

Table S1. List of samples and the condition of being treated (1) or non-treated (0).
Area ratios for each target compound used in the first manual inspection and in the first PCA analysis, conducting to Figure 1.

Treated?	Sample #	Sample Name	eucalyptol	guaiacol	fenchol	veratrole	camphor	borneol	alfa-terpineol	enzothiazol	TCA
0	1	mostra1	0.57588	0.11150	0.05935	0.23544	1.35635	0.10809	0.95009	0.21555	0.09660
0	2	mostra2	0.24821	0.10870	0.06367	0.15707	1.91469	0.24704	1.22721	0.21812	0.08790
0	3	mostra3	0.50209	0.06357	0.06154	0.17601	1.51853	0.13519	1.06950	0.21055	0.09679
0	4	mostra4	0.86369	0.09892	0.08091	0.26488	2.04501	0.23370	1.85446	0.27210	0.10871
0	5	mostra5	0.76147	0.13796	0.05898	0.09026	1.76323	0.13631	1.10205	11.15134	0.10056
0	6	mostra6	0.91331	0.12535	0.09906	0.16019	2.07963	0.26898	1.41920	12.50908	0.10920
0	7	mostra7	0.59877	0.19397	0.06745	0.16641	1.58457	0.14623	1.28770	5.35578	0.11421
0	8	mostra8	0.43221	0.42509	0.11593	0.39311	2.46742	0.40745	2.51005	0.41660	0.14408
0	9	mostra9abans	0.31215	0.12447	0.07670	0.20843	0.94566	0.07031	0.55576	0.63442	0.14436
0	10	mostra10abans	0.56243	0.08113	0.13819	0.28210	1.43779	0.10135	0.86921	0.97600	0.14482
0	11	mostra11abans	0.39603	0.21715	0.09873	0.17232	0.94467	0.09559	0.58335	4.70218	0.13217
0	12	mostra12abans	0.68349	0.25974	0.09487	0.23746	1.02172	0.07345	0.65759	1.19706	0.11940
0	31	mostra121NRNOCD	0.08362	1.08711	0.09075	0.10769	1.10691	0.47239	0.76960	0.74948	0.06030
0	32	mostra121NRNOCD	0.06733	2.26392	0.07678	0.14824	1.13118	0.43788	0.80188	1.19039	0.11706
0	34	mostra129NRNOCD	0.20555	1.07848	0.03392	0.20015	1.24166	0.30579	0.58796	0.65504	0.18826
0	35	mostra90NRNOCD	0.34783	1.67887	0.06514	0.23312	1.98627	0.47018	1.41024	1.16501	0.05047
0	36	mostra90NRNOCD	0.41868	1.90816	0.06384	0.50324	1.60150	0.34441	1.13314	0.64640	11.87900
0	37	mostra99NRNOCD	0.55040	0.87796	0.06731	0.33313	1.95998	0.24586	0.57779	0.66149	0.10125
0	38	mostra99NRNOCD	0.38102	1.58348	0.09852	0.29480	1.92001	0.48913	1.08807	0.84560	0.38197
0	40	mostra46R-NOCD	0.52547	0.94330	0.14100	0.20100	2.05378	0.59884	3.15605	0.89019	0.09257
0	42	mostraCln1NR-NOCD	0.13340	0.44504	0.03366	0.28538	0.69702	0.14615	0.14107	3.09035	0.06629
0	44	mostraCln2NR-NOCD	0.08002	0.12306	0.03909	0.21980	0.60219	0.21474	0.10873	1.66371	0.09430
0	46	mostrad28NR-NOCD	0.36740	0.53151	0.08475	0.11385	2.05668	0.34031	0.63604	5.64317	0.07780
0	48	mostraHDn1HDNR-NOCD	1.30102	1.18168	0.06280	3.33232	2.14951	0.30330	0.73204	0.60421	0.08545
0	50	mostraHDn1TZNR-NOCD	0.34720	1.30464	0.05000	0.14357	1.06444	0.25147	0.53532	0.90635	0.04272
0	51	mostraHDn2HDNR-NOCD	0.19442	0.87101	0.10100	0.23766	1.55930	0.43269	0.77219	0.59219	0.04797
0	52	mostraHDn2TZNR-NOCD	0.67314	0.81134	0.08069	0.43219	2.11772	0.32425	1.14002	3.62931	0.05250
0	54	mostraCCM-NR-NOCD	0.71754	0.90145	0.08735	0.19615	2.28837	0.39323	0.93660	1.07450	0.06884
1	13	mostra1desp	0.85777	0.30576	0.05780	0.22513	1.61801	0.24226	2.04841	3.96695	0.09894
1	14	mostra2desp	1.25816	0.34826	0.07693	0.53362	2.91567	0.54455	2.83415	0.99716	0.11143
1	15	mostra3desp	0.62074	0.15314	0.05095	0.30176	1.51864	0.21940	1.61639	5.47738	0.32688
1	16	mostra4desp	1.20746	0.23683	0.09460	0.39980	3.03318	0.30107	2.95377	1.80377	0.14101
1	17	mostra5desp	1.36801	0.19311	0.10043	0.20050	2.40644	0.23974	2.28521	0.98585	0.11019
1	18	mostra6desp	0.41738	0.17004	0.06689	0.16263	0.74344	0.06283	0.47235	0.23155	0.14199
1	19	mostra7desp	1.22441	0.34362	0.13086	0.17547	1.81033	0.17339	0.84610	0.29550	0.11445
1	20	mostra8desp	0.98172	0.48481	0.13821	0.24126	1.60709	0.22139	1.00719	0.41959	0.14816
1	21	mostra9desp	0.41734	0.10418	0.05743	0.12328	0.66093	0.06854	0.37368	0.34424	0.10642
1	22	mostra10desp	0.48000	0.09134	0.06248	0.15324	0.70506	0.10968	0.36705	0.34518	0.10036
1	23	mostra11desp	0.50128	0.12628	0.07370	0.19460	0.90287	0.09397	0.67889	0.39946	0.10598
1	24	mostra12desp	0.49560	0.08791	0.09396	0.15170	0.89198	0.36283	0.62304	0.24779	0.36573
1	25	mostra121NR	0.04865	1.13097	0.08921	0.09338	0.96505	0.44267	1.01606	0.47132	0.05260
1	26	mostra121R	0.04501	0.31327	0.04338	0.08101	0.42528	0.25451	0.61807	0.34795	0.09980
1	27	mostra90NR	0.00000	1.34508	0.00000	0.28213	0.48313	0.22178	0.57982	0.73604	0.05693
1	28	mostra90R	0.10666	1.25527	0.07831	0.29605	1.03837	0.57395	1.48560	1.10322	0.05069
1	29	mostra99R	0.09959	1.29892	0.04052	0.39940	0.83175	0.20687	0.63870	0.51499	0.04975
1	30	mostra99NR	0.13034	1.41549	0.05281	0.37080	1.21692	0.33565	0.71233	0.67373	0.05823
1	33	mostra129NR1xCD	0.08676	1.83561	0.06456	0.05578	0.83540	0.38353	0.74417	20.78618	0.10782
1	39	mostra46R-1xCD	0.12592	1.16645	0.05510	0.15149	1.21462	0.32784	0.95352	0.49524	0.11387
1	41	mostraCln1-1xCD	0.13785	0.49672	0.02616	0.15018	0.70146	0.18823	0.15693	0.95800	0.06617
1	43	mostraCln2-1xCD	0.40320	0.35656	0.03905	0.12331	0.78060	0.18213	0.18479	0.98315	0.07305
1	45	mostrad28NR-1xCD	0.11432	0.72909	0.08586	0.25356	1.01599	0.41762	0.07983	0.40296	0.03740
1	47	mostraHDn1HDNR-1xCD	0.30376	1.19408	0.07047	0.42652	1.37416	0.26429	0.45154	0.40673	0.05959
1	49	mostraHDn1TZNR-1xCD	0.20196	0.66383	0.04024	0.16815	1.09218	0.24614	0.46499	0.28840	0.04440
1	53	mostraCCM-NR-1xCD	0.14178	0.54809	0.05897	0.08598	1.55052	0.30929	0.82986	0.55619	0.12248
1	55	mostraHDn2HDNR-1xCD	0.23187	0.55663	0.10797	0.29985	1.21401	0.48678	0.91093	1.01363	0.06859
1	56	mostraHDn2TZNR-1xCD	0.72818	0.47670	0.15019	0.17973	3.19026	0.52655	1.30601	0.38977	0.16907