Direct Contact Sorptive Extraction: A Robust Method for Sampling Plant Volatiles in the Field

Nicole Kfoury[1], Eric Scott[2], Colin Orians[2], Albert Robbat Jr[1*]

[1]Department of Chemistry, Tufts University, 200 Boston Ave. Suite G700 Medford MA, 02155

[2]Department of Biology, Tufts University, 163 Packard Ave. Medford MA, 02155

* TEL: 617.627.3474, albert.robbat@tufts.edu

Supporting Information Table 1. Tea metabolite relative peak areas determined by DHS and DCSE sampling.

		DHS						DCSE						
No.	**Compound**	**C 1**	**C 2**	**C 3**	**M 1**	**M 2**	**M 3**	**C 1**	**C 2**	**C 3**	**M 1**	**M 2**	**M 3**	**ID**
1	acetaldehyde	0.442	0.198	0.140	0.269	0.157	0.186	0.198	0.126	0.161	0.156	0.093	0.122	T
2	ethanol	0.133	0.185	0.100	0.149	0.147	0.123	0.590	0.441	0.968	0.448	0.459	0.874	Std.
3	methyl vinyl ketone	0.141	0.064	0.051	0.468	0.767	0.053	0.188	0.184	0.242	0.260	0.221	0.327	Std.
4	2-butanone	0.133	0.109	0.072	0.281	0.304	0.080	0.498	0.420	0.519	1.618	1.034	2.211	T
5	2-methylfuran		0.002		0.076	0.129	0.001	0.184	0.176	0.186	0.399	0.156	0.201	T
6	2-butanol	0.026		0.028	0.157	0.116	0.013				0.263	0.268	0.436	T
7	isobutyronitrile				0.207	0.118					0.081	0.048	0.101	T
8	tetrahydrofuran	0.010	0.010	0.005	0.016	0.016	0.009	0.423	0.168	0.181	0.260	0.126	0.256	T
9	isovaleraldehyde	0.102	0.097		0.223	0.217	0.031	0.209	0.178	0.103	0.196	0.205	0.557	Std.
10	benzene	0.487	0.283	0.219	0.214	0.262	0.268	0.737	0.375	0.463	0.620	0.462	0.433	Std.
11	1-butanol	0.061		0.025	0.056		0.015	3.145		0.213		0.290	0.398	T
12	3-methylhexane										0.033	0.031	0.032	T
13	pentanal	0.068	0.050	0.037	0.045	0.051	0.039	0.290	0.139	0.199	0.265	0.154	0.453	T
14	heptane							0.062	0.049	0.067	0.068	0.051	0.060	Std.
15	hydroxyacetone	0.433	0.348	0.031	0.413	0.438	0.542	4.987	7.462	5.051	14.500	5.793	8.210	Std.
16	methyl methacrylate							0.096	0.130	0.055	0.101	0.421	0.255	T
17	2,4,4-trimethyl-1-pentene		0.034		0.034	0.026		0.112			0.136			T
18	2-ethoxyethanol	0.033	0.021		0.017	0.011		0.250	0.224	0.272	0.382	0.195	0.523	T
19	2-methylbutanenitrile	0.028	0.016		7.697	4.506	0.030	0.067	0.076	0.043	2.002	1.795	4.933	T
20	4-methyl-2-pentanone							0.035	0.012		0.018	0.015		T
21	3-methylbutanenitrile				15.543	9.033	0.044				6.540	4.413	9.951	T
22	isoamyl alcohol				0.115	0.069					0.133	0.084	0.254	Std.
23	dimethyldisulfide							0.060	0.090	0.045	0.144	0.047	0.053	T
24	propanoic acid	0.367	0.231	0.185	0.250	0.154	0.107	0.737	0.494	0.795	0.632	0.369	0.381	Std.
25	2-propenoic acid	0.109	0.035	0.016	0.083	0.124	0.005			0.175				T
26	(2*E*)-pentenal										0.042	0.036	0.054	T

27	*see table S2*												
28	pyrrole				0.030	0.023	0.006	0.122	0.078	0.091	0.137	0.084	0.161	T
29	*see table S2*												
30	pentanol							0.043	0.029	0.038	0.056	0.039	0.052	Std.
31	toluene	2.377	2.654	0.434	1.556	2.157	0.602	0.685	0.528	0.861	0.701	0.657	0.753	Std.
32	(*E*)-2-methylpropyl aldoxime				0.082	0.126					0.221	0.100	0.395	T
33	2,4-pentanedione	0.020	0.017	0.008										
34	unknown 1										0.117	0.051	0.126	
35	2-ethylhexene										0.059	0.046		T
36	*see table S2*													
37	3-methyl-2-butenal	0.012	0.018	0.007	0.052	0.058	0.007	0.064	0.059	0.087	0.047	0.033	0.052	T
38	*see table S2*													
39	2-hexanone							0.044	0.028	0.034	0.038	0.032	0.048	Std.
40	cyclopentanone	0.049	0.040	0.039	0.036	0.041	0.031	0.491	0.305	0.297	0.310	0.270	0.363	T
41	octane	0.074	0.078	0.046				0.089	0.073	0.118	0.108	0.071	0.082	Std.
42	4-methyl-3-penten-2-one	0.028	0.030		0.030	0.044		0.032	0.040	0.040	0.053	0.037	0.049	Std.
43	hexanal							0.324	0.205	0.245	0.243	0.189	0.233	Std.
44	unknown 2				0.005	0.011	0.015					0.069	0.164	
45	butanoic acid	0.194	0.114	0.081				0.930	0.323	0.584	0.639	0.386	0.373	Std.
46	butyl acetate							0.028	0.023	0.024	0.025	0.021	0.020	T
47	*see table S2*													
48	3-furaldehyde	0.005	0.006	0.006	0.011	0.014	0.013	0.123	0.071	0.058	0.177	0.057	0.101	T
49	*see table S2*													
50	1-ethyl-1*H*-pyrrole	0.011	0.007	0.004	0.013	0.007	0.004	0.018			0.085			T
51	2,4-dimethylheptane							0.093	0.079	0.118	0.083	0.080	0.118	T
52	unknown 3										0.044	0.015	0.043	
53	furfural							0.936	0.827	0.777	1.217	0.546	0.851	Std.
54	unknown 4	1.070	0.618	0.168	0.658	0.653	0.211							
55	(2*E*)-hexenal	0.034	0.036	0.029	0.052	0.100	0.022				0.019	0.032	0.022	Std.
56	(3*Z*)-hexenol	0.156	0.109	0.025	1.114	0.616	0.033				0.159	0.428	0.281	Std.
57	2-methylbutanoic acid	0.008	0.006	0.002		0.011	0.006	0.030	0.050	0.119				Std.
58	ethylbenzene	0.639	0.828	0.119	0.399	0.734	0.154	0.085	0.092	0.055	0.086	0.108	0.052	Std.

59	(*Z*)-3-methylbutyl aldoxime				3.262	1.891					4.161	0.588	4.910	T
60	unknown 5	0.083	0.088	0.033	0.493	0.851	0.053				0.546	0.273	0.243	
61	2-furanmethanol	0.008	0.009	0.008	0.011	0.026	0.006	0.404	0.503	0.428	0.693	0.420	0.205	Std.
62	*m*-xylene	1.544	2.117	0.220	1.071	1.940	0.294	0.166	0.222	0.149	0.185	0.277	0.145	Std.
63	*p*-xylene	1.544	2.119	0.220	1.071	1.941	0.294	0.166	0.221	0.147	0.183	0.278	0.145	Std.
64	(2*E*)-hexenol	0.016	0.010								0.073	0.057	0.068	Std.
65	(*Z*)-2-methylbutyl aldoxime				1.131	0.795					2.330	1.491	3.950	T
66	*n*-hexanol	0.029	0.023	0.008	0.427	0.549	0.031	0.037	0.024	0.033	1.083	0.628	1.500	Std.
67	isoamyl acetate	0.138	0.063	0.011	0.229	0.163	0.029	0.215	0.119		0.361	0.342	0.559	Std.
68	(*E*)-2-methylbutyl aldoxime				0.312	0.270					0.393	0.255	0.541	T
69	(2*Z*)-hexenol				0.011	0.009					0.053	0.067	0.055	Std.
70	2,6-dimethyl-1,5-heptadiene				0.014	0.020					0.086	0.047	0.056	T
71	3-heptanone	0.074	0.085	0.024	0.117	0.162	0.025	0.047	0.025	0.027	0.039	0.059	0.049	Std.
72	(*E*)-3-methylbutyl aldoxime				2.253	1.564					2.738	2.115	3.199	T
73	2-heptanone	0.079	0.062	0.024	0.014	0.042	0.028	0.178	0.061	0.048	0.088	0.070	0.083	Std.
74	styrene	0.500	0.807	0.153	0.572	1.183	0.067	0.491	0.574	0.347	0.403	0.501	0.381	T
75	2-methylcyclopentanone	0.016	0.358	0.235	0.479	0.289	0.305	0.324	0.206	0.284	0.280	0.178	0.218	T
76	unknown 6	0.749	0.360	0.230	0.480	0.295	0.313	0.309	0.207	0.278	0.288	0.157	0.229	
77	*o*-xylene	0.516	0.725	0.083	0.329	0.580	0.112	0.076	0.099	0.068	0.073	0.116	0.035	Std.
78	cyclohexanone	0.442	0.198	0.140	0.269	0.157	0.186	0.198	0.126	0.161	0.156	0.093	0.122	Std.
79	*see table S2*													
80	nonane	0.596	0.343	0.143	0.257	0.492	0.135	0.215	0.178	0.149	0.294	0.148		Std.
81	heptanal	0.157	0.128	0.077	0.163	0.243	0.090	0.231	0.166	0.185	0.223	0.176	0.253	Std.
82	1-nitropentane	0.161	0.126	0.084	0.899	0.751	0.096	0.434	0.231	0.263	0.742	0.435	0.921	T
83	2-acetylfuran	0.020	0.014	0.014	0.020	0.018	0.015	0.127	0.126	0.110	0.179	0.105	0.134	Std.
84	γ-butyrolactone	0.041	0.029	0.019	0.033	0.038	0.023	0.219	0.214	0.181	0.276	0.183	0.188	T
85	2(5*H*)-furanone	0.119	0.097	0.077	0.089	0.087	0.103	0.712	0.702	0.544	1.135	0.449	0.586	Std.
86	unknown 7	0.016	0.012					0.126	0.134	0.106	0.290	0.092	0.133	
87	cumene	0.066	0.077	0.014	0.040	0.059	0.018	0.029	0.036	0.024	0.025	0.028		Std.
88	1,2-cyclopentanedione	0.047	0.032	0.098	0.115		0.059	0.841	0.787	0.666	1.119	0.531	0.729	T
89	α-pinene	0.547	1.247	0.065	0.296	0.683	0.093	0.584	3.619	4.259	0.530	3.423	3.249	Std.

90	unknown 8	0.011	0.006	0.004	0.068	0.064	0.005	0.018	0.016		0.028	0.014		
91	*N,N*-diethylformamide	0.157	0.094	0.060	0.085	0.083	0.084	0.108	0.055	0.058	0.069	0.066	0.068	T
92	camphene				0.021	0.032		0.027	0.096	0.109	0.035	0.083	0.075	Std.
93	2-ethylhexanal	0.150	0.544	0.035	0.142	0.098	0.034			0.268				Std.
94	*see table S2*													
95	benzaldehyde							0.556	0.494	0.522	0.546	0.490	0.598	Std.
96	*see table S2*													
97	5-methylfurfural	0.017	0.010	0.021	0.012	0.013	0.015	0.117	0.077	0.059	0.141	0.048	0.141	Std.
98	1-ethyl-3-methylbenzene	0.391	0.390	0.096	0.296	0.489	0.117	0.128	0.211	0.135	0.119	0.152	0.105	T
99	1,2,3-trimethylbenzene	0.371	0.432	0.056	0.213	0.298	0.062	0.059	0.103	0.034	0.052	0.087	0.038	T
100	dimethyl trisulfide							0.045	0.129	0.048	0.149	0.053	0.098	T
101	β-pinene	0.726	1.332	0.044	0.392	0.714	0.067	0.733	3.424	4.093	0.678	3.045	3.120	Std.
102	1-octen-3-one	0.029	0.018	0.010	0.022	0.023	0.011	0.047	0.030	0.039	0.035	0.027	0.034	T
103	1-ethyl-2-methylbenzene	0.293	0.354	0.046	0.182	0.304	0.060	0.041	0.100	0.035	0.048	0.075		T
104	2-methylbutyl acrylate							0.051	0.041		0.054	0.107	0.792	T
105	1-octen-3-ol				0.032	0.376	0.030	0.089	0.081	0.133	0.105	0.075	0.136	Std.
106	α-methylstyrene	0.066	0.042	0.017	0.042	0.032	0.016	0.255	0.286	0.282	0.306	0.202	0.308	Std.
107	2,3-octanedione	0.025	0.023	0.015			0.015	0.020	0.022	0.028	0.025	0.015	0.027	T
108	6-methyl-5-hepten-2-one	0.079	0.065	0.022	1.111	0.668	0.021	0.215	0.121	0.123	0.148	0.147	0.425	Std.
109	dehydroxylinalool 3,7-oxide	0.041	0.028	0.013	0.013	0.296	0.511	0.078	0.054	0.056	0.071	0.064	0.183	T
110	phenol							0.299	0.255	0.248	0.509	0.275	0.321	Std.
111	*see table S2*													
112	myrcene	0.148	0.448		0.561	1.103		0.136	0.589	0.604	0.143	0.489	0.486	Std.
113	mesitylene	1.138	1.361	0.160	0.735	1.295	0.204	0.208	0.394	0.175	0.189	0.321	0.124	Std.
114	*see table S2*													
115	hexanoic acid							0.693	0.384	0.307	0.693	0.687	0.424	Std.
116	decane							0.459	0.395	0.386	0.500	0.299	0.342	Std.
117	*n*-octanal	0.283	0.222	0.144	0.313	0.519	0.156	0.424	0.317	0.335	0.423	0.256	0.452	Std.
118	α-phellandrene	0.071	0.175		0.086	0.156		0.020	0.041	0.046	0.018	0.035	0.034	Std.
119	(3*Z*)-hexenyl acetate	1.528	0.140	0.010	12.873	7.084	0.015	0.306			8.645	17.814	10.563	Std.
120	*see table S2*													

121	δ-3-carene	0.423	1.199	0.023	0.234	0.635	0.034	0.281	1.188	1.355	0.239	0.966	0.977	Std.
122	benzyl chloride	0.189	0.442	0.008			0.013	0.067	0.074		0.337	0.038	0.034	T
123	hexyl acetate	0.132	0.054	0.021	0.300	0.299					0.057	0.078	0.072	Std.
124	α-terpinene	0.015	0.046		0.025	0.044		0.279	1.186		0.238	0.972	0.977	Std.
125	(2*E*)-hexenyl acetate	0.059			0.403	0.475					0.183	0.330	0.379	T
126	4-cyanocyclohexene							0.596	0.062	0.282	0.118	0.191	0.159	T
127	1,2,4-trimethylbenzene	0.377	0.383	0.044	0.186	0.277	0.057	0.072	0.123	0.067	0.066	0.097	0.051	T
128	*p*-cymene	0.928	1.645	0.101	0.665	1.607	0.131	0.214	0.545	0.594	0.186	0.402	0.418	Std.
129	limonene	1.600	3.480	0.141	1.476	4.187	0.151	0.861	2.661	4.381	0.757	1.970	3.128	Std.
130	sylvestrene	2.758	7.242	0.138	2.559	7.563	0.155	1.695	6.058	7.869	1.431	4.557	5.527	T
131	2-ethyl-1-hexanol	2.374	4.880	0.783	5.479	4.821	0.472	0.805	0.482	0.559	0.699	0.851	0.545	Std.
132	indane	0.110	0.154	0.017	0.080	0.171	0.021	0.033	0.058	0.030	0.028	0.045	0.025	Std.
133	unknown 9	0.108	0.154	0.016	0.073	0.160	0.021	0.024	0.049		0.021	0.042		
134	(*Z*)-β-ocimene				0.051	0.025								T
135	benzyl alcohol	0.269	0.215	0.104	0.369	0.505	0.101	0.212	0.234	0.275	0.318	0.254	0.421	Std.
136	lavender lactone	0.027	0.026	0.010	0.099	0.202	0.008	0.017	0.013		0.017	0.033	0.058	T
137	*N,N*-dimethylbenzylamine							0.097	0.021		0.141	0.018		T
138	*see table S2*													
139	benzene acetaldehyde							0.049	0.033	0.036	0.076	0.069	0.121	Std.
140	(*E*)-β-ocimene				0.687	0.355					0.163	0.163	1.157	T
141	δ-valeryllactone	0.065	0.047	0.047	0.069	0.133	0.047	0.186	0.159	0.125	0.220	0.160	0.191	T
142	1-methyl-3-propylbenzene	0.244	0.299	0.038	0.162	0.331	0.046	0.057	0.128	0.053	0.047	0.091	0.042	T
143	γ-hexalactone	0.129	0.076	0.034	0.096	0.101	0.027							Std.
144	bergamal	0.015	0.011	0.005	0.032	0.026	0.005							Std.
145	2-ethyl-1,4-dimethylbenzene	0.240	0.258	0.034	0.147	0.236	0.040	0.048	0.101		0.042	0.081		T
146	γ-terpinene	0.016	0.026		0.031	0.050		0.022	0.060	0.141	0.019	0.044	0.106	Std.
147	4-methyldecane							0.049	0.050	0.044	0.040	0.035	0.032	T
148	*n*-octanol	0.069	0.051	0.014	0.085	0.136	0.046	0.038	0.022	0.025	0.033	0.020	0.026	Std.
149	2-methyldecane							0.079	0.094	0.050	0.058	0.055	0.038	T
150	acetophenone							0.519	0.537	0.509	0.580	0.829	0.689	Std.
151	3-methyldecane							0.080	0.092	0.074	0.081	0.067	0.061	T

152	*see table S2*													
153	*cis*-linalool oxide (furanoid)				0.126	0.137					0.129	0.193	0.158	Std.
154	heptanoic acid							0.249	0.185	0.096	0.268	0.308	0.245	Std.
155	unknown 10				0.045	0.054						0.045	0.210	
156	*trans*-linalool oxide (furanoid)				0.235	0.173			0.072	0.224	0.605	0.816	0.518	Std.
157	terpinolene					0.094	0.130	0.060	0.132	0.111	0.223	0.361	0.228	Std.
158	*p*-cymenene	0.145	0.201	0.012	0.160	0.391	0.015	0.055	0.111	0.122	0.044	0.085	0.088	T
159	2-phenyl-2-propanol	0.101	0.066	0.023	0.088	0.106	0.027	0.124	0.195	0.181	0.106	0.142	0.166	Std.
160	fenchone	0.399	0.510	0.015	0.274	0.329	0.024	0.212	0.498	0.533	0.260	0.461	0.433	T
161	undecane							0.466	0.420	0.493	0.415	0.294	0.330	Std.
162	linalool	0.048	0.045		2.631	1.467	0.014	0.037	0.054	0.054	1.498	3.997	2.017	Std.
163	*n*-nonanal	1.348	1.080	0.720	1.405	2.095	0.720	1.817	1.159	1.564	1.576	1.351	1.820	Std.
164	maltol	0.025		0.057	0.013			0.226	0.165	0.129	0.170	0.098	0.087	Std.
165	*endo*-fenchol	0.118	0.174	0.017				0.108	0.179	0.204	0.097	0.106	0.128	Std.
166	isodurene							0.063	0.117	0.066	0.048	0.083	0.050	T
167	phenyl ethyl alcohol	0.083	0.074	0.023	0.038	0.073	0.026	0.018	0.034		0.176	0.195		Std.
168	*see table S2*													
169	*allo*-ocimene				0.105	0.060					0.016	0.041	0.053	Std.
170	4-acetyl-1-methylcyclohexene	0.064	0.111	0.013		0.070	0.014		0.024			0.016	0.035	T
171	2-ethyl hexanoic acid	0.192	0.157	0.052	0.146	0.089	0.043	0.088	0.068	0.044	0.091	0.275	0.105	Std.
172	*trans*-pinocarveol	0.056	0.126	0.002	0.039	0.103	0.004	0.034	0.128	0.165	0.046	0.110	0.250	T
173	benzeneacetonitrile	0.024	0.123	0.008	9.192	16.804	0.035				5.105	8.808	35.184	Std.
174	*see table S2*													
175	ε-caprolactone			0.021			0.020	0.108	0.078		0.127	0.157		T
176	viridene	0.047	0.058	0.004	0.035	0.059	0.003	0.016	0.044	0.038				T
177	camphor	0.340	0.471	0.020	0.200	0.323	0.029	0.160	0.432	0.518	0.134	0.277	0.366	Std.
178	nerol oxide	0.047	0.069	0.066				0.039	0.077	0.092	0.032	0.055	0.059	T
179	*trans*-pinocamphone	0.121	0.176		0.100	0.181	0.018	0.063	0.142	0.168	0.111	0.095	0.120	T
180	2-ethylhexyl acetate	0.033	0.028	0.015	0.007	0.044	0.055	0.052	0.051	0.051	0.041	0.036	0.048	Std.
181	borneol	0.394	0.765	0.039	0.268	0.585	0.043	0.186	0.704	0.948	0.170	0.440	0.648	Std.
182	*cis*-linalool oxide (pyanoid)				0.029	0.022					0.064	0.062	0.052	Std.

183	*n*-nonanol							0.088	0.070	0.063	0.089	0.063	0.081	Std.
184	menthol	0.188	0.150	0.035	0.119	0.144	0.043	0.074	0.102	0.105	0.066	0.068	0.083	Std.
185	*cis*-pinocamphone	0.213	0.288	0.026	0.148	0.249	0.032	0.148	0.260	0.294	0.116	0.165	0.281	T
186	*trans*-linalool oxide (pyranoid)				0.095	0.078	0.005				0.152	0.188	0.197	Std.
187	terpinen-4-ol	0.086	0.159		0.120	0.320		0.111	0.312	0.320	0.085	0.196	0.246	Std.
188	naphthalene	17.686	12.338	7.626	12.629	12.193	9.008	6.281	4.963	6.712	5.594	3.656	4.966	Std.
189	(3*Z*)-hexenyl butanoate	0.043			0.953	0.742	0.019	0.039	0.051	0.045	0.254	0.562	0.650	T
190	2,6-dimethyl-3,7-octadiene-2,6-diol										0.236	0.502	0.575	T
191	*p*-cymen-8-ol				0.012	0.087								T
192	cryptone	0.156	0.400	0.015	0.016	0.158	0.017		0.067	0.097				T
193	octanoic acid							0.539	0.347	0.232	0.489	0.513	0.469	Std.
194	α-terpineol	0.100	0.196	0.009	0.126	0.427	0.010	0.133	0.405	0.437	0.109	0.251	0.289	Std.
195	methyl salicylate	0.347	0.387	0.273	0.233	0.511	0.049	0.113	0.170	0.120	0.166	0.211	0.247	Std.
196	dodecane							0.179	0.218	0.253	0.159	0.150	0.210	Std.
197	myrtenol				0.084	0.268	0.010	0.084	0.124	0.132	0.062	0.062	0.093	T
198	*n*-decanal	0.592	0.452	0.385	1.112	2.307	0.390	1.013	0.641	0.640	0.850	0.719	0.909	Std.
199	levoverbenone	0.053	0.104	0.010	0.043	0.118	0.012	0.016	0.074	0.101		0.044	0.069	T
200	benzenecarboxylic acid							0.096	0.112		0.154	0.127	0.098	T
201	*see table S2*													
202	rose ether							0.095	0.094	0.091	0.074	0.067	0.078	T
203	methenamine							0.440	0.398	0.364	0.992	0.071	0.515	T
204	*see table S2*													
205	(3*Z*)-hexenyl valerate	0.058			1.627	1.098	0.007				0.647	0.880	1.769	T
206	*o*-methylthymol	0.164	0.373		0.112	0.455	0.007		0.270	0.339	0.000	0.162	0.223	T
207	2-methoxy-*p*-cymene	0.164	0.376	0.006	0.114	0.459	0.012	0.073	0.285	0.371	0.053	0.177	0.257	T
208	*see table S2*													
209	(3*Z*)-hexenyl isovalerate	0.061			0.364	0.342	0.004				0.175	0.296	0.252	T
210	unknown 11	0.123	0.103	0.071	0.047	0.079	0.075	0.032	0.044	0.049	0.035	0.026	0.038	
211	cuminaldehyde	0.053	0.098		0.026	0.044								T
212	carvone	0.085	0.076	0.012	0.066	0.564	0.011	0.037	0.040	0.043	0.036	0.030	0.049	Std.
213	3-phenoxypropanol							0.157	0.142	0.115	0.115	0.067	0.076	T

214	*see table S2*													
215	linalool acetate				0.013	0.033	0.003		0.032	0.023		0.015	0.029	Std.
216	geraniol	0.054			0.121	0.077					0.055	0.045		Std.
217	*see table S2*													
218	caprolactam	0.615	0.271	0.236	0.262	0.219	0.157	1.808	1.103	1.630	2.151	1.365	1.667	Std.
219	geranial				0.249	0.439						0.058	0.240	Std.
220	4-ethylguaicol	0.054	0.216		0.032	0.378		0.049	0.207	0.188	0.047	0.112	0.182	T
221	nonanoic acid							0.673	0.624	0.367	0.687	0.035	0.790	Std.
222	tridecane	0.274	0.358	0.203	0.594	0.459	0.065	0.174	0.159	0.236	0.115	0.135	0.189	Std.
223	indole				0.514	0.582	0.007				0.169	0.174	3.314	Std.
224	geranyl formate				0.073	0.081								Std.
225	*N,N*-dibutylformamide	0.132	0.096	0.071	0.131	0.057	0.104	1.133	0.477	0.378	0.811	0.575	0.542	T
226	undecanal	0.066	0.065	0.042	0.118	0.246	0.042	0.152	0.110	0.133	0.117	0.091	0.117	Std.
227	1-methylnaphthalene	0.056	0.067	0.018	0.047	0.090	0.016	0.029	0.056	0.031	0.029	0.038	0.029	Std.
228	*see table S2*													
229	*see table S2*													
230	*see table S2*													
231	*see table S2*													
232	*see table S2*													
233	γ-nonalactone	0.058		0.040				0.086	0.065	0.042	0.056	0.029	0.074	Std.
234	(3*Z*)-hexenyl hexenoate	0.078	0.017	0.012	1.400	0.996	0.017	0.035	0.034	0.023	0.212	0.278	1.487	T
235	decanoic acid	0.563	0.314	0.303	0.489	0.561	0.254	0.537	0.473	0.195	0.576	0.527	0.464	Std.
236	*see table S2*													
237	*see table S2*													
238	*see table S2*													
239	tetradecane	0.264	0.198	0.149	0.278	0.293	0.073	0.238	0.156	0.203	0.168	0.131	0.182	Std.
240	(*Z*)-jasmone	0.009	0.007	0.003	0.020	0.021	0.004	0.038	0.103	0.154	0.037	0.031	0.023	Std.
241	vanillin							0.071	0.079	0.045	0.132	0.047	0.043	Std.
242	dodecanal				0.098	0.160	0.029	0.113	0.079	0.125	0.094	0.088	0.117	Std.
243	longifolene	0.104	0.290	0.016	0.072	0.318	0.020	0.053	0.220	0.350	0.042	0.138	0.234	T
244	2-ethylhexyl pentanoate	0.177	0.080	0.136	0.282	0.073	0.031					0.039		T

245	(*E*)-caryophyllene	0.014	0.008	0.006	0.016	0.016	0.005	0.016	0.013		0.016	0.014	0.021	Std.
246	*see table S2*													
247	*see table S2*													
248	geranyl acetone	0.055	0.032	0.019	0.808	0.149	0.018	0.207	0.120	0.075	0.145	0.106	0.158	Std.
249	*see table S2*													
250	*n*-dodecanol							0.744	0.551	0.492	1.022	0.457	0.677	Std.
251	α-amorphene				0.028	0.028			0.017	0.057	0.023			T
252	*see table S2*													
253	(*E*)-β-ionone	0.013	0.006		0.011	0.012								Std.
254	pentadecane							0.494	0.290	0.393	0.480	0.293	0.369	Std.
255	α-muurolene				0.048	0.039						0.013	0.044	T
256	butylated hydroxytoluene	0.161	0.086	0.151	0.065	0.042	0.095	0.094	0.059	0.038	0.091	0.039	0.031	T
257	unknown 12				3.650	1.491					3.662	5.053	20.771	
258	*see table S2*													
259	*see table S2*													
260	(*E,E*)-α-farnesene				3.635	1.478		0.048	0.056	0.031	3.658	5.058	20.786	T
261	*see table S2*													
262	2,4-*di*-*tert*-butylphenol	0.956	0.281	0.104	0.532	0.012	0.089	0.050	0.031	0.036	0.048	0.272	0.052	T
263	δ-cadinene				0.031	0.028					0.038	0.040	0.026	T
264	*cis*-calamenene	0.195	0.115	0.094	0.213	0.051	0.050							T
265	*see table S2*													
266	α-calacorene	0.009	0.006	0.004	0.036	0.017	0.003							T
267	(*E*)-nerolidol				0.136	0.100					0.168	0.384	2.121	Std.
268	dodecanoic acid							1.238	0.706	0.890	0.771	0.546	0.573	Std.
260	*see table S2*													
270	*see table S2*													
271	*see table S2*													
272	hexadecane	0.248	0.137	0.122	0.161	0.162	0.073	0.263	0.128	0.165	0.221	0.162	0.168	Std.
273	unknown 13					0.098	0.143				0.163	0.226	0.151	
274	cedrol	0.021	0.012	0.009	0.020	0.019	0.008							T
275	unknown 14	0.628	0.332	0.251	0.451	0.561	0.247	1.773	1.407	2.678	1.483	1.007	1.187	

276	benzophenone										0.132	0.060	0.046	T
277	*see table S2*													
278	*epi*-α-murrolol				0.036	0.034								T
279	(*Z*)-methyl jasmonate				0.245	0.172	0.022				0.037	0.028	0.418	Std.
280	(*Z*)-methyl dihydrojasmonate	0.058	0.040		0.069	0.054	0.028	0.044	0.025		0.035	0.014	0.040	Std.
281	α-cadinol	0.028	0.017	0.020	0.043	0.033								T
282	*see table S2*													
283	tridecanoic acid							0.086	0.044		0.048	0.040		T
284	*n*-tetradecanol	0.098	0.074	0.078	0.120	0.077	0.061	0.369	0.306	0.232	0.598	0.210	0.387	T
285	2,2',5,5'-tetramethyl-1,1'-biphenyl	0.050	0.045	0.021	0.045	0.019	0.020	0.445	0.049		0.525	0.094	0.248	T
286	heptadecane							0.270	0.083	0.066	0.320	0.132	0.129	Std.
287	2-ethylhexyl benzoate	0.426	0.065	0.059	0.093	0.069	0.044				0.682	0.417	0.235	T
288	tetradecanoic acid	0.490	0.458	0.472	0.541	0.476	0.391	1.612	1.332	0.612	2.449	0.962	0.789	Std.
289	octadecane	0.149	0.069	0.094	0.099	0.083	0.058	0.297	0.113	0.102	0.291	0.155	0.182	Std.
290	2-ethylhexyl salicylate							0.045	0.039	0.043	0.047	0.026	0.076	Std.
291	isopropyl myristate	0.039	0.022	0.016	0.047	0.031	0.016	0.037	0.027	0.029	0.036	0.021	0.029	Std.
292	unknown 14	2.246	2.202	1.251	2.087	0.116	1.237					0.181		
293	unknown 15	0.708	0.383	0.230	0.472	0.335	0.137				0.167	0.121	0.333	
294	pentadecanoic acid	0.022	0.079	0.151	0.085	0.113	0.137	0.664	0.678	0.249	1.155	0.332	0.333	T
295	*n*-hexadecanol							0.725	0.490	0.252	0.724	0.418	0.458	Std.
296	homomenthyl salicylate							0.023	0.016	0.023	0.027	0.014	0.021	Std.
297	nonadecane							0.211	0.081	0.081	0.224	0.130	0.122	Std.
298	methyl palmitate	0.075	0.047	0.060	0.054	0.054	0.048	0.279	0.113	0.117	0.318	0.175	0.172	Std.
299	n-hexadecanoic acid	10.535	8.771	8.266	7.313	6.448	8.002	43.236	19.303	9.332	50.647	13.998	12.820	Std.
300	isopropyl palmitate	0.103	0.094	0.088	0.117	0.035	0.044	0.078	0.039	0.104	0.075	0.071	0.080	Std.
301	*n*-octadecanol	0.273	0.202	0.153	0.252	0.200	0.112	1.758	2.238	2.675	2.470	0.678	0.640	T
302	heneicosane	0.096	0.076	0.137	0.086	0.066	0.062	0.518	0.368	0.431	0.610	0.334	0.449	Std.
303	docosane	0.109	0.057	0.146	0.058	0.051	0.078	0.406	0.273	0.168	0.758	0.212	0.241	Std.
304	octadecanol acetate							0.072	0.057	0.035	0.160	0.038	0.054	T
305	tricosane	0.121	0.055	0.114	0.054	0.047	0.071	0.456	0.216	0.185	0.558	0.221	0.264	Std.
306	pentacosane	0.173	0.074	0.136	0.082	0.070	0.085	0.517	0.292	0.274	0.863	0.304	0.315	Std.

307	squalene	0.026	0.013	0.025	0.007	0.010	0.022	0.668	0.207		0.788	0.138	0.091	T

Notes:

1) C = control and M = methyl jasmonate treated plants.
2) Tables S1 and S2 compound are listed by retention time.
3) Relative peak areas (RPAs) are calculated using naphthalene-d_8 as the internal standard.
4) STD, compound was positively identified by comparing sample and reference standard fragmentation patterns and retention indexes (RI).
5) T, compound was tentatively identified by comparing sample and commercial library fragmentation patterns and RI's.

Supporting Information Table 2. Herbivore, hormone and control metabolite peak areas.

		E. obliqua			MeJA				Control				
No.	**Compound**	**1**	**2**	**3**	**1**	**2**	**3**	**4**	**1**	**2**	**3**	**4**	**ID**
10	benzene	65935.7	51056.4		16025.1	21105.4	19580.7	21981.9	23227.6	16373.2		16275.4	Std.
26	(2*E*)-pentenal	2549.2	6658.5	15295.1	1997.5	1413.8	1252.8	1265.6	1026.7	1786.9	1459.2	1321.7	T
27	pyridine	4482.7	39631.8	43290.8	23652.4	31628.1	35949.6	15006.7	49999.6	35725.0	39901.9	44040.6	T
29	2-methyl-2-buten-1-ol		6990.0	3401.1									T
31	toluene	44749.8	68605.4	42980.9	35388.6	36614.9	39675.0	37923.7	91450.0	61221.7	81647.0	116003.7	Std.
33	3-methyleneheptane	36055.8	30688.6	10139.1	22378.8	29819.1	29668.8	22508.5					T
36	tiglic aldehyde		57125.1	66260.2	63866.7	82522.9	67259.3	72281.4	68608.1	78934.2	62185.3	62087.0	T
37	3-methyl-2-butenal		55768.6	65545.5	63866.7	82768.4	65710.1	72281.4	65876.2	77250.8	59985.5	61823.4	T
38	(3*Z*)-octene	17137.6	38929.6	20176.0	119487.0	27334.9	23238.1	23409.5					T
42	4-methyl-3-penten-2-one		27269.6	13175.3	16364.2	19960.7	19104.5	21350.3	35228.7	20037.6	17945.8	19577.9	Std.
43	hexanal	25715.9	33852.6	19656.6	26933.0	32455.4	26892.5	26129.0	14117.3	13586.4	15973.7	26819.5	Std.
45	butanoic acid		39438.8	37935.4	40651.1	37678.3	48771.1	43072.7		39268.2	20048.2	43755.2	Std.
47	3,5-dimethyl-2-hexene	10013.0	8145.6	2938.6	6170.6	9041.1	8286.9	6873.0					T
48	3-furaldehyde		8558.7	13810.9	7555.3	7692.0	7337.4	7640.7	14273.3	10897.3	9914.2	9896.3	T
49	isovaleric acid		69038.6	8903.1	25573.6	29098.5	27205.3	36060.5					Std.
53	furfural	5135.0	84763.5	169151.6	69478.0	64413.9	48480.2	82000.1	114159.9	102827.6	127296.5	75810.6	Std.
55	(2*E*)-hexenal		2576.3	2145.3	2963.7	3222.0	3794.0	3150.6					Std.
56	(3*Z*)-hexenol							22324.7	9284.8	9090.1	22610.3		Std.
58	ethylbenzene		10722.7	10528.0	11845.3	12831.7	11745.4	11311.4	15869.3	14392.7	14111.7	42258.8	Std.
61	2-furanmethanol		4912.7	32906.5	15419.3	12374.9	10722.4	13849.3	30668.9	20779.9	26553.0	23000.8	Std.
62	*m*-xylene		13920.8	14525.8	13404.8	15894.1	15566.4	13349.5	22433.0	18769.3	18618.9	23084.5	Std.
63	*p*-xylene		14194.6	15986.3	16300.9	17034.9	16123.4	16174.1	22844.8	19089.5	20336.4	28122.5	Std.
66	*n*-hexanol	1553.8	5904.6	5410.0	4950.3	7000.7	5586.6	4485.2	4456.2	4511.9	4771.8	5368.4	Std.
70	2,6-dimethyl-1,5-heptadiene		6417.8	4430.3	6435.4	4604.1	6001.5	5204.4	7373.5	6901.0	6265.1	8629.3	T
71	3-heptanone		6792.2	5071.3	5407.6	7104.5	6644.3	4910.0	8872.4	6651.5	8079.3	5090.1	Std.
73	2-heptanone		14524.3	2731.2	5853.7	6817.6	6780.1	4484.5					Std.
74	styrene	1027.1	24781.9	23011.3	18622.2	20613.0	21258.2	23513.9	32345.0	22998.0	26268.0	24417.0	T
77	*o*-xylene		6634.8	6466.1	6558.7	7170.8	6550.4	6711.6	8614.3	8387.6	8438.8	10855.4	Std.

78	cyclohexanone		5214.6	5704.6	5146.4	5201.5	4461.9	5213.5	8752.8	9645.4	7600.3	8227.8	Std.
79	pentanoic acid	22878.9	50604.7	62298.2	101295.4	114551.8	25881.2	87768.5	9364.8	89363.2	14421.9	174210.7	T
81	heptanal	2711.7	26699.1	14907.0	22607.3	26491.8	24078.1	20356.2	19277.6	16990.8	23038.3	29747.3	Std.
83	2-acetylfuran				3574.6	3791.3	2938.5	4520.5	6449.3	4402.0	5619.1	5345.6	Std.
84	γ-butyrolactone		7644.7	8262.7	4035.2	3576.8	3630.1	3905.9	7690.9	6632.4	6553.1	7801.0	T
85	2(5*H*)-furanone	8173.0	43430.2	55273.6	28018.7	27906.0	23316.2	31986.6	48938.0	43415.9	42246.7	39507.7	Std.
89	α-pinene	2444.3	4508.6	4771.4	3258.5	2717.7	3035.0	4376.4	4619.9	3869.6	6008.2	4067.4	Std.
94	6-methyl-heptan-2-ol		2754.3	3175.2	3972.4	3164.0	3549.1	3236.7	4419.2	4208.2	3349.7	4097.6	Std.
95	benzaldehyde	4660.3	61402.6	71209.5	78067.3	61735.1	56419.3	68934.4	93607.8	89201.8	90802.6	102189.8	Std.
96	1-ethyl-4-methyl-benzene		2484.9	7222.6	6907.2	7308.3	7264.3	7869.1	12547.5	10496.3	12057.8	12655.3	T
97	5-methylfurfural		1821.5	5453.0	5032.3	4293.3	5056.4	6771.7	5347.1	4977.3	7413.5	5661.3	Std.
98	1-ethyl-3-methyl-benzene		2080.8	2498.9	2319.5	2168.3	2177.9	2261.2	3525.9	3254.6	3388.4	4305.9	T
102	1-octen-3-one	8038.9	4920.0	3428.7	5917.9	3726.7	4874.3	3714.1	5044.7	4009.7	4142.9	4830.8	T
105	1-octen-3-ol		17002.9	19450.9	20022.6	20264.8	28361.2	14440.8	4854.6		3646.5		Std.
107	2,3-octandione		5303.4	2420.1	4474.8	4671.5	6705.0	3231.6	7199.5	8462.1			T
108	6-methyl-5-hepten-2-one		8028.7	18344.8	21325.1	13048.2	15715.7	23986.7	8409.3	8857.5	11450.5	18384.8	Std.
109	dehydroxylinalool 3,7-oxide		3696.6	3918.9	4167.5	3626.7							T
110	phenol	516234.7	641203.1	275131.7	313452.9	381501.5	257174.4	399714.3	22012.6	18685.1	30660.4	10710.4	Std.
111	1-ethyl-2-methyl-benzene		3417.8	4685.2	3541.3	4255.2	3729.4	5187.9	8141.1	7848.7	8284.0	8168.2	T
113	mesitylene	6037.6	17496.4	10157.1	8640.6	9363.4	9846.0	8704.1	12854.3	11568.1	12694.0	10960.5	Std.
114	(*E*)-herboxide	3088.9	15960.0	5506.7	9689.8	9326.3	13278.1	6386.0	5578.3	4867.8	4585.4	6837.9	Std.
115	hexanoic acid	62405.9	30763.3	69918.0	115484.2	92804.9	131078.9	181940.2	9191.1	81250.8	30594.9	208652.5	Std.
117	*n*-octanal		21450.3	15954.2	24041.0	25521.9	18827.7	15232.9	20102.7	21599.0	22472.0	32675.3	Std.
119	(3*Z*)-hexenyl acetate		9144.7	5802.2	5245.0	5032.8	6486.9	113097.1	5874.8	5159.1	6436.5	11449.4	Std.
120	(*Z*)-herboxide		3020.5	4050.1	1954.7	3026.1	2906.3	3412.9	3590.8	3194.0	3705.7	5759.4	Std.
121	δ-3-carene		1462.5	1000.9	1063.3	1013.6	1045.6	1018.6	1180.5	1023.3	1987.3	2524.2	Std.
127	1,2,4-trimethylbenzene		1653.9	1686.1	2310.4	1862.1	1935.0	2341.1	3225.6	3259.7	3378.5	3162.1	T
128	*p*-cymene		44642.5	26732.1	2597.0	4562.3	9586.9	6413.0	6739.5	8938.5	7878.1	8601.0	Std.
129	limonene		343533.6	21949.0	2894.5	8058.6	74077.8	4855.1	8356.9	11227.0	116822.1	41297.0	Std.
131	2-ethyl-1-hexanol	161075.3	1633137.7	1622233.1	1840608.8	2363978.8	6261332.2	1348758.3	198408.4	128285.5	123077.3	95935.1	Std.
132	indane		1653.5	1632.0	2072.8	2260.9	2118.2	1832.8	2141.7	2183.1	2079.6	2818.8	Std.

135	benzyl alcohol	3008.3	7751.9	8080.5	5516.3	5224.5	5441.6	6841.6	7451.2	14021.1	11849.9	9372.1	Std.
136	lavender lactone		1857.1	3526.3	2233.9	1959.8	3346.8	3081.8	3252.3	3555.2	4955.6	7840.6	T
138	1-methyl-2-pyrrolidinone	12664.6	94227.8	86352.7	63406.0	109671.6	91240.8	80203.3	114850.8	97125.4	113678.3	129531.4	Std.
139	benzene acetaldehyde		2989.9	5058.8	3551.3	2846.8	3861.3	4365.8	10821.8	9867.0	9771.8	13446.2	Std.
141	δ-valeryllactone	10078.5	14253.0	15426.7	11907.3	13572.0	12870.5	11503.0	19383.3	16531.4	20755.5	20934.6	T
143	γ-hexalactone	4760.2	9712.3	18293.1	20594.5	20918.7	13218.9	11845.9					Std.
146	γ-terpinene		19236.8	5364.7			4098.3	1147.2					Std.
150	acetophenone	44490.1	465384.7	392530.7	390297.9	389736.7	578368.7	399364.6	602667.4	380792.4	399635.5	335936.4	Std.
152	*m*-cresol	6465.3	11975.1	4637.2	3407.9	5171.5	5741.5	4321.9	9282.2	9293.9	11103.9	8596.1	Std.
154	heptanoic acid	84233.5	26677.2	7947.3	22983.9	37115.6	21426.2	23341.6	2483.5	29965.4	20687.0	21065.1	Std.
158	*p*-cymenene		1606.0	1118.5									T
159	2-phenyl-2-propanol	4673.0	70299.5	26472.1	8800.5	14743.9	13458.2	20017.2	29732.4	18342.1	13409.1	23031.3	Std.
161	*n*-undecane	37621.0	39047.4	18959.6	45385.5	41460.5	39819.2	38637.4	19611.4	25849.8	44402.5	22811.5	Std.
163	*n*-nonanal	2155.9	64038.2	49280.4	68797.4	77973.7	65984.1	57851.1	122833.1	73380.7	99283.3	170593.1	Std.
167	phenyl ethyl alcohol		2117.3	3059.7	3213.1	3966.4	3800.4	3207.1					Std.
168	isophorone		14674.9	19244.4	18851.4	16789.8	19239.4	18652.2	35893.8	34304.7	41374.2	39871.3	Std.
171	2-ethylhexanoic acid	13160.5	17870.3	6248.2	25521.7	29638.9	34376.4	16281.5					Std.
173	benzeneacetonitrile	6083.6	7875.4	7025.9	5676.3	6072.3	9358.3	10049.2		9514.4	8556.8	21022.6	Std.
174	4-*keto*-isophorone		2103.4	2526.8	2396.3	2120.6	2609.8	2279.5	2419.8	3974.3	4789.3	4761.4	Std.
180	2-ethylhexyl acetate		13045.7	7529.0					10667.9	8073.8	8781.3	9027.3	Std.
184	menthol		6750.2	6775.4	4998.1	5565.6	7130.6	6226.8	9077.8	11442.5	11281.6	16183.8	Std.
188	naphthalene	15102.0	55676.8	61543.8	66515.0	58118.1	62846.3	58853.7	81552.3	85179.8	84639.5	78226.3	Std.
193	octanoic acid	66872.6	57911.3	19303.1	128939.4	200317.6	42415.4	97905.5	8012.3	147450.3	48486.3	125497.6	Std.
194	α-terpineol		14528.5	14372.2	4634.3	7163.0	6732.3	8047.6	2507.7	9420.5	3188.5	4874.4	Std.
195	methyl salicylate	3244.7	4027.9	2706.6	6300.2	6307.3	7941.9	18886.4	1601.2	9789.9	12200.0	53459.6	Std.
196	dodecane	7386.3	18201.0	11812.7	37677.3	24677.4	33984.4	31433.8	23958.3	42834.3	91327.9	38109.1	Std.
198	*n*-decanal	2704.5	24012.6	19129.9	31826.8	22468.8	19355.9	23645.5	40854.3	39705.6	54814.9	97392.8	Std.
201	2,3-dihydrobenzofuran		4810.1	5176.4						13064.9	4680.3	4393.1	T
203	methenamine	224967.2	348608.6	116701.2	126542.3	216298.9	70760.4	229984.2	286459.0	74625.9	171312.3	56718.4	T
204	benzothiazole	18637.8	18682.9	25347.2	24801.1	23668.9	26555.0	25649.5	37097.3	41584.6	45257.4	40940.7	Std.
208	quinoline	330184.7	328802.5	267103.8	300735.7	319768.0	279532.4	341979.4	570968.0	319293.9	392563.5	299395.5	Std.

212	carvone		4371.0	6462.9	2417.0	4141.5	4113.2	2466.5	5681.7	5677.2	6964.4	7544.3	Std.
214	2,4-dichlorobenzaldehyde	95329.4	145895.2	133318.6	118587.0	134491.9	111009.2	139356.9	212656.7	203801.0	221397.5	166676.0	T
217	isoquinoline	170632.9	148109.7	100777.7	126368.4	150203.3	109866.1	136606.6	228053.4	137518.1	141591.8	97696.9	T
221	nonanoic acid	26451.7	45317.9	14796.1	78045.6	85804.9	28346.8	62199.9	12046.6	81572.8	50809.1	91355.2	Std.
222	tridecane	2846.7	64323.2	38032.5	219654.7	70412.7	98540.4	107585.5	73041.2	235009.8	617883.7	248084.5	Std.
223	indole	3697.1	5666.2	5503.3	8193.9	8031.0	8414.9	7425.6	7385.2	5339.0	7140.0	5406.0	Std.
227	1-methylnaphthalene	16359.3	25142.5	27304.6	27451.1	23665.2	29453.9	29046.0	36956.1	41103.4	40393.2	40009.9	Std.
228	1-methylisoquinoline	70144.2	72787.2	50324.1	60807.7	70654.9	52393.5	70788.5	103675.9	63201.0	66714.0	45421.4	T
229	2-methylnaphthalene	11381.7	9619.7	12788.3	10831.3	8752.5	11850.4	11810.9	15918.5	16163.5	15684.0	20172.7	T
230	2,6-dichloroacetophenone	10960.2	14053.7	13864.3	16576.6	14567.2	18258.2	17688.5	36389.2	35706.4	39799.6	28469.3	T
231	1(3*H*)-isobenzofuranone	46110.4	37274.4	63223.5	42105.7	67387.9	54562.0	47825.2	78924.3	88539.8	94528.2	71627.1	T
232	5-methylquinoline	39453.9	35531.9	21347.0	27590.3	33693.1	25805.1	33800.8	59980.9	25384.0	31576.0	22318.0	T
234	(3*Z*)-hexenyl hexenoate	1209.6	3562.2	3135.0	4328.0	4286.0	5088.8	5235.8	4615.0	4158.6	4570.5	9398.7	T
235	decanoic acid	11908.7	20022.7	3657.2	25663.4	32369.8	10804.6	22041.8		30857.0	22741.5	50553.8	Std.
236	biphenyl	29473.2	30065.5	35790.5	36161.1	34231.7	38265.9	37771.9	55458.8	60251.3	59989.0	58180.8	T
237	1,4-dimethylnaphthalene	10402.2	11949.9	14915.1	12713.3	12459.0	15415.3	14832.5	19918.4	22365.7	23515.2	24469.6	T
238	β-bourbonene		5386.3	6169.4					7884.7	8807.3	11917.0	7987.8	T
239	tetradecane (C14)		48302.6	21396.0	60466.1	55088.3	53079.8	63975.8	40661.4	119576.8	131596.9	142358.8	Std.
240	(*Z*)-jasmone	2465.9	3984.2	4839.4	5813.5	5563.8	5256.0	5229.2	3160.3	5440.1	3963.8	5685.0	Std.
245	(*E*)-caryophyllene	7545.0	23117.1	21912.6	27884.2	32446.7	28762.1	30905.9	22862.5	25137.4	24503.2	26460.1	Std.
246	1,3-dimethylnaphthalene	13433.7	15174.9	17838.9	14742.0	14506.3	16922.6	17371.8	25150.0	25041.7	26906.9	27272.0	T
247	coumarin	31998.4	49210.6	92371.0	44027.1	43823.3	59936.8	80092.1	23881.5	106357.6	91461.2	67182.6	T
248	geranyl acetone	3905.3	15089.0	2474.8	16138.4	14893.8	16532.3	18037.6	20865.7	23080.2	18774.3	50054.4	Std.
249	γ-decalactone	11331.9	10737.4										Std.
250	*n*-dodecanol	31461.9	44230.0	24312.4	43352.2	49869.7	38546.3	55543.8	43002.1	41099.0	49397.6	79277.0	Std.
251	α-amorphene	2108.7	5283.0	4730.2	5349.2	4418.0	5830.2	5388.2	5489.3	6335.9	6875.7	11908.8	T
252	4-methylbiphenyl	10217.3	9741.9	13546.5	11099.2	11869.5	12888.2	13037.3	17357.9	18939.3	20916.8	21688.8	T
254	pentadecane		189706.9	30981.8	141067.3	131902.4	132259.7	239798.5	74999.8	283560.3	249610.3	291720.5	Std.
255	α-muurolene	1993.3	5340.8	8169.6	6326.5	6458.1	8028.9	10968.3	7291.1	9689.1	7623.1	11216.2	T
258	2,5-*bis*(1,1-dimethylethyl)phenol				18129.8	16370.8	14921.6	13792.4					T
259	γ-cadinene		3189.3	4755.9	5150.5	5563.0	7442.8	6031.1	5193.0	4936.3	5161.3	5569.5	T

260	(*E,E*)-α-farnesene	4576.2	4052.2	4454.1	4544.6	6517.0	11041.5	10770.9	8577.8	6535.9	16508.7	305145.2	T
261	dibenzofuran	30746.5	57645.4	75745.9	62805.4	67092.2	70587.2	69928.4	98197.8	107944.4	117714.8	120878.9	Std.
263	δ-cadinene		4694.1	4679.4	4036.6	3946.3	4566.0	6319.5	5014.2	5562.6	4573.5	6595.6	T
264	*cis*-calamenene	8666.8	20990.7	20759.0	20279.9	16663.1	19612.3	34954.8	26762.0	31063.1	35571.4	29570.6	T
265	dihydroactiniolide	8162.9	12454.0	19239.8	15983.6	19920.8	16527.7	19445.2	23215.0	25156.4	18634.5	23944.9	T
266	α-calacorene	2686.8	3791.8	4290.7	3445.5	4305.0	5186.4	8881.2	6474.5	6269.4	6471.7	5288.2	T
268	dodecanoic acid	540319.4	715349.3	20008.6	1045949.1	901777.3	314890.9	540107.5					Std.
269	fluorene	44308.1	37736.9	51242.9	39863.4	49687.1	45679.9	17774.1	55969.7	63259.9	73276.3	71401.9	T
270	(2*E*)-hexenyl benzoate	19209.0	18785.3	11562.1	15015.1	13816.4	14416.8	20593.8					T
271	fokienol	31685.1	28927.3	38854.5	24297.6	32815.9	32344.6	35339.4	43153.9	39390.8	45297.9	48789.8	T
272	hexadecane (C16)		805627.3		314642.5	275558.5	523289.7	823531.3	131944.2	239372.7	194200.1	265831.6	Std.
274	cedrol	104714.5	144081.6	137765.4	117149.3	134605.1	172058.2	170432.8	144586.0	147956.2	157510.7	173552.6	T
277	*epi*-α-cadinol	2520.9	3741.6	4704.5									T
279	(*Z*)-methyl jasmonate	20047.9	110068.3	71407.2	72841.0	88200.3	121085.2	174867.1	72310.0	62808.2	69634.7	67605.8	Std.
281	α-cadinol	9188.4	36068.0	26898.9	17735.2	28895.9	32864.0	29588.9	31118.3	16825.5	25153.4	33481.9	T
282	cadalene	6179.3	4041.4	8369.5	3994.0	6025.1	4039.5	7688.9	5597.5		5970.8	5117.5	T
286	heptadecane (C17)	19799.6	326286.5	199269.2	204941.1	302365.1	557261.6	417479.8	104007.6	153478.5	161468.0	164873.5	Std.
289	octadecane (C18)	51090.3	151036.3	140262.9	124337.4	169215.0	231030.7	157959.2	59261.6	88665.3	86568.1	103305.1	Std.
291	isopropyl myristate	2123.1	2631.9	1388.2	4374.1	3582.3	3177.7	3497.3	1322.1	1788.0	2687.6	2981.6	Std.
295	*n*-hexadecanol	309821.6	342583.3	67463.7	431270.4	384634.8	345837.8	358047.8	37034.0	59379.4	41960.5	53319.6	Std.
296	methyl palmitate	22548.7	15850.5	5499.2	22634.0	31896.0	9516.8	18607.0	10759.1	24494.8	25353.5	30351.9	Std.
297	nonadecane (C19)				110993.3	141309.9	134508.3	120929.0	47791.8	85624.1	71436.0	90244.3	Std.
300	isopropyl palmitate	25540.0	26953.2	23795.4	46197.8	33635.3	39984.6	12746.7	6799.8	12863.4	11907.0	16538.6	Std.
301	*n*-octadecanol	15464.3	13438.0	11316.0	14510.1	13111.2	15005.4	13265.9	13603.5	9995.3	11221.0	8477.9	T
302	heneicosane	31528.2	26401.3	21763.9	41243.2	52629.2	25823.6	30929.8	21541.3	26836.1	28573.4	33886.3	Std.
303	docosane	49485.4	50597.0	7810.1	55935.6	65727.5	52731.6	41555.2	8945.7	8702.3	15062.5	15660.0	Std.
305	tricosane	19932.5	29910.2	6229.3	12842.5	16367.2	8775.4	8208.5	11800.3	17196.0	18550.7	15271.1	Std.
306	pentacosane	18094.2	41201.0	3422.7	6808.7	5978.0	1057.4	4235.1	11163.9	14337.0	15898.3	15739.1	Std.

Notes:

1) Tables S1 and S2 compounds are listed by retention time.
2) STD, compound was positively identified by comparing sample and reference standard fragmentation patterns and retention indexes (RI).
3) T, compound was tentatively identified by comparing sample and commercial library fragmentation patterns and RI's.