

Table S12. The most important peaks and their VIP values, in PLS-DA models separating SBS cases and controls, with different adsorbents.

Carbopack B		Chromosorb 106		Tenax TA	
Rel RT	VIP	Rel RT	VIP	Rel RT	VIP
156,7	1,661	221,2	1,553	208,7	1,855
243,2	1,555	204,7	1,488	156,7	1,710
150,7	1,359	ΣVOC	1,486	254,2	1,668
153,7	1,291	207,7	1,435	107,7	1,512
123,2	1,271	144,2	1,387	245,7	1,500
284	1,266	131,7	1,366	131,2	1,436
312	1,231	123,2	1,330	194,7	1,396
232,7	1,121	208,2	1,152	229,2	1,380
226,7	1,054	244,2	1,142	201,2	1,366
231,7	0,976	141,7	1,128	243,7	1,347
156,2	0,937	165,2	1,097	238,2	1,332
107,7	0,912	106,7	1,095	174,7	1,301
158,2	0,844	110,7	1,086	168,2	1,298
192,7	0,779	212,2	1,082	215,2	1,285
241,7	0,760	179,7	1,079	160,7	1,269
110,7	0,729	302	1,075	198,2	1,245
84,7	0,701	279	1,063	158,2	1,222
107,2	0,691	57,7	1,053	227,7	1,218
278	0,645	88,7	1,052	149,2	1,203
155,7	0,585	201,2	1,037	258,7	1,200
ΣVOC	0,499	144,7	1,032	170,2	1,183
207,2	0,352	130,2	1,003	205,2	1,153
206,2	0,147	151,2	0,999	72,2	1,142
		225,2	0,998	139,7	1,136
		227,7	0,990	278	1,119
		156,2	0,985	111,2	1,117
		155,7	0,980	151,7	1,106
		301	0,944	226,2	1,103
		320	0,920	124,7	1,091
		241,7	0,917	125,2	1,089
		61,7	0,915	249,2	1,088
		184,2	0,911	186,7	1,078
		206,2	0,905	218,2	1,075
		223,7	0,901	149,7	1,070
		186,2	0,895	162,2	1,065
		211,7	0,890	252,2	1,053
		129,7	0,888	245,2	1,050
		178,7	0,884	258,2	1,048
		164,7	0,880	212,2	1,043
		175,2	0,879	165,2	1,038
		242,2	0,863	128,2	1,034
		172,7	0,854	204,7	1,029

189,7	0,853	200,2	1,029
139,2	0,851	177,7	1,013
56,7	0,848	146,7	1,009
150,2	0,845	142,7	1,007
167,7	0,841	321	0,997
81,7	0,839	231,7	0,993
131,2	0,836	112,2	0,988
259,7	0,832	161,7	0,971
192,7	0,798	148,2	0,970
145,2	0,794	301	0,968
221,7	0,762	111,7	0,966
301	0,758	161,2	0,957
70,7	0,752	107,2	0,950
181,7	0,734	260	0,939
198,2	0,726	147,7	0,936
228,2	0,711	157,7	0,932
151,7	0,699	110,7	0,922
100,2	0,615	252,7	0,918
		100,2	0,916
		145,2	0,905
		216,2	0,903
		129,7	0,889
		169,2	0,871
		128,7	0,858
		241,2	0,858
		184,2	0,856
		167,7	0,852
		156,2	0,838
		259,2	0,827
		211,7	0,825
		241,7	0,805
		254,7	0,800
		139,2	0,751
		223,2	0,735
		153,7	0,733
		222,7	0,718
		207,7	0,705
		92,7	0,641
		221,2	0,630
		155,2	0,607
		196,7	0,595
		144,2	0,569
		121,2	0,553
		189,2	0,535
		160,2	0,515
		234,7	0,504
		212,7	0,457

224,7	0,383
312	0,378
182,2	0,376
150,7	0,280
219,7	0,273
259,7	0,263
311	0,225
225,2	0,192
255,2	0,163
303	0,116