	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00
2666.40	0.11	0.11	0.11	0.07	0.04	0.03	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	0.04	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
3333.00	0.09	0.09	0.09	0.11	0.07	0.04	0.03	0.04	0.02	0.02	0.04	0.06	0.06	0.04	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
3999.60	0.09	0.09	0.10	0.10	0.11	0.05	0.04	0.04	0.07	0.08	0.07	0.06	0.04	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
4666.20	0.11	0.10	0.12	0.10	0.10	0.07	0.07	0.08	0.10	0.10	0.07	0.05	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
5332.80	0.14	0.13	0.15	0.12	0.11	0.10	0.11	0.11	0.11	0.10	0.08	0.05	0.04	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5999.40	0.18	0.17	0.18	0.14	0.13	0.13	0.15	0.13	0.11	0.11	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6666.00	0.20	0.20	0.21	0.16	0.15	0.18	0.18	0.13	0.12	0.11	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
7332.60	0.23	0.23	0.23	0.19	0.18	0.21	0.19	0.14	0.13	0.11	0.09	0.07	0.05	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
7999.20	0.26	0.26	0.26	0.23	0.22	0.25	0.20	0.15	0.13	0.12	0.09	0.07	0.06	0.04	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00
8665.80	0.31	0.30	0.29	0.28	0.26	0.26	0.21	0.16	0.14	0.13	0.10	0.08	0.06	0.04	0.04	0.04	0.03	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00
9332.40	0.38	0.35	0.34	0.34	0.30	0.28	0.22	0.17	0.16	0.14	0.10	0.08	0.07	0.05	0.05	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00
9999.00	0.44	0.41	0.40	0.38	0.34	0.30	0.24	0.19	0.17	0.15	0.11	0.09	0.07	0.07	0.07	0.06	0.05	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
10665.60	0.47	0.44	0.45	0.42	0.36	0.33	0.27	0.21	0.18	0.15	0.12	0.10	0.09	0.09	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
11332.20	0.49	0.46	0.48	0.46	0.38	0.35	0.29	0.23	0.19	0.16	0.13	0.12	0.11	0.10	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00
11998.80	0.51	0.48	0.50	0.51	0.41	0.37	0.31	0.25	0.20	0.17	0.15	0.14	0.13	0.10	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00
12665.40	0.53	0.49	0.52	0.54	0.44	0.38	0.32	0.26	0.21	0.17	0.16	0.16	0.14	0.10	0.07	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00
13332.00	0.55	0.51	0.54	0.56	0.47	0.39	0.32	0.27	0.23	0.18	0.18	0.17	0.14	0.10	0.07	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00
13998.60	0.57	0.53	0.57	0.57	0.50	0.41	0.33	0.29	0.25	0.20	0.20	0.18	0.14	0.09	0.07	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00
14665.20	0.59	0.56	0.59	0.58	0.52	0.43	0.34	0.29	0.27	0.22	0.21	0.18	0.13	0.09	0.07	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00

**Table S22.** Rotational population as a function of the hexapole voltage (HV) of Ss- 2-chloroethanol in 2 m hexapole.

HV	M=0	M=1	M=2	M=3	M=4	M=5	M=6	M=7	M=8	M=9	M=10	M=11	M=12	M=13	M=14	M=15	M=16	M=17	M=18	M=19	M=20	M=21	M=22	M=23
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
666.60	0.00	0.00	0.04	0.06	0.07	0.08	0.07	0.07	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
1333.20	0.06	0.15	0.21	0.28	0.33	0.31	0.27	0.26	0.24	0.21	0.17	0.15	0.11	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00
1999.80	0.06	0.18	0.33	0.36	0.34	0.34	0.33	0.30	0.26	0.21	0.17	0.13	0.10	0.08	0.06	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00
2666.40	0.11	0.27	0.42	0.42	0.45	0.42	0.38	0.34	0.26	0.21	0.17	0.12	0.10	0.08	0.07	0.06	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00
3333.00	0.17	0.35	0.46	0.52	0.51	0.48	0.45	0.36	0.29	0.23	0.19	0.15	0.13	0.12	0.09	0.07	0.05	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00
3999.60	0.20	0.42	0.53	0.58	0.51	0.53	0.48	0.40	0.32	0.27	0.23	0.20	0.17	0.13	0.09	0.06	0.05	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00
4666.20	0.27	0.52	0.58	0.59	0.58	0.55	0.54	0.46	0.36	0.33	0.27	0.23	0.18	0.14	0.10	0.07	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00
5332.80	0.36	0.63	0.64	0.63	0.63	0.61	0.57	0.48	0.41	0.35	0.29	0.24	0.19	0.14	0.10	0.08	0.06	0.04	0.03	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
5999.40	0.42	0.68	0.72	0.71	0.66	0.63	0.60	0.52	0.45	0.37	0.31	0.25	0.19	0.15	0.11	0.08	0.07	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
6666.00	0.46	0.67	0.75	0.73	0.69	0.66	0.63	0.55	0.46	0.38	0.32	0.24	0.20	0.16	0.12	0.09	0.07	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
7332.60	0.52	0.70	0.78	0.72	0.72	0.69	0.66	0.60	0.47	0.39	0.32	0.25	0.21	0.17	0.13	0.09	0.07	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
7999.20	0.54	0.71	0.80	0.75	0.74	0.71	0.69	0.63	0.49	0.40	0.34	0.27	0.22	0.17	0.13	0.09	0.07	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
8665.80	0.57	0.72	0.81	0.78	0.76	0.74	0.71	0.66	0.50	0.42	0.36	0.30	0.23	0.18	0.13	0.09	0.07	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
9332.40	0.59	0.74	0.82	0.81	0.80	0.77	0.74	0.69	0.52	0.45	0.38	0.31	0.24	0.18	0.13	0.09	0.07	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
9999.00	0.62	0.76	0.83	0.83	0.84	0.80	0.76	0.72	0.54	0.47	0.39	0.32	0.24	0.18	0.13	0.10	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
10665.60	0.65	0.79	0.84	0.86	0.88	0.84	0.78	0.73	0.56	0.48	0.39	0.32	0.25	0.18	0.14	0.11	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
11332.20	0.69	0.84	0.87	0.91	0.91	0.88	0.80	0.73	0.58	0.49	0.39	0.32	0.25	0.19	0.14	0.11	0.08	0.06	0.05	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
11998.80	0.74	0.89	0.91	0.95	0.92	0.93	0.83	0.73	0.60	0.48	0.39	0.33	0.25	0.19	0.15	0.11	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
12665.40	0.78	0.92	0.95	1.01	0.93	0.95	0.84	0.72	0.60	0.48	0.39	0.33	0.26	0.20	0.15	0.11	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
13332.00	0.81	0.93	0.98	1.06	0.95	0.95	0.84	0.71	0.60	0.48	0.39	0.34	0.26	0.20	0.16	0.11	0.09	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
13998.60	0.83	0.92	1.01	1.10	0.95	0.96	0.85	0.70	0.59	0.47	0.40	0.34	0.26	0.20	0.16	0.12	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
14665.20	0.84	0.92	1.02	1.12	0.96	0.99	0.86	0.71	0.59	0.48	0.41	0.35	0.27	0.21	0.16	0.12	0.09	0.06	0.04	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01

**Table S23.** Rotational population as a function of the hexapole voltage (HV) of A 1-chloroethanol in 0.5 m hexapole.

HV	M=0	M=1	M=2	M=3	M=4	M=5	M=6	M=7	M=8	M=9	M=10	M=11	M=12	M=13	M=14	M=15	M=16	M=17	M=18	M=19	M=20	M=21	M=22	M=23
0.00	0.04	0.04	0.04	0.04	0.03	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
666.60	0.04	0.04	0.04	0.04	0.03	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
1333.20	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.03	0.03	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
1999.80	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2666.40	0.04	0.04	0.04	0.05	0.05	0.04	0.04	0.04	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3333.00	0.04	0.04	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.04	0.04	0.04	0.03	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
3999.60	0.04	0.04	0.05	0.05	0.05	0.05	0.07	0.10	0.12	0.12	0.11	0.11	0.10	0.09	0.08	0.07	0.05	0.04	0.03	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01
4666.20	0.04	0.04	0.05	0.06	0.06	0.10	0.18	0.22	0.22	0.21	0.21	0.21	0.19	0.16	0.14	0.11	0.09	0.07	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01
5332.80	0.04	0.04	0.05	0.09	0.14	0.25	0.32	0.33	0.32	0.33	0.32	0.28	0.23	0.20	0.16	0.12	0.09	0.07	0.05	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
5999.40	0.04	0.04	0.06	0.16	0.26	0.40	0.44	0.43	0.45	0.44	0.38	0.31	0.26	0.21	0.16	0.12	0.09	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
6666.00	0.04	0.05	0.09	0.21	0.37	0.53	0.54	0.55	0.57	0.50	0.42	0.34	0.27	0.21	0.15	0.11	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
7332.60	0.04	0.05	0.14	0.27	0.50	0.62	0.63	0.67	0.65	0.54	0.45	0.36	0.27	0.21	0.15	0.11	0.08	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
7999.20	0.04	0.05	0.17	0.34	0.64	0.68	0.76	0.74	0.69	0.57	0.47	0.36	0.28	0.21	0.15	0.11	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
8665.80	0.04	0.05	0.21	0.42	0.73	0.74	0.86	0.78	0.73	0.58	0.47	0.37	0.29	0.21	0.15	0.11	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
9332.40	0.04	0.05	0.25	0.51	0.78	0.85	0.91	0.83	0.75	0.59	0.47	0.38	0.29	0.21	0.15	0.12	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
9999.00	0.04	0.06	0.28	0.62	0.81	0.97	0.94	0.88	0.75	0.60	0.47	0.38	0.29	0.21	0.16	0.12	0.09	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
10665.60	0.04	0.07	0.32	0.73	0.86	1.05	0.97	0.89	0.74	0.61	0.48	0.38	0.29	0.21	0.16	0.12	0.09	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
11332.20	0.04	0.08	0.36	0.82	0.94	1.10	1.01	0.89	0.75	0.62	0.48	0.38	0.30	0.22	0.16	0.12	0.09	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
11998.80	0.04	0.09	0.42	0.87	1.04	1.14	1.04	0.90	0.76	0.63	0.48	0.38	0.31	0.22	0.17	0.12	0.09	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
12665.40	0.04	0.09	0.48	0.90	1.12	1.19	1.06	0.90	0.77	0.63	0.49	0.39	0.31	0.23	0.16	0.12	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
13332.00	0.04	0.11	0.55	0.93	1.18	1.24	1.05	0.90	0.78	0.64	0.49	0.39	0.31	0.23	0.16	0.12	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
13998.60	0.04	0.14	0.63	0.96	1.23	1.28	1.06	0.92	0.79	0.66	0.50	0.40	0.32	0.23	0.16	0.12	0.08	0.06	0.04	0.02	0.02	0.01	0.01	0.00
14665.20	0.04	0.16	0.71	1.02	1.25	1.29	1.07	0.92	0.80	0.67	0.51	0.40	0.32	0.24	0.16	0.11	0.08	0.06	0.04	0.02	0.02	0.01	0.00	0.00

**Table S24.** Rotational population as a function of the hexapole voltage (HV) of S 1-chloroethanol in 0.5 m hexapole.

HV	M=0	M=1	M=2	M=3	M=4	M=5	M=6	M=7	M=8	M=9	M=10	M=11	M=12	M=13	M=14	M=15	M=16	M=17	M=18	M=19	M=20	M=21	M=22	M=23
0.00	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
666.60	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.03	0.03	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
1333.20	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.03	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
1999.80	0.04	0.04	0.05	0.05	0.05	0.05	0.04	0.04	0.03	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2666.40	0.04	0.04	0.05	0.06	0.06	0.06	0.06	0.06	0.04	0.05	0.04	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3333.00	0.04	0.05	0.06	0.13	0.15	0.17	0.17	0.15	0.15	0.12	0.10	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3999.60	0.04	0.05	0.12	0.19	0.23	0.29	0.29	0.31	0.27	0.21	0.17	0.13	0.10	0.07	0.05	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4666.20	0.04	0.05	0.17	0.23	0.37	0.37	0.45	0.41	0.35	0.28	0.22	0.17	0.13	0.09	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
5332.80	0.04	0.05	0.22	0.28	0.43	0.49	0.53	0.47	0.40	0.33	0.24	0.20	0.15	0.11	0.07	0.05	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
5999.40	0.04	0.07	0.24	0.40	0.46	0.61	0.56	0.51	0.41	0.35	0.25	0.21	0.15	0.11	0.08	0.05	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
6666.00	0.04	0.09	0.27	0.49	0.56	0.65	0.61	0.53	0.43	0.36	0.26	0.22	0.16	0.11	0.07	0.05	0.04	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
7332.60	0.04	0.11	0.29	0.51	0.67	0.69	0.63	0.54	0.44	0.37	0.28	0.22	0.15	0.10	0.07	0.05	0.04	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
7999.20	0.04	0.14	0.33	0.53	0.71	0.73	0.64	0.55	0.45	0.37	0.28	0.21	0.15	0.11	0.07	0.06	0.04	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
8665.80	0.04	0.19	0.41	0.60	0.74	0.75	0.65	0.56	0.47	0.38	0.29	0.21	0.15	0.11	0.07	0.06	0.04	0.02	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
9332.40	0.04	0.23	0.49	0.69	0.79	0.76	0.66	0.57	0.48	0.39	0.30	0.22	0.17	0.12	0.08	0.07	0.05	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00
9999.00	0.04	0.25	0.55	0.74	0.82	0.75	0.67	0.58	0.49	0.39	0.31	0.24	0.18	0.14	0.10	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00
10665.60	0.04	0.27	0.56	0.76	0.84	0.76	0.68	0.59	0.51	0.42	0.34	0.27	0.22	0.17	0.13	0.11	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01
11332.20	0.04	0.28	0.56	0.78	0.85	0.77	0.69	0.62	0.54	0.46	0.38	0.31	0.26	0.21	0.16	0.13	0.10	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01
11998.80	0.04	0.29	0.58	0.81	0.85	0.78	0.71	0.65	0.57	0.49	0.42	0.35	0.31	0.24	0.19	0.15	0.12	0.09	0.07	0.05	0.03	0.02	0.01	0.01
12665.40	0.04	0.29	0.63	0.84	0.84	0.79	0.73	0.68	0.60	0.52	0.45	0.40	0.34	0.26	0.21	0.17	0.13	0.10	0.07	0.05	0.03	0.02	0.01	0.01
13332.00	0.04	0.29	0.69	0.87	0.84	0.81	0.77	0.71	0.62	0.54	0.49	0.44	0.37	0.28	0.22	0.18	0.14	0.10	0.07	0.05	0.03	0.02	0.01	0.01
13998.60	0.04	0.30	0.75	0.89	0.85	0.85	0.83	0.73	0.64	0.56	0.53	0.46	0.38	0.29	0.23	0.18	0.14	0.10	0.07	0.05	0.03	0.02	0.01	0.01
14665.20	0.04	0.30	0.80	0.89	0.86	0.88	0.88	0.76	0.66	0.59	0.57	0.48	0.39	0.29	0.24	0.18	0.13	0.09	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.00

**Table S25.** Rotational population as a function of the hexapole voltage (HV) of A 1-chloroethanol in 1 m hexapole.

HV	M=0	M=1	M=2	M=3	M=4	M=5	M=6	M=7	M=8	M=9	M=10	M=11	M=12	M=13	M=14	M=15	M=16	M=17	M=18	M=19	M=20	M=21	M=22	M=23
0.00	0.04	0.04	0.04	0.04	0.03	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
666.60	0.04	0.04	0.03	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
1333.20	0.04	0.04	0.03	0.03	0.03	0.03	0.03	0.03	0.03	0.03	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
1999.80	0.04	0.03	0.03	0.05	0.08	0.15	0.21	0.23	0.22	0.23	0.23	0.21	0.17	0.15	0.12	0.10	0.07	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
2666.40	0.04	0.03	0.07	0.16	0.30	0.44	0.43	0.45	0.46	0.40	0.33	0.27	0.21	0.16	0.12	0.09	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00
3333.00	0.04	0.03	0.15	0.30	0.55	0.54	0.64	0.59	0.55	0.43	0.35	0.28	0.22	0.16	0.11	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00
3999.60	0.04	0.05	0.21	0.51	0.60	0.73	0.71	0.65	0.53	0.43	0.34	0.27	0.20	0.15	0.11	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00
4666.20	0.04	0.06	0.30	0.65	0.74	0.79	0.74	0.62	0.51	0.41	0.32	0.25	0.19	0.14	0.10	0.07	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00
5332.80	0.04	0.09	0.43	0.67	0.84	0.84	0.71	0.59	0.49	0.41	0.31	0.24	0.19	0.14	0.10	0.07	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00
5999.40	0.04	0.14	0.60	0.77	0.90	0.83	0.68	0.58	0.50	0.43	0.31	0.24	0.20	0.16	0.11	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00
6666.00	0.04	0.19	0.72	0.87	0.93	0.83	0.68	0.61	0.53	0.46	0.34	0.28	0.23	0.19	0.13	0.10	0.08	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
7332.60	0.04	0.23	0.74	0.92	0.92	0.83	0.73	0.65	0.56	0.48	0.36	0.32	0.27	0.22	0.15	0.12	0.09	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
7999.20	0.04	0.25	0.74	0.97	0.93	0.85	0.78	0.68	0.58	0.50	0.40	0.36	0.30	0.23	0.16	0.13	0.09	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
8665.80	0.04	0.28	0.79	1.05	0.94	0.88	0.82	0.70	0.61	0.54	0.43	0.38	0.31	0.23	0.17	0.13	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
9332.40	0.04	0.33	0.85	1.14	0.98	0.93	0.84	0.72	0.64	0.56	0.46	0.39	0.31	0.23	0.17	0.12	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
9999.00	0.04	0.38	0.90	1.17	0.99	0.95	0.86	0.75	0.69	0.58	0.48	0.40	0.31	0.23	0.16	0.12	0.07	0.05	0.04	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00
10665.60	0.05	0.44	0.95	1.17	1.00	0.97	0.86	0.77	0.72	0.59	0.49	0.40	0.31	0.22	0.16	0.12	0.07	0.05	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00
11332.20	0.05	0.52	0.99	1.14	1.03	1.00	0.90	0.80	0.74	0.60	0.50	0.40	0.31	0.22	0.16	0.11	0.07	0.05	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00
11998.80	0.06	0.60	1.09	1.14	1.05	1.01	0.91	0.83	0.75	0.61	0.51	0.39	0.30	0.22	0.16	0.11	0.07	0.05	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00
12665.40	0.06	0.69	1.14	1.12	1.08	1.02	0.93	0.85	0.75	0.61	0.50	0.38	0.30	0.21	0.15	0.11	0.07	0.05	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00
13332.00	0.06	0.75	1.18	1.11	1.11	1.01	0.97	0.86	0.75	0.61	0.50	0.38	0.28	0.20	0.15	0.10	0.07	0.05	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00
13998.60	0.07	0.78	1.19	1.09	1.13	1.03	0.99	0.88	0.74	0.60	0.49	0.37	0.28	0.20	0.15	0.10	0.07	0.05	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00
14665.20	0.07	0.80	1.19	1.10	1.13	1.05	0.98	0.87	0.74	0.59	0.49	0.36	0.28	0.20	0.14	0.10	0.07	0.05	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00

**Table S26.** Rotational population as a function of the hexapole voltage (HV) of S 1-chloroethanol in 1 m hexapole.

HV	M=0	M=1	M=2	M=3	M=4	M=5	M=6	M=7	M=8	M=9	M=10	M=11	M=12	M=13	M=14	M=15	M=16	M=17	M=18	M=19	M=20	M=21	M=22	M=23
0.00	0.04	0.04	0.04	0.04	0.03	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
666.60	0.04	0.04	0.03	0.03	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
1333.20	0.04	0.04	0.04	0.11	0.12	0.14	0.14	0.13	0.12	0.10	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
1999.80	0.04	0.04	0.16	0.21	0.32	0.34	0.38	0.33	0.30	0.24	0.18	0.14	0.11	0.08	0.05	0.04	0.02	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
2666.40	0.04	0.07	0.21	0.38	0.45	0.46	0.44	0.38	0.31	0.25	0.19	0.15	0.11	0.07	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
3333.00	0.04	0.14	0.31	0.44	0.50	0.50	0.43	0.36	0.30	0.24	0.19	0.14	0.10	0.07	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
3999.60	0.04	0.20	0.42	0.54	0.55	0.50	0.41	0.36	0.33	0.28	0.23	0.18	0.14	0.11	0.09	0.07	0.05	0.04	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.00
4666.20	0.04	0.22	0.44	0.55	0.56	0.48	0.44	0.45	0.43	0.38	0.32	0.27	0.23	0.19	0.15	0.12	0.09	0.07	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01
5332.80	0.04	0.23	0.55	0.60	0.57	0.52	0.57	0.58	0.51	0.43	0.39	0.34	0.28	0.21	0.17	0.14	0.10	0.07	0.05	0.04	0.02	0.01	0.01	0.00
5999.40	0.04	0.24	0.60	0.63	0.57	0.62	0.71	0.63	0.56	0.49	0.45	0.35	0.28	0.22	0.17	0.13	0.09	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
6666.00	0.04	0.30	0.61	0.62	0.60	0.79	0.76	0.68	0.60	0.58	0.46	0.35	0.29	0.23	0.16	0.11	0.08	0.05	0.04	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00
7332.60	0.04	0.39	0.64	0.62	0.69	0.89	0.80	0.73	0.65	0.62	0.45	0.37	0.29	0.22	0.15	0.11	0.07	0.05	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00
7999.20	0.04	0.43	0.67	0.62	0.82	0.92	0.84	0.77	0.70	0.61	0.46	0.37	0.28	0.21	0.15	0.11	0.07	0.05	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00
8665.80	0.04	0.44	0.69	0.63	0.92	0.94	0.84	0.81	0.70	0.59	0.45	0.37	0.27	0.21	0.14	0.10	0.07	0.05	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00
9332.40	0.05	0.45	0.68	0.69	0.97	0.96	0.85	0.84	0.69	0.58	0.44	0.36	0.26	0.20	0.14	0.10	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00
9999.00	0.05	0.50	0.67	0.79	0.99	0.97	0.87	0.83	0.70	0.55	0.44	0.36	0.25	0.19	0.14	0.10	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00
10665.60	0.07	0.55	0.68	0.90	1.02	0.97	0.89	0.82	0.69	0.54	0.43	0.36	0.25	0.19	0.14	0.10	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00
11332.20	0.10	0.58	0.69	0.96	1.06	0.97	0.90	0.81	0.68	0.52	0.43	0.37	0.24	0.18	0.14	0.10	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00
11998.80	0.12	0.57	0.70	1.00	1.11	1.00	0.90	0.80	0.67	0.52	0.43	0.36	0.24	0.18	0.13	0.10	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00
12665.40	0.13	0.56	0.73	1.03	1.12	1.02	0.90	0.80	0.67	0.52	0.43	0.36	0.24	0.18	0.13	0.09	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00
13332.00	0.14	0.58	0.78	1.09	1.13	1.03	0.91	0.80	0.67	0.52	0.43	0.35	0.23	0.17	0.13	0.09	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00
13998.60	0.15	0.62	0.84	1.15	1.12	1.04	0.91	0.79	0.67	0.52	0.42	0.35	0.23	0.18	0.13	0.09	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00
14665.20	0.16	0.67	0.91	1.20	1.12	1.02	0.91	0.77	0.66	0.51	0.42	0.34	0.23	0.17	0.13	0.09	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00



**Table S27.** Rotational population as a function of the hexapole voltage (HV) of A 1-chloroethanol in 2 m hexapole.

HV	M=0	M=1	M=2	M=3	M=4	M=5	M=6	M=7	M=8	M=9	M=10	M=11	M=12	M=13	M=14	M=15	M=16	M=17	M=18	M=19	M=20	M=21	M=22	M=23
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
666.60	0.00	0.00	0.00	0.01	0.03	0.08	0.12	0.14	0.13	0.14	0.14	0.13	0.11	0.09	0.08	0.06	0.05	0.03	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00
1333.20	0.00	0.01	0.11	0.30	0.35	0.43	0.42	0.38	0.30	0.25	0.20	0.15	0.11	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
1999.80	0.00	0.07	0.35	0.44	0.48	0.45	0.37	0.31	0.27	0.21	0.18	0.13	0.11	0.09	0.06	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00
2666.40	0.00	0.13	0.44	0.51	0.48	0.45	0.40	0.35	0.31	0.27	0.24	0.20	0.16	0.13	0.10	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00
3333.00	0.00	0.21	0.52	0.54	0.53	0.51	0.46	0.41	0.40	0.35	0.27	0.22	0.18	0.14	0.10	0.07	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00
3999.60	0.01	0.35	0.57	0.57	0.60	0.56	0.53	0.51	0.46	0.37	0.29	0.23	0.18	0.13	0.09	0.07	0.05	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00
4666.20	0.01	0.48	0.58	0.59	0.64	0.58	0.61	0.55	0.49	0.39	0.31	0.25	0.19	0.15	0.11	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00
5332.80	0.02	0.47	0.59	0.65	0.63	0.68	0.65	0.60	0.50	0.41	0.33	0.26	0.21	0.16	0.12	0.09	0.07	0.05	0.04	0.02	0.02	0.01	0.01	0.00
5999.40	0.02	0.48	0.62	0.71	0.70	0.75	0.69	0.60	0.51	0.42	0.34	0.27	0.22	0.17	0.13	0.10	0.07	0.05	0.04	0.02	0.02	0.01	0.01	0.00
6666.00	0.02	0.51	0.63	0.72	0.79	0.80	0.71	0.61	0.53	0.44	0.35	0.28	0.22	0.17	0.13	0.10	0.07	0.05	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00
7332.60	0.03	0.55	0.66	0.73	0.86	0.86	0.72	0.62	0.55	0.47	0.36	0.29	0.23	0.18	0.13	0.10	0.07	0.05	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00
7999.20	0.03	0.59	0.71	0.79	0.90	0.88	0.73	0.64	0.57	0.49	0.37	0.31	0.24	0.19	0.13	0.10	0.07	0.05	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.00
8665.80	0.03	0.60	0.78	0.87	0.95	0.89	0.75	0.68	0.60	0.50	0.39	0.32	0.25	0.20	0.14	0.10	0.07	0.05	0.04	0.02	0.02	0.01	0.01	0.00
9332.40	0.04	0.58	0.80	0.94	0.98	0.88	0.78	0.70	0.62	0.52	0.40	0.34	0.26	0.20	0.14	0.10	0.07	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
9999.00	0.05	0.57	0.80	0.98	0.99	0.88	0.81	0.72	0.64	0.52	0.42	0.35	0.27	0.20	0.15	0.11	0.08	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
10665.60	0.05	0.56	0.80	1.01	1.00	0.88	0.84	0.73	0.65	0.52	0.43	0.35	0.26	0.20	0.14	0.10	0.07	0.05	0.04	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00
11332.20	0.06	0.57	0.82	1.07	1.00	0.92	0.85	0.74	0.65	0.54	0.44	0.34	0.26	0.20	0.14	0.10	0.07	0.05	0.04	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00
11998.80	0.06	0.58	0.86	1.09	0.99	0.96	0.86	0.75	0.65	0.55	0.44	0.34	0.26	0.20	0.14	0.10	0.07	0.05	0.04	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00
12665.40	0.07	0.58	0.90	1.11	0.99	0.97	0.87	0.75	0.67	0.55	0.44	0.34	0.26	0.20	0.14	0.10	0.07	0.05	0.04	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00
13332.00	0.08	0.58	0.95	1.11	1.00	0.98	0.88	0.75	0.67	0.56	0.43	0.33	0.26	0.19	0.14	0.10	0.07	0.05	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00
13998.60	0.09	0.59	1.00	1.10	1.01	0.99	0.88	0.76	0.68	0.55	0.43	0.33	0.26	0.19	0.14	0.10	0.07	0.05	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00
14665.20	0.10	0.61	1.03	1.09	1.04	0.99	0.89	0.78	0.69	0.55	0.43	0.34	0.26	0.19	0.14	0.10	0.07	0.05	0.04	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00

**Table S28.** Rotational population as a function of the hexapole voltage (HV) of S 1-chloroethanol in 2 m hexapole.

HV	M=0	M=1	M=2	M=3	M=4	M=5	M=6	M=7	M=8	M=9	M=10	M=11	M=12	M=13	M=14	M=15	M=16	M=17	M=18	M=19	M=20	M=21	M=22	M=23
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
666.60	0.00	0.00	0.08	0.11	0.19	0.19	0.22	0.20	0.18	0.15	0.11	0.08	0.06	0.05	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
1333.20	0.00	0.11	0.25	0.30	0.29	0.27	0.22	0.18	0.16	0.13	0.11	0.09	0.07	0.06	0.05	0.04	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00
1999.80	0.00	0.13	0.35	0.34	0.33	0.34	0.39	0.36	0.31	0.28	0.27	0.22	0.17	0.13	0.10	0.08	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00
2666.40	0.00	0.26	0.39	0.36	0.47	0.52	0.48	0.44	0.44	0.37	0.28	0.22	0.17	0.12	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
3333.00	0.00	0.30	0.39	0.47	0.57	0.57	0.55	0.51	0.43	0.34	0.26	0.20	0.15	0.11	0.07	0.05	0.04	0.02	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
3999.60	0.04	0.34	0.42	0.59	0.66	0.64	0.59	0.49	0.41	0.32	0.26	0.21	0.14	0.10	0.07	0.05	0.04	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
4666.20	0.06	0.38	0.52	0.68	0.70	0.70	0.58	0.49	0.44	0.34	0.27	0.21	0.15	0.11	0.07	0.05	0.04	0.02	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
5332.80	0.07	0.43	0.61	0.73	0.76	0.69	0.60	0.53	0.46	0.38	0.30	0.23	0.17	0.13	0.09	0.07	0.05	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00
5999.40	0.08	0.43	0.66	0.72	0.81	0.67	0.63	0.57	0.51	0.42	0.34	0.26	0.21	0.16	0.12	0.09	0.07	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
6666.00	0.09	0.42	0.73	0.79	0.80	0.69	0.66	0.64	0.55	0.44	0.36	0.29	0.25	0.19	0.14	0.10	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
7332.60	0.10	0.43	0.79	0.84	0.77	0.72	0.75	0.68	0.56	0.43	0.38	0.32	0.26	0.19	0.14	0.10	0.08	0.05	0.04	0.02	0.02	0.01	0.01	0.00
7999.20	0.11	0.48	0.81	0.87	0.78	0.77	0.81	0.68	0.55	0.44	0.40	0.32	0.25	0.18	0.14	0.10	0.07	0.05	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00
8665.80	0.13	0.51	0.81	0.87	0.79	0.84	0.81	0.66	0.54	0.47	0.40	0.31	0.24	0.18	0.13	0.09	0.07	0.05	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00
9332.40	0.15	0.55	0.83	0.86	0.81	0.90	0.81	0.64	0.55	0.50	0.41	0.30	0.24	0.17	0.12	0.09	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00
9999.00	0.18	0.60	0.87	0.85	0.85	0.91	0.79	0.63	0.58	0.50	0.40	0.30	0.23	0.17	0.12	0.09	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00
10665.60	0.21	0.63	0.91	0.85	0.90	0.89	0.76	0.63	0.59	0.50	0.39	0.29	0.22	0.16	0.12	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00
11332.20	0.24	0.66	0.97	0.87	0.96	0.91	0.75	0.66	0.60	0.50	0.38	0.28	0.22	0.17	0.12	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00
11998.80	0.27	0.69	0.98	0.88	0.98	0.91	0.74	0.68	0.61	0.50	0.38	0.29	0.22	0.17	0.13	0.09	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00
12665.40	0.28	0.72	0.97	0.90	0.99	0.88	0.74	0.70	0.60	0.49	0.38	0.29	0.23	0.18	0.13	0.09	0.07	0.05	0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.00
13332.00	0.31	0.75	0.96	0.93	0.99	0.85	0.75	0.70	0.60	0.49	0.38	0.30	0.24	0.19	0.13	0.10	0.07	0.05	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
13998.60	0.34	0.78	0.94	0.97	1.00	0.84	0.77	0.70	0.61	0.49	0.39	0.32	0.25	0.19	0.14	0.11	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00
14665.20	0.37	0.80	0.94	1.01	1.00	0.84	0.78	0.72	0.60	0.49	0.40	0.33	0.26	0.20	0.15	0.11	0.08	0.06	0.04	0.03	0.02	0.01	0.01	0.00

**Table S29.** Conformational population as a function of the hexapole voltage (HV) of 2-chloroethanol in 0.5 m hexapole for  $\Theta_v=100$  K, 200 K and 300 K.

HV	$\Theta_v=300$ K					$\Theta_v=200$ K					$\Theta_v=100$ K				
	Aa	As	Sa	Ss+	Ss-	Aa	As	Sa	Ss+	Ss-	Aa	As	Sa	Ss+	Ss-
0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
6.67E+02	2.08E-04	4.58E-08	3.76E-04	0.00E+00	2.56E-05	5.26E-05	1.16E-08	5.31E-05	0.00E+00	2.53E-06	6.56E-07	1.47E-10	1.15E-07	0.00E+00	1.89E-09
1.33E+03	1.28E-03	2.52E-04	1.20E-03	0.00E+00	2.78E-04	3.24E-04	6.41E-05	1.70E-04	0.00E+00	2.75E-05	4.04E-06	8.09E-07	3.68E-07	0.00E+00	2.05E-08
2.00E+03	2.49E-03	7.59E-04	2.15E-03	5.88E-06	5.17E-04	6.30E-04	1.93E-04	3.04E-04	6.47E-06	5.11E-05	7.86E-06	2.43E-06	6.59E-07	6.64E-06	3.81E-08
2.67E+03	3.80E-03	1.37E-03	7.24E-03	1.57E-04	7.41E-04	9.61E-04	3.47E-04	1.02E-03	1.72E-04	7.33E-05	1.20E-05	4.38E-06	2.22E-06	1.77E-04	5.47E-08
3.33E+03	8.41E-03	1.94E-03	1.90E-02	3.83E-04	9.99E-04	2.13E-03	4.93E-04	2.68E-03	4.21E-04	9.88E-05	2.65E-05	6.22E-06	5.81E-06	4.33E-04	7.37E-08
4.00E+03	1.98E-02	2.51E-03	3.07E-02	5.95E-04	2.29E-03	5.02E-03	6.37E-04	4.34E-03	6.55E-04	2.26E-04	6.26E-05	8.03E-06	9.41E-06	6.72E-04	1.69E-07
4.67E+03	3.17E-02	3.04E-03	4.32E-02	7.85E-04	6.33E-03	8.02E-03	7.73E-04	6.10E-03	8.64E-04	6.26E-04	1.00E-04	9.75E-06	1.32E-05	8.88E-04	4.67E-07
5.33E+03	4.48E-02	3.99E-03	5.50E-02	9.68E-04	1.13E-02	1.13E-02	1.01E-03	7.76E-03	1.07E-03	1.11E-03	1.41E-04	1.28E-05	1.68E-05	1.09E-03	8.31E-07
6.00E+03	6.16E-02	7.14E-03	6.63E-02	1.17E-03	1.58E-02	1.56E-02	1.81E-03	9.36E-03	1.29E-03	1.56E-03	1.94E-04	2.29E-05	2.03E-05	1.33E-03	1.16E-06
6.67E+03	7.53E-02	1.32E-02	7.56E-02	1.62E-03	2.04E-02	1.91E-02	3.36E-03	1.07E-02	1.78E-03	2.02E-03	2.38E-04	4.24E-05	2.32E-05	1.83E-03	1.50E-06
7.33E+03	8.69E-02	2.05E-02	8.40E-02	2.44E-03	2.52E-02	2.20E-02	5.22E-03	1.19E-02	2.68E-03	2.49E-03	2.74E-04	6.59E-05	2.57E-05	2.76E-03	1.86E-06
8.00E+03	1.00E-01	2.76E-02	8.99E-02	3.39E-03	3.01E-02	2.54E-02	7.02E-03	1.27E-02	3.73E-03	2.98E-03	3.17E-04	8.85E-05	2.75E-05	3.83E-03	2.22E-06
8.67E+03	1.16E-01	3.41E-02	9.40E-02	4.23E-03	3.51E-02	2.94E-02	8.66E-03	1.33E-02	4.66E-03	3.47E-03	3.66E-04	1.09E-04	2.88E-05	4.78E-03	2.59E-06
9.33E+03	1.32E-01	4.10E-02	9.81E-02	4.99E-03	3.99E-02	3.35E-02	1.04E-02	1.39E-02	5.49E-03	3.95E-03	4.18E-04	1.31E-04	3.01E-05	5.64E-03	2.95E-06
1.00E+04	1.45E-01	4.94E-02	1.01E-01	6.26E-03	4.43E-02	3.67E-02	1.25E-02	1.43E-02	6.89E-03	4.38E-03	4.57E-04	1.58E-04	3.10E-05	7.08E-03	3.27E-06
1.07E+04	1.54E-01	5.91E-02	1.06E-01	9.18E-03	4.81E-02	3.89E-02	1.50E-02	1.49E-02	1.01E-02	4.76E-03	4.85E-04	1.89E-04	3.23E-05	1.04E-02	3.55E-06
1.13E+04	1.60E-01	6.81E-02	1.10E-01	1.45E-02	5.10E-02	4.06E-02	1.73E-02	1.55E-02	1.59E-02	5.04E-03	5.06E-04	2.18E-04	3.36E-05	1.63E-02	3.76E-06
1.20E+04	1.68E-01	7.57E-02	1.14E-01	2.39E-02	5.30E-02	4.24E-02	1.92E-02	1.60E-02	2.63E-02	5.25E-03	5.29E-04	2.43E-04	3.48E-05	2.70E-02	3.91E-06
1.27E+04	1.76E-01	8.27E-02	1.16E-01	3.91E-02	5.43E-02	4.45E-02	2.10E-02	1.64E-02	4.30E-02	5.37E-03	5.56E-04	2.65E-04	3.56E-05	4.42E-02	4.00E-06
1.33E+04	1.86E-01	9.01E-02	1.20E-01	6.28E-02	5.54E-02	4.71E-02	2.29E-02	1.69E-02	6.91E-02	5.48E-03	5.87E-04	2.89E-04	3.67E-05	7.10E-02	4.09E-06
1.40E+04	1.96E-01	9.86E-02	1.24E-01	9.89E-02	5.67E-02	4.95E-02	2.51E-02	1.75E-02	1.09E-01	5.61E-03	6.17E-04	3.16E-04	3.79E-05	1.12E-01	4.18E-06
1.47E+04	2.03E-01	1.08E-01	1.28E-01	1.49E-01	5.81E-02	5.14E-02	2.74E-02	1.80E-02	1.64E-01	5.75E-03	6.41E-04	3.46E-04	3.91E-05	1.68E-01	4.29E-06

**Table S30.** Conformational population as a function of the hexapole voltage (HV) of 2-chloroethanol in 1 m hexapole for  $\Theta_V=100$  K, 200 K and 300 K.

	$\Theta_V=300$ K						$\Theta_V=200$ K						$\Theta_V=100$ K					
HV	Aa	As	Sa	Ss+	Ss-	Aa	As	Sa	Ss+	Ss-	Aa	As	Sa	Ss+	Ss-			
0	2.06E-03	1.86E-03	5.19E-04	5.94E-03	4.48E-04	5.21E-04	4.73E-04	7.33E-05	6.54E-03	4.43E-05	9.59E-10	9.02E-10	7.10E-13	6.71E-03	1.74E-14			
6.67E+02	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	3.83E-03	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	4.21E-03	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	4.33E-03	0.00E+00			
1.33E+03	5.44E-03	-1.96E-04	1.52E-02	1.77E-03	3.72E-04	1.38E-03	-4.97E-05	2.15E-03	1.95E-03	3.68E-05	2.53E-09	-9.47E-11	2.08E-11	2.00E-03	1.45E-14			
2.00E+03	3.02E-02	5.21E-04	3.99E-02	8.02E-04	7.30E-03	7.63E-03	1.32E-04	5.63E-03	8.83E-04	7.22E-04	1.40E-08	2.52E-10	5.46E-11	9.07E-04	2.84E-13			
2.67E+03	6.04E-02	1.00E-02	5.93E-02	4.08E-04	1.66E-02	1.53E-02	2.54E-03	8.37E-03	4.49E-04	1.64E-03	2.81E-08	4.84E-09	8.11E-11	4.62E-04	6.44E-13			
3.33E+03	8.94E-02	2.41E-02	6.84E-02	0.00E+00	2.60E-02	2.26E-02	6.13E-03	9.67E-03	0.00E+00	2.57E-03	4.16E-08	1.17E-08	9.36E-11	0.00E+00	1.01E-12			
4.00E+03	1.15E-01	4.13E-02	7.50E-02	2.90E-04	3.45E-02	2.91E-02	1.05E-02	1.06E-02	3.20E-04	3.41E-03	5.35E-08	2.00E-08	1.03E-10	3.28E-04	1.34E-12			
4.67E+03	1.28E-01	5.72E-02	8.22E-02	8.49E-03	3.83E-02	3.24E-02	1.45E-02	1.16E-02	9.34E-03	3.79E-03	5.96E-08	2.77E-08	1.12E-10	9.60E-03	1.49E-12			
5.33E+03	1.48E-01	7.21E-02	8.94E-02	5.07E-02	3.98E-02	3.75E-02	1.83E-02	1.26E-02	5.58E-02	3.94E-03	6.90E-08	3.49E-08	1.22E-10	5.74E-02	1.55E-12			
6.00E+03	1.60E-01	9.19E-02	9.61E-02	1.71E-01	4.15E-02	4.04E-02	2.33E-02	1.36E-02	1.88E-01	4.11E-03	7.44E-08	4.45E-08	1.31E-10	1.93E-01	1.62E-12			
6.67E+03	1.69E-01	1.12E-01	1.01E-01	4.14E-01	4.40E-02	4.27E-02	2.84E-02	1.42E-02	4.56E-01	4.35E-03	7.87E-08	5.41E-08	1.38E-10	4.68E-01	1.71E-12			
7.33E+03	1.80E-01	1.26E-01	1.09E-01	7.24E-01	4.70E-02	4.54E-02	3.19E-02	1.53E-02	7.97E-01	4.65E-03	8.36E-08	6.09E-08	1.48E-10	8.19E-01	1.83E-12			
8.00E+03	1.86E-01	1.36E-01	1.15E-01	9.41E-01	5.04E-02	4.71E-02	3.46E-02	1.62E-02	1.04E+00	4.98E-03	8.67E-08	6.60E-08	1.57E-10	1.06E+00	1.96E-12			
8.67E+03	1.90E-01	1.51E-01	1.19E-01	1.07E+00	5.35E-02	4.81E-02	3.83E-02	1.68E-02	1.18E+00	5.29E-03	8.85E-08	7.30E-08	1.63E-10	1.21E+00	2.08E-12			
9.33E+03	1.98E-01	1.69E-01	1.23E-01	1.16E+00	5.64E-02	5.02E-02	4.29E-02	1.74E-02	1.28E+00	5.57E-03	9.24E-08	8.19E-08	1.68E-10	1.32E+00	2.19E-12			
1.00E+04	2.09E-01	1.85E-01	1.27E-01	1.24E+00	5.84E-02	5.29E-02	4.70E-02	1.79E-02	1.37E+00	5.78E-03	9.74E-08	8.97E-08	1.74E-10	1.40E+00	2.27E-12			
1.07E+04	2.16E-01	1.99E-01	1.30E-01	1.32E+00	6.07E-02	5.47E-02	5.04E-02	1.84E-02	1.45E+00	6.01E-03	1.01E-07	9.62E-08	1.78E-10	1.49E+00	2.36E-12			
1.13E+04	2.22E-01	2.11E-01	1.34E-01	1.40E+00	6.29E-02	5.62E-02	5.37E-02	1.90E-02	1.55E+00	6.22E-03	1.03E-07	1.02E-07	1.84E-10	1.59E+00	2.45E-12			
1.20E+04	2.30E-01	2.23E-01	1.38E-01	1.49E+00	6.53E-02	5.83E-02	5.68E-02	1.95E-02	1.63E+00	6.46E-03	1.07E-07	1.08E-07	1.89E-10	1.68E+00	2.54E-12			
1.27E+04	2.40E-01	2.35E-01	1.41E-01	1.58E+00	6.75E-02	6.06E-02	5.97E-02	1.99E-02	1.73E+00	6.67E-03	1.12E-07	1.14E-07	1.93E-10	1.78E+00	2.62E-12			
1.33E+04	2.50E-01	2.45E-01	1.43E-01	1.67E+00	6.94E-02	6.32E-02	6.24E-02	2.02E-02	1.84E+00	6.86E-03	1.16E-07	1.19E-07	1.96E-10	1.89E+00	2.70E-12			
1.40E+04	2.63E-01	2.55E-01	1.44E-01	1.79E+00	7.12E-02	6.66E-02	6.47E-02	2.03E-02	1.97E+00	7.04E-03	1.23E-07	1.23E-07	1.96E-10	2.02E+00	2.77E-12			
1.47E+04	2.75E-01	2.61E-01	1.43E-01	1.91E+00	7.25E-02	6.96E-02	6.63E-02	2.02E-02	2.10E+00	7.17E-03	1.28E-07	1.26E-07	1.95E-10	2.16E+00	2.82E-12			

**Table S31.** Conformational population as a function of the hexapole voltage (HV) of 2-chloroethanol in 2 m hexapole for  $\Theta_V=100$  K, 200 K and 300 K.

HV	$\Theta_V=300$ K						$\Theta_V=200$ K						$\Theta_V=100$ K					
	Aa	As	Sa	Ss+	Ss-		Aa	As	Sa	Ss+	Ss-		Aa	As	Sa	Ss+	Ss-	
0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00		0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	
6.67E+02	8.05E-02	1.02E-03	2.54E-02	7.67E-05	4.74E-03		2.04E-02	2.59E-04	3.59E-03	8.44E-05	4.69E-04		3.75E-08	4.94E-10	3.48E-11	8.67E-05	1.84E-13	
1.33E+03	1.14E-01	2.77E-02	4.43E-02	5.90E-04	2.14E-02		2.89E-02	7.03E-03	6.25E-03	6.49E-04	2.11E-03		5.31E-08	1.34E-08	6.05E-11	6.67E-04	8.32E-13	
2.00E+03	1.86E-01	5.90E-02	5.51E-02	1.03E-01	2.42E-02		4.70E-02	1.50E-02	7.79E-03	1.14E-01	2.39E-03		8.66E-08	2.86E-08	7.54E-11	1.17E-01	9.40E-13	
2.67E+03	2.24E-01	8.53E-02	6.65E-02	5.65E-01	2.85E-02		5.66E-02	2.17E-02	9.40E-03	6.22E-01	2.82E-03		1.04E-07	4.13E-08	9.10E-11	6.39E-01	1.11E-12	
3.33E+03	2.37E-01	1.14E-01	7.63E-02	7.21E-01	3.30E-02		6.00E-02	2.90E-02	1.08E-02	7.94E-01	3.27E-03		1.10E-07	5.52E-08	1.04E-10	8.16E-01	1.29E-12	
4.00E+03	2.54E-01	1.36E-01	8.59E-02	8.54E-01	3.69E-02		6.43E-02	3.44E-02	1.21E-02	9.40E-01	3.65E-03		1.18E-07	6.57E-08	1.17E-10	9.66E-01	1.44E-12	
4.67E+03	2.73E-01	1.51E-01	9.06E-02	1.01E+00	4.14E-02		6.92E-02	3.83E-02	1.28E-02	1.11E+00	4.10E-03		1.27E-07	7.29E-08	1.24E-10	1.14E+00	1.61E-12	
5.33E+03	2.99E-01	1.59E-01	9.62E-02	1.21E+00	4.57E-02		7.56E-02	4.04E-02	1.36E-02	1.33E+00	4.52E-03		1.39E-07	7.71E-08	1.32E-10	1.37E+00	1.78E-12	
6.00E+03	3.22E-01	1.71E-01	1.02E-01	1.43E+00	4.90E-02		8.16E-02	4.36E-02	1.44E-02	1.58E+00	4.85E-03		1.50E-07	8.30E-08	1.40E-10	1.62E+00	1.91E-12	
6.67E+03	3.44E-01	1.80E-01	1.07E-01	1.64E+00	5.09E-02		8.70E-02	4.58E-02	1.51E-02	1.80E+00	5.04E-03		1.60E-07	8.72E-08	1.47E-10	1.85E+00	1.98E-12	
7.33E+03	3.58E-01	1.89E-01	1.13E-01	1.84E+00	5.28E-02		9.05E-02	4.79E-02	1.59E-02	2.03E+00	5.22E-03		1.67E-07	9.14E-08	1.54E-10	2.08E+00	2.05E-12	
8.00E+03	3.68E-01	2.02E-01	1.18E-01	2.09E+00	5.47E-02		9.30E-02	5.14E-02	1.67E-02	2.30E+00	5.41E-03		1.71E-07	9.80E-08	1.62E-10	2.37E+00	2.13E-12	
8.67E+03	3.71E-01	2.16E-01	1.22E-01	2.37E+00	5.65E-02		9.38E-02	5.50E-02	1.72E-02	2.61E+00	5.59E-03		1.73E-07	1.05E-07	1.66E-10	2.68E+00	2.20E-12	
9.33E+03	3.77E-01	2.26E-01	1.25E-01	2.69E+00	5.86E-02		9.53E-02	5.75E-02	1.77E-02	2.96E+00	5.80E-03		1.75E-07	1.10E-07	1.71E-10	3.04E+00	2.28E-12	
1.00E+04	3.82E-01	2.33E-01	1.29E-01	3.00E+00	6.05E-02		9.66E-02	5.91E-02	1.82E-02	3.30E+00	5.98E-03		1.78E-07	1.13E-07	1.76E-10	3.39E+00	2.35E-12	
1.07E+04	3.85E-01	2.39E-01	1.30E-01	3.27E+00	6.24E-02		9.74E-02	6.07E-02	1.84E-02	3.60E+00	6.18E-03		1.79E-07	1.16E-07	1.78E-10	3.70E+00	2.43E-12	
1.13E+04	3.96E-01	2.48E-01	1.33E-01	3.51E+00	6.44E-02		1.00E-01	6.30E-02	1.88E-02	3.86E+00	6.37E-03		1.84E-07	1.20E-07	1.82E-10	3.96E+00	2.51E-12	
1.20E+04	4.02E-01	2.59E-01	1.36E-01	3.71E+00	6.64E-02		1.02E-01	6.57E-02	1.92E-02	4.08E+00	6.57E-03		1.87E-07	1.25E-07	1.86E-10	4.19E+00	2.58E-12	
1.27E+04	4.06E-01	2.70E-01	1.37E-01	3.89E+00	6.80E-02		1.03E-01	6.85E-02	1.93E-02	4.28E+00	6.72E-03		1.89E-07	1.31E-07	1.87E-10	4.39E+00	2.64E-12	
1.33E+04	4.11E-01	2.77E-01	1.38E-01	4.06E+00	6.89E-02		1.04E-01	7.04E-02	1.94E-02	4.47E+00	6.81E-03		1.91E-07	1.34E-07	1.88E-10	4.59E+00	2.68E-12	
1.40E+04	4.18E-01	2.83E-01	1.38E-01	4.23E+00	6.95E-02		1.06E-01	7.18E-02	1.95E-02	4.65E+00	6.88E-03		1.94E-07	1.37E-07	1.89E-10	4.78E+00	2.70E-12	
1.47E+04	4.25E-01	2.87E-01	1.39E-01	4.37E+00	7.04E-02		1.08E-01	7.29E-02	1.97E-02	4.81E+00	6.97E-03		1.98E-07	1.39E-07	1.90E-10	4.94E+00	2.74E-12	

**Table S32.** Conformational population as a function of the hexapole voltage (HV) of 1-chloroethanol in 0.5 m hexapole for  $\Theta_V=100$  K, 200 K and 300 K.

HV	$\Theta_V=300$ K		$\Theta_V=200$ K		$\Theta_V=100$ K	
	A	S	A	S	A	S
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
666.60	0.01	0.01	0.01	0.00	0.01	0.00
1333.20	0.04	0.02	0.05	0.01	0.06	0.00
1999.80	0.07	0.04	0.08	0.02	0.10	0.01
2666.40	0.11	0.09	0.12	0.06	0.14	0.02
3333.00	0.20	0.34	0.22	0.23	0.26	0.07
3999.60	0.78	0.64	0.88	0.44	1.03	0.14
4666.20	1.55	0.90	1.75	0.62	2.05	0.19
5332.80	2.25	1.09	2.54	0.75	2.97	0.23
5999.40	2.90	1.23	3.26	0.85	3.82	0.26
6666.00	3.45	1.34	3.88	0.92	4.55	0.29
7332.60	3.93	1.41	4.43	0.97	5.19	0.30
7999.20	4.36	1.47	4.91	1.01	5.75	0.32
8665.80	4.72	1.56	5.32	1.08	6.23	0.33
9332.40	5.03	1.68	5.67	1.16	6.64	0.36
9999.00	5.31	1.78	5.99	1.23	7.01	0.38
10665.60	5.57	1.90	6.28	1.31	7.35	0.41
11332.20	5.82	2.03	6.56	1.40	7.68	0.44
11998.80	6.04	2.16	6.81	1.49	7.97	0.46
12665.40	6.22	2.27	7.01	1.56	8.21	0.49
13332.00	6.41	2.37	7.23	1.64	8.46	0.51
13998.60	6.61	2.47	7.45	1.70	8.72	0.53
14665.20	6.81	2.55	7.67	1.76	8.98	0.55

**Table S33.** Conformational population as a function of the hexapole voltage (HV) of 1-chloroethanol in 1 m hexapole for  $\Theta_V=100$  K, 200 K and 300 K.

HV	$\Theta_V=300$ K		$\Theta_V=200$ K		$\Theta_V=100$ K	
	A	S	A	S	A	S
0.00	0.05	0.01	0.05	0.01	0.06	0.00
666.60	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
1333.20	0.15	0.27	0.16	0.19	0.19	0.06
1999.80	1.56	0.78	1.76	0.54	2.06	0.17
2666.40	2.75	0.97	3.10	0.67	3.63	0.21
3333.00	3.50	1.05	3.95	0.72	4.62	0.22
3999.60	3.89	1.25	4.39	0.86	5.14	0.27
4666.20	4.14	1.52	4.66	1.05	5.46	0.33
5332.80	4.30	1.78	4.84	1.22	5.67	0.38
5999.40	4.59	1.92	5.17	1.32	6.05	0.41
6666.00	5.02	2.05	5.66	1.41	6.63	0.44
7332.60	5.34	2.19	6.02	1.51	7.04	0.47
7999.20	5.61	2.28	6.32	1.57	7.40	0.49
8665.80	5.87	2.33	6.61	1.60	7.75	0.50
9332.40	6.14	2.35	6.92	1.62	8.10	0.51
9999.00	6.35	2.40	7.15	1.65	8.37	0.51
10665.60	6.49	2.45	7.31	1.68	8.56	0.52
11332.20	6.66	2.48	7.50	1.71	8.78	0.53
11998.80	6.85	2.50	7.72	1.72	9.04	0.54
12665.40	6.98	2.53	7.86	1.74	9.21	0.54
13332.00	7.05	2.57	7.95	1.77	9.30	0.55
13998.60	7.10	2.61	8.00	1.80	9.37	0.56
14665.20	7.11	2.65	8.01	1.82	9.38	0.57

**Table S34.** Conformational population as a function of the hexapole voltage (HV) of 1-chloroethanol in 2 m hexapole for  $\Theta_V=100$  K, 200 K and 300 K.

HV	$\Theta_V=300$ K		$\Theta_V=200$ K		$\Theta_V=100$ K	
	A	S	A	S	A	S
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
666.60	1.00	0.50	1.13	0.34	1.32	0.11
1333.20	2.34	0.71	2.64	0.49	3.09	0.15
1999.80	2.62	1.15	2.95	0.79	3.45	0.25
2666.40	3.15	1.38	3.54	0.95	4.15	0.30
3333.00	3.60	1.47	4.06	1.01	4.75	0.31
3999.60	4.02	1.57	4.53	1.08	5.31	0.34
4666.20	4.40	1.69	4.96	1.16	5.80	0.36
5332.80	4.67	1.85	5.26	1.27	6.16	0.40
5999.40	4.92	1.99	5.55	1.37	6.50	0.43
6666.00	5.13	2.13	5.78	1.46	6.76	0.46
7332.60	5.34	2.21	6.02	1.52	7.04	0.47
7999.20	5.59	2.27	6.30	1.57	7.37	0.49
8665.80	5.86	2.29	6.60	1.58	7.73	0.49
9332.40	6.04	2.33	6.81	1.60	7.97	0.50
9999.00	6.15	2.36	6.93	1.63	8.12	0.51
10665.60	6.20	2.38	6.98	1.64	8.18	0.51
11332.20	6.32	2.45	7.12	1.68	8.33	0.52
11998.80	6.41	2.49	7.22	1.71	8.46	0.53
12665.40	6.48	2.51	7.30	1.73	8.55	0.54
13332.00	6.52	2.54	7.35	1.75	8.61	0.54
13998.60	6.59	2.58	7.43	1.78	8.70	0.55
14665.20	6.67	2.63	7.52	1.81	8.81	0.56