Supplementary Online Material

Air quality modelling using the Met Office Unified Model: model description and initial evaluation

N. H. Savage, P. Agnew, L. S. Davis, C. Ordóñez, R. Thorpe,

C. E. Johnson, F. M. O'Connor and M. Dalvi

Met Office, Fitzroy Road, Exeter, EX1 3PB, United Kingdom

Table S1. Gas phase chemistry in RAQ mechanism

$O(^3P) + O_2 + M$	→	$O_3 + M$
$O(^3P) + NO + M$	→	$NO_2 + M$
$O(^1D) + M$	→	$O(^3P) + M$
$O(^1D) + H_2O$	→	$2\ OH$
$NO + O_3$	→	$NO_2 + O_2$
$NO_2 + O_3$	→	$NO_3 + O_2$
$OH + O_3$	→	$HO_2 + O_2$
$HO_2 + O_3$	→	$OH + 2O_2$
$NO + NO_3$	→	$2\ NO_2$
$NO_2 + O(^3P)$	→	$NO + O_2$
$NO + HO_2$	→	$OH + NO_2$
$NO_2 + NO_3$	→	$NO + NO_2 + O_2$
$NO_2 + NO_3 + M$	→	$N_2O_5 + M$
$NO_2 + OH + M$	→	$HNO_3 + M$
$NO_2 + HO_2 + M$	→	$HO_2NO_2 + M$
$HO_2NO_2 + M$	→	$HO_2 + NO_2 + M$
$HO_2NO_2 + OH$	→	$NO_2 + H_2O + O_2$
$NO_3 + NO_3$	→	$2\ NO_2 + O_2$
$N_2O_5 + M$	→	$NO_2 + NO_3 + M$
$HO_2 + OH$	→	$H_2O + O_2$
$OH + H_2O_2$	→	HO_2
$NO_3 + HO_2$	→	$HNO_3 + O_2$
$OH + H_2$	→	$HO_2 + H_2O$
$NO_3 + HO_2$	→	$OH + NO_2 + O_2$

$OH + HNO_3 \rightarrow NO_3 + H_2O$

$HO_2 + HO_2 + M \rightarrow H_2O_2 + O_2 + M$

$OH + CH_3OOH \rightarrow CH_3O_2 + H_2O$

$OH + CH_3OOH \rightarrow HCHO + OH$

$OH + C_2H_5OOH \rightarrow C_2H_5O_2$

$OH + i\text{-}C_3H_7OOH \rightarrow i\text{-}C_3H_7O_2$

$OH + s\text{-}C_4H_9OOH \rightarrow s\text{-}C_4H_9O_2$

$OH + CH_4 + O_2 \rightarrow CH_3O_2 + H_2O$

$NO + CH_3O_2 \rightarrow HCHO + NO_2 + HO_2$

$CH_3O_2 + CH_3O_2 \rightarrow 2\ HCHO + 2\ HO_2$

$CH_3O_2 + CH_3O_2 \rightarrow HCHO + CH3OH$

$CH3OH + OH \rightarrow HCHO + HO_2$

$CH_3O_2 + HO_2 \rightarrow CH_3OOH$

$OH + HCHO \rightarrow HO_2 + CO$

$NO_3 + HCHO \rightarrow HO_2 + CO + HNO_3$

$OH + CO \rightarrow HO_2 + CO_2$

$OH + C_2H_6 \rightarrow C_2H_5O_2$

$C_2H_5O_2 + NO \rightarrow CH_3CHO + NO_2 + HO_2$

$C_2H_5O_2 + CH_3O_2 \rightarrow CH_3CHO + HCHO + 2\ HO_2$

$CH_3O_2 + CH_3COO_2 \rightarrow 2\ HCHO$

$OH + CH_3CHO \rightarrow CH_3COO_2$

$CH_3COO_2 + NO_2 + M \rightarrow PAN + M$

$PAN + M \rightarrow CH_3COO_2 + NO_2 + M$

$CH_3COO_2 + NO \rightarrow CH_3O_2 + NO_2$

$CH_3O_2 + CH_3COO_2 \rightarrow HCHO + HO_2 + CH_3O_2 + CO_2$

$OH + n\text{-}C_4H_{10} \rightarrow s\text{-}C_4H_9O_2$

$s\text{-}C_4H_9O_2 + NO \rightarrow CH_3COC_2H_5 + NO_2 + HO_2$

$s\text{-}C_4H_9O_2 + CH_3O_2 \rightarrow CH_3COC_2H_5 + 2\ HO_2 + HCHO$

$OH + CH_3COC_2H_5 \rightarrow CH_3COCH(O_2)CH_3$

$C_2H_5O_2 + C_2H_5O_2 \rightarrow 2\ CH_3CHO + 2\ HO_2$

$CH_3COO_2 + CH_3COO_2 \rightarrow 2\ CH_3O_2 + 2\ CO_2 + O_2$

$OH + C_3H_8 \rightarrow i\text{-}C_3H_7O_2 + H_2O$

$i\text{-}C_3H_7O_2 + NO \rightarrow NO_2 + HO_2 + CH_3COCH_3$

$OH + CH_3COCH_3 \rightarrow CH_3COCH_2O_2 + H_2O$

$CH_3COCH_2O_2 + NO \rightarrow NO_2 + HCHO + CH_3COO_2$

$CH_3COCH_2O_2 + CH_3O_2 \rightarrow HO_2 + 2\ HCHO + CH_3COO_2$

$i\text{-}C_3H_7O_2 + CH_3O_2 \rightarrow 2\ HO_2 + HCHO + CH_3COCH_3$

$OH + PAN \rightarrow NO_3 + HCHO$

$HO_2 + C_2H_5O_2 \rightarrow C_2H_5OOH + O_2$

$OH + C_2H_5OOH \rightarrow CH_3CHO + OH$

$HO_2 + i\text{-}C_3H_7O_2 \rightarrow i\text{-}C_3H_7OOH + O_2$

$OH + i\text{-}C_3H_7OOH \rightarrow CH_3COCH_3 + OH$

$HO_2 + s\text{-}C_4H_9O_2 \rightarrow s\text{-}C_4H_9OOH + O_2$

$OH + s\text{-}C_4H_9OOH \rightarrow CH_3COC_2H_5 + OH$

$NO + CH_3COCH(O_2)CH_3 \rightarrow CH_3COO_2 + NO_2 + CH_3CHO$

$CH_3O_2 + CH_3COCH(O_2)CH_3 \rightarrow HCHO + HO2 + CH_3CHO + CH_3COO_2$

$OH + C_2H_4 + M \rightarrow CH_2O_2CH_2OH + M$

$CH_2O_2CH_2OH + NO \rightarrow 2\ HCHO + HO_2 + NO_2$

$CH_3O_2 + CH_2O_2CH_2OH \rightarrow 3\ HCHO + 2\ HO_2$

$O_3 + C_2H_4 \rightarrow HCHO + 0.31\ CO + 0.13\ H_2 + 0.2\ HO_2 + 0.47$

		HCHO
$O_3 + C_3H_6$	→	HCHO + 0.3 CH_4 + 0.4 CO + 0.28 OH + 0.3 HO_2 + 0.58 CH_3O_2 + 0.12 CH_3OH
$O_3 + C_3H_6$	→	CH_3CHO + 0.24 H_2 + 0.58 CO + 0.18 HO_2
$OH + C_3H_6 + M$	→	$CH_3CHO_2CH_2OH + M$
$CH_3CHO_2CH_2OH + NO$	→	HCHO + HO_2 + CH_3CHO + NO_2
$CH_3O_2 + CH_3CHO_2CH_2OH$	→	2 HCHO + 2 HO_2 + CH_3CHO
$O_3 + C_5H_8$	→	$CH_2CHCOCH_3$ + 0.78 CO + 0.22 HCHO + 0.27 HO_2 + 0.27 OH
$O_3 + CH_2CHCOCH_3$	→	CH_3COCHO + 0.76 CO + 0.24 HCHO + 0.36 HO2 + 0.36 OH
$CH_3COO_2 + HO_2$	→	0.3 O3 + 0.8 CH_3O_2 + 0.2 CH_3COO_2
$HOC_5H_8O_2 + CH_3O_2$	→	$CH_2CHCOCH_3$ + HCHO + 2 HO_2
$CH_3COCH(OH)CH_2O_2 + CH_3O_2$	→	CH_3COCHO + HCHO + 2 HO_2
$HOC_5H_8O_2 + HO2$	→	HOC_5H_8OOH
$HOC_5H_8OOH + OH$	→	$CH_2CHCOCH_3$ + HCHO + OH
$CH_3COCH(OH)CH_2O_2 + HO_2$	→	$CH_3COCH(OH)CH_2OH$
$CH_3COCH(OH)CH_2OH + OH$	→	CH_3COCHO + HCHO + OH
$CH_3COCHO + OH$	→	CH_3COO_2 + CO
$CHOCHO + OH$	→	HO_2 + 2 CO
$OH + C_5H_8$	→	$HOC_5H_8O_2$
$HOC_5H_8O_2 + NO$	→	$CH_2CHCOCH_3$ + NO_2 + HCHO + HO_2
$OH + CH_2CHCOCH_3$	→	CH3COCH(OH)CH2O2
CH3COCH(OH)CH2O2 + NO	→	NO_2 + HO_2 + HCHO + CH_3COCHO
$NO_3 + C_2H_6$	→	$C_2H_5O_2$ + HNO_3
NO_3 + n-C_4H_{10}	→	s-$C_4H_9O_2$ + HNO_3

$NO_3 + C_2H_4$	→	$CH_2(NO_3)CHO + HO2$
$CH_2(NO_3)CHO + OH$	→	$HCHO + NO_2$
$NO_3 + C_3H_6$	→	$CH_3CH(NO_3)CHO + HO_2$
$CH_3CH(NO_3)CHO + OH$	→	$CH_3CHO + NO_2$
$NO_3 + CH_3CHO$	→	$CH_3COO_2 + HNO_3$
$NO_3 + C_5H_8$	→	$(NO_3)C_4H_6CHO + HO_2$
$(NO_3)C_4H_6CHO + OH$	→	$CH_2CHCOCH_3 + NO_2$
OH + o-xylene	→	$HO_2 + 0.8\ CH_3COCHCHCHO + 0.8\ CH_3COCHO$
$NO_2 + HOC_6H_5CH_3O_2$	→	ORGNIT
$OH + CH_3COCHCHCHO$	→	$CHOCH(OH)CO_2CH_3CHO$
$CHOCH(OH)CO_2CH_3CHO + NO$	→	$HO_2 + NO_2 + CHOCHO + CH_3COCHO$
OH + Toluene	→	$HO_2 + CH_3COCHCHCHO + CHOCHO$
OH + Toluene	→	$HOC_6H_4(CH_3)_2O_2$
OH + o-xylene	→	$HOC_6H_5CH_3O_2$
OH + ORGNIT	→	$CH_3COCHCHCHO + CHOCHO + NO_2$
NO3 + ORGNIT	→	$CH_3COCHCHCHO + CHOCHO + 2\ NO_2$
$HOC_6H_5CH_3O_2 + HO2$	→	$CH_3COCHCHCHO + CH_3COCHO$
$CHOCH(OH)CO_2CH_3CHO + CH_3O_2$	→	$2\ HO_2 + HCHO + CHOCHO + CH_3COCHO$
$HO2 + HOC_6H_4(CH_3)_2O_2$	→	$CH_3COCHCHCHO + CHOCHO + OH$
$NO2 + HOC_6H_4(CH_3)_2O_2$	→	ORGNIT

Table S2. Photochemical reactions in RAQ mechanism

$O_3 + h\nu$	→	$O(^3P)$
$O_3 + h\nu$	→	$O(^1D)$
$NO_2 + h\nu$	→	$NO + O(^3P)$
$H_2O_2 + h\nu$	→	$OH + OH$
$HNO_3 + h\nu$	→	$NO_2 + OH$
$HCHO + h\nu$	→	$CO + HO_2 + HO_2$
$HCHO + h\nu$	→	$CO + H_2$
$CH_3CHO + h\nu$	→	$CH_3O_2 + HO2 + CO$
$CH_3COC_2H_5 + h\nu$	→	$C_2H_5O_2 + CH_3COO_2$
$CH_3COCH_3 + h\nu$	→	$CH_3COO_2 + CH_3O_2$
$HO_2NO_2 + h\nu$	→	$HO_2 + NO_2$
$CH_3COCHO + h\nu$	→	$CH_3COO2 + HO2 + CO$
$CHOCHO + h\nu$	→	$HO_2 + HO_2 + CO + CO$
$NO_3 + h\nu$	→	$NO + O_2$
$NO_3 + h\nu$	→	$NO_2 + O(^3P)$
$N_2O_5 + h\nu$	→	$NO_2 + NO_3$
$CH_3OOH + h\nu$	→	$HCHO + HO_2 + OH$
$PAN + h\nu$	→	$CH_3COO_2 + NO_2$
$C_2H_5OOH + h\nu$	→	$OH + HO_2 + CH_3CHO$
$i\text{-}C_3H_7OOH + h\nu$	→	$OH + HO_2 + CH_3COCH_3$
$s\text{-}C_4H_9OOH + h\nu$	→	$OH + HO_2 + CH_3COC_2H_5$
$HOC_5H_8OOH + h\nu$	→	$OH + CH_2CHCOCH_3 + HCHO + HO_2$
$CH_3COCH(OH)CH_2OH + h\nu$	→	$OH + CH_3COCHO + HCHO + HO_2$