Supplementary Materials

In Silico Infrared Spectroscopy as a Benchmark for Identifying Seized Samples Suspected of being *N*-Ethylpentylone

Caio H. P. Rodrigues, Ricardo de O. Mascarenhas, and Aline T. Bruni

Table S1. Name and code of amphetamines and cathinones used in this work for designing the PLS-DA models.

Code	Name
c01	Cathinone
c02	2-Methylamino-1-phenyl-1-propanone
c03	4-bromocathinone - 2-amino-1-(4-bromophenyl)-propanone
c04	2-amino-1-(4-fluorophenyl)-propanone
c05	2-(methylamino)-1-phenylbutan-1-one
c06	2-(methylamino)-1-(4-methylphenyl)propan-1-one
c07	1-(4-ethylphenyl)-2-(methylamino)propan-1-one
c08	1-(4-methoxyphenyl)-2-(methylamino)propan-1-one
c09	1-(1,3-benzodioxol-5-yl)-2-(methylamino)propan-1-one
c10	1-(1,3-Benzodioxol-5-yl)-2-(methylamino)butan-1-one
c11	1-(4-fluorophenyl)-2-methylaminopropan-1-one
c12	2-(ethylamino)-1-phenylpropan-1-one
c13	2-(ethylamino)-1-(4-methylphenyl)propan-1-one
c14	1-(1,3-benzodioxol-5-yl)-2-(ethylamino)propan-1-one
c15	1-(1,3-benzodioxol-5-yl)-2-(ethylamino)butan-1-one
c16	alpha-pyrrolidinopentiophenone - 1-phenyl-2-(1-pyrrolidinyl)-1-pentanone
c17	1-(4-methylphenyl)-2-(pyrrolidin-1-yl)pentan-1-one
c18	1-(1,3-benzodioxol-5-yl)-2-(pyrrolidin-1-yl)propan-1-one
c19	1-(1,3-benzodioxol-5-yl)-2-(1-pyrrolidinyl)-1-butanone
c20	1-(1,3-benzodioxol-5-yl)-2-(pyrrolidin-1-yl)pentan-1-one
c21	1-(naphthalen-2-yl)-2-(pyrrolidin-1-yl)pentan-1-one
a01	Amphetamine
a02	Methamphetamine
a03	1-(4-bromophenyl)propan-2-amine
a04	1-(4-fluorophenyl)propan-2-amine
a05	*N*-methyl-1-phenylpentan-2-amine
a06	*N*-methyl-1-(4-methylphenyl)propan-2-amine
a07	1-(4-ethylphenyl)-*N*-methylpropan-2-amine
a08	1-(4-methoxyphenyl)-*N*-methylpropan-2-amine
a09	3,4-Methylenedioxymethamphetamine
a10	1-(2*H*-1,3-benzodioxol-5-yl)-*N*-methylbutan-2-amine
a11	1-(4-fluorophenyl)-*N*-methylpropan-2-amine
a12	*N*-ethyl-1-phenylpropan-2-amine
a13	*N*-ethyl-1-(4-methylphenyl)propan-2-amine
a14	1-(2*H*-1,3-benzodioxol-5-yl)-*N*-ethylpropan-2-amine
a15	1-(2*H*-1,3-benzodioxol-5-yl)-*N*-ethylbutan-2-amine
a16	1-(1-phenylpentan-2-yl)pyrrolidine
a17	1-[1-(4-methylphenyl)pentan-2-yl]pyrrolidine
a18	1-[1-(2*H*-1,3-benzodioxol-5-yl)propan-2-yl]pyrrolidine
a19	1-[1-(2*H*-1,3-benzodioxol-5-yl)butan-2-yl]pyrrolidine
a20	1-[1-(2*H*-1,3-benzodioxol-5-yl)pentan-2-yl]pyrrolidine
a21	1-[1-(naphthalen-2-yl)pentan-2-yl]pyrrolidine

Table S2. 20 amphetamines and 20 cathinones available on the SWGDRUG library of monographs.

Code	Name
cm01	Butylone HCl
cm02	Ethylethcathinone HCl
cm03	4-Fluoroisocathinone HCl
cm04	3,4-Methylenedioxypyrovalerone HCl
cm05	4-methyl-alpha-pyrrolidinopropiophenone HCl
cm06	4-Fluoromethcathinone HCl
cm07	3-Ethylmethcathinone HCl
cm08	Cathinone HCl
cm09	2,4-Dimethylmethcathinone HCl
cm10	4-Bromomethcathinone HCl
cm11	alpha-PVP HCl
cm12	N-tert-Butyl-3,4-methylenedioxycathinone HCl
cm13	N-Propyl-3,4-methylenedioxycathinone HCl
cm14	alpha-PPP HCl
cm15	N-Ethylpentylone HCl
cm16	2,3-MDMA HCl
cm17	4-Methoxy-PVP HCl
cm18	Pentylone HCl
cm19	d,l-Methcathinone HCl
cm20	4-methylmethcathinone HCl
am01	2,5-Dimethoxyamphetamine HCl
am02	2,5-Dimethoxy-4-Chloro-amphetamine HCl
am03	4-Fluoroamphetamine HCl
am04	3-Fluoromethamphetamine HCl
am05	d,l-4-Bromo-2,5-dimethoxyamphetamine HCl
am06	3,4-Dimethoxyamphetamine HCl
am07	N-ethylamphetamine HCl
am08	4-Methylamphetamine HCl
am09	N-Butylamphetamine HCl
am10	N-Ethyl-4-methoxyamphetamine HCl
am11	3,4-Methylenedioxymethamphetamine methylene homolog HCl
am12	d-Methamphetamine HCl
am13	N,N-Dimethylamphetamine HCl
am14	N-(2-Methoxyethyl)-3,4-methylenedioxyamphetamine HCl
am15	3,4-methylenedioxyethylamphetamine HCl (MDEA)
am16	N-Hydroxy-3,4-methylenedioxyamphetamine HCl
am17	2-Methoxymethamphetamine HCl
am18	3,4-methylenedioxyamphetamine HCl
am19	para-Methoxymethamphetamine HCl
am20	3,4-methylenedioxydimethylamphetamine HCl

Table S3. 20 adulterants available on the SWGDRUG library of monographs.

Code	Name
dm01	Pregabalin
dm02	Aspirin
dm03	Hydrated creatine
dm04	Ibuprofen
dm05	Nicotinamide
dm06	Phenacetin
dm07	Diphenhydramine HCl
dm08	Paracetamol
dm09	Dihydrated Quinine HCl
dm10	Caffeine
dm11	Levamisol HCl
dm12	Sildenafil citrate
dm13	Papaverine HCl
dm14	Inositol
dm15	Naproxen
dm16	Thiamine HCl
dm17	Promethazine HCl
dm18	Guaifenesin
dm19	Melatonin
dm20	Dipyrone

Table S4. Numerical values obtained by Pearson's correlation for samples evaluated experimentally.

	SWGDRUG	2160	2163	2167	2168	2174	2176	2177	2178	2180	2181A	2181B	2184A	2184B	2221	2177	2225	2228	2229	2230	2231	2232	2233	2234
SW-GDRUG	1.00																							
2160	0.09	1.00																						
2163	0.74	0.56	1.00																					
2167	0.73	0.60	1.00	1.00																				
2168	0.74	0.52	1.00	0.99	1.00																			
2174	0.62	0.75	0.97	0.98	0.95	1.00																		
2176	0.78	0.49	0.99	0.99	0.99	0.94	1.00																	
2177	0.61	0.74	0.97	0.98	0.96	1.00	0.94	1.00																
2178	0.65	0.69	0.98	0.99	0.97	1.00	0.96	0.99	1.00															
2180	0.67	0.66	0.99	0.99	0.98	0.99	0.97	0.99	1.00	1.00														
2181A	0.68	0.66	0.99	0.99	0.98	0.99	0.98	0.99	1.00	1.00	1.00													
2181B	0.45	0.90	0.86	0.88	0.84	0.96	0.82	0.96	0.93	0.92	0.92	1.00												
2184A	0.72	0.58	0.99	0.99	0.98	0.97	0.98	0.97	0.99	0.99	0.99	0.88	1.00											
2184B	0.27	0.97	0.73	0.76	0.69	0.87	0.67	0.87	0.83	0.81	0.81	0.97	0.75	1.00										
2221	0.36	0.94	0.80	0.82	0.77	0.92	0.75	0.92	0.88	0.87	0.86	0.98	0.81	0.98	1.00									
2177	0.61	0.74	0.97	0.98	0.96	1.00	0.94	1.00	0.99	0.99	0.99	0.96	0.97	0.87	0.92	1.00								
2225	0.47	0.88	0.87	0.89	0.85	0.96	0.83	0.96	0.93	0.92	0.92	0.98	0.87	0.95	0.98	0.96	1.00							
2228	0.09	0.99	0.57	0.60	0.53	0.75	0.50	0.75	0.68	0.66	0.66	0.89	0.57	0.96	0.94	0.75	0.89	1.00						
2229	0.64	0.71	0.97	0.98	0.97	0.99	0.96	0.99	0.99	0.99	0.99	0.93	0.96	0.84	0.90	0.99	0.95	0.72	1.00					
2230	0.20	0.99	0.65	0.68	0.62	0.82	0.59	0.81	0.76	0.74	0.74	0.93	0.66	0.98	0.97	0.81	0.93	0.99	0.79	1.00				
2231	0.67	0.66	0.99	0.99	0.98	0.99	0.97	0.99	1.00	1.00	1.00	0.92	0.98	0.81	0.87	0.99	0.92	0.66	0.99	0.74	1.00			
2232	0.59	0.77	0.96	0.96	0.94	1.00	0.93	1.00	0.99	0.98	0.98	0.96	0.95	0.89	0.94	1.00	0.97	0.78	0.99	0.84	0.98	1.00		
2233	0.32	0.95	0.77	0.80	0.74	0.90	0.72	0.90	0.86	0.85	0.84	0.98	0.78	0.99	1.00	0.90	0.98	0.96	0.88	0.98	0.85	0.92	1.00	
2234	0.72	0.59	1.00	1.00	0.99	0.98	0.99	0.98	0.99	0.99	0.99	0.88	0.98	0.75	0.82	0.98	0.89	0.60	0.98	0.68	0.99	0.96	0.80	1.00
2235	0.56	0.79	0.94	0.94	0.92	0.98	0.91	0.99	0.97	0.97	0.96	0.96	0.93	0.90	0.95	0.99	0.98	0.80	0.99	0.86	0.97	0.99	0.93	0.95
2236A	0.76	0.54	0.99	0.99	0.99	0.96	1.00	0.96	0.98	0.98	0.99	0.85	0.99	0.71	0.78	0.96	0.85	0.53	0.96	0.62	0.98	0.94	0.75	0.99
2236B	0.76	0.54	1.00	0.99	1.00	0.96	1.00	0.96	0.98	0.99	0.99	0.85	0.99	0.71	0.78	0.96	0.86	0.54	0.97	0.63	0.98	0.95	0.75	0.99
2237	0.49	0.84	0.89	0.91	0.87	0.97	0.86	0.96	0.96	0.94	0.94	0.98	0.92	0.94	0.95	0.96	0.95	0.82	0.94	0.88	0.94	0.96	0.94	0.90
2238A	0.57	0.80	0.94	0.96	0.93	1.00	0.92	0.99	0.98	0.98	0.98	0.98	0.95	0.91	0.95	0.99	0.98	0.80	0.98	0.86	0.98	1.00	0.93	0.95
2238B	0.67	0.67	0.99	0.99	0.98	0.99	0.97	0.99	1.00	1.00	1.00	0.92	0.99	0.81	0.87	0.99	0.92	0.67	0.99	0.74	1.00	0.98	0.85	0.99
2239	0.67	0.67	0.99	0.99	0.98	0.99	0.97	0.99	1.00	0.99	1.00	0.92	0.98	0.81	0.87	0.99	0.93	0.67	0.99	0.75	1.00	0.98	0.85	0.99
2240	0.72	0.60	1.00	0.99	0.99	0.98	0.99	0.98	0.99	0.99	0.99	0.88	0.99	0.75	0.83	0.98	0.89	0.60	0.98	0.68	0.99	0.97	0.80	0.99
2265	0.65	0.71	0.98	0.99	0.97	1.00	0.96	1.00	1.00	1.00	1.00	0.94	0.98	0.84	0.89	1.00	0.94	0.71	0.99	0.78	0.99	0.99	0.88	0.98
2266	0.70	0.64	0.99	1.00	0.98	0.99	0.98	0.99	0.99	0.99	1.00	0.90	0.98	0.79	0.85	0.99	0.91	0.64	0.99	0.72	1.00	0.98	0.83	1.00
2267	0.68	0.68	0.98	0.99	0.97	0.99	0.97	0.99	1.00	1.00	1.00	0.93	0.99	0.82	0.88	0.99	0.93	0.68	0.99	0.75	0.99	0.98	0.86	0.99
2269	0.75	0.55	1.00	1.00	1.00	0.97	1.00	0.97	0.98	0.99	0.99	0.86	0.99	0.72	0.79	0.97	0.87	0.56	0.97	0.64	0.99	0.95	0.77	1.00
2269B	0.57	0.80	0.94	0.95	0.92	0.99	0.91	0.99	0.98	0.97	0.97	0.98	0.94	0.91	0.95	0.99	0.98	0.81	0.99	0.87	0.97	1.00	0.94	0.95
2269C	0.39	0.93	0.81	0.83	0.78	0.92	0.76	0.92	0.89	0.87	0.87	0.98	0.81	0.98	1.00	0.92	0.98	0.93	0.91	0.97	0.87	0.94	0.99	0.83
2269D	0.44	0.88	0.87	0.89	0.84	0.96	0.82	0.96	0.93	0.92	0.92	0.98	0.86	0.96	0.98	0.96	0.99	0.89	0.94	0.93	0.92	0.97	0.98	0.89
2269E	0.64	0.71	0.98	0.99	0.96	1.00	0.96	1.00	1.00	0.99	1.00	0.94	0.98	0.85	0.90	1.00	0.95	0.71	0.99	0.79	0.99	0.99	0.88	0.98

2270	0.75	0.55	1.00	0.99	1.00	0.96	0.99	0.96	0.97	0.98	0.98	0.85	0.98	0.71	0.79	0.96	0.86	0.56	0.97	0.64	0.99	0.95	0.76	0.99
2271	0.63	0.72	0.98	0.98	0.96	1.00	0.95	1.00	1.00	0.99	0.99	0.95	0.97	0.85	0.91	1.00	0.95	0.73	0.99	0.80	0.99	1.00	0.89	0.98
2273	0.76	0.50	0.99	0.99	1.00	0.94	1.00	0.95	0.96	0.97	0.97	0.82	0.98	0.67	0.76	0.95	0.84	0.51	0.96	0.60	0.98	0.93	0.73	0.99
2274	0.78	0.44	0.99	0.97	0.99	0.92	0.99	0.92	0.94	0.96	0.95	0.78	0.96	0.62	0.71	0.92	0.80	0.45	0.94	0.54	0.96	0.90	0.68	0.98
2275	0.71	0.65	0.98	0.98	0.97	0.98	0.97	0.98	0.98	0.99	0.98	0.90	0.97	0.79	0.86	0.98	0.92	0.66	0.99	0.74	0.99	0.98	0.84	0.98
2276A	0.79	0.39	0.97	0.96	0.99	0.90	0.99	0.90	0.92	0.94	0.94	0.75	0.96	0.58	0.68	0.90	0.77	0.41	0.92	0.50	0.94	0.88	0.64	0.96
2276B	0.75	0.52	1.00	0.99	1.00	0.95	0.99	0.95	0.97	0.98	0.98	0.84	0.98	0.69	0.77	0.95	0.85	0.53	0.97	0.61	0.98	0.94	0.74	0.99
2277B	0.72	0.61	0.99	1.00	0.99	0.98	0.99	0.98	0.99	1.00	1.00	0.90	0.99	0.77	0.83	0.98	0.89	0.61	0.98	0.70	0.99	0.97	0.81	0.99
2279	0.69	0.67	0.98	0.99	0.97	0.99	0.97	0.99	0.99	0.99	0.99	0.92	0.98	0.81	0.87	0.99	0.93	0.67	0.99	0.75	0.99	0.98	0.85	0.99
2280	0.76	0.52	0.99	0.99	1.00	0.96	1.00	0.96	0.97	0.98	0.98	0.84	0.99	0.70	0.77	0.96	0.85	0.52	0.96	0.62	0.98	0.94	0.74	0.99
2282	0.71	0.60	1.00	1.00	0.99	0.98	0.99	0.98	0.99	0.99	0.99	0.89	0.99	0.76	0.83	0.98	0.89	0.61	0.98	0.69	1.00	0.97	0.80	1.00
2284A	0.71	0.60	1.00	1.00	0.99	0.98	0.99	0.98	0.99	0.99	0.99	0.89	0.99	0.76	0.83	0.98	0.89	0.61	0.98	0.69	1.00	0.97	0.80	1.00
2284B	0.74	0.54	0.99	0.99	1.00	0.96	1.00	0.96	0.97	0.98	0.98	0.85	0.99	0.70	0.78	0.96	0.86	0.54	0.97	0.63	0.98	0.94	0.75	0.99
2288	0.71	0.61	0.99	1.00	0.99	0.98	0.99	0.98	0.99	1.00	1.00	0.90	1.00	0.77	0.83	0.98	0.89	0.61	0.98	0.70	0.99	0.97	0.81	0.99
2289	0.78	0.45	0.98	0.98	0.99	0.93	1.00	0.93	0.95	0.96	0.96	0.79	0.98	0.63	0.72	0.93	0.80	0.45	0.94	0.55	0.96	0.91	0.69	0.98
2293	0.60	0.75	0.96	0.97	0.95	1.00	0.93	0.99	0.99	0.98	0.98	0.95	0.96	0.87	0.92	0.99	0.96	0.75	0.99	0.82	0.99	0.99	0.90	0.97
2293B	0.44	0.88	0.87	0.89	0.84	0.96	0.82	0.95	0.93	0.92	0.92	0.98	0.87	0.96	0.98	0.95	0.98	0.89	0.94	0.93	0.92	0.97	0.97	0.88
2297	0.72	0.61	0.99	1.00	0.99	0.98	0.99	0.98	0.99	1.00	1.00	0.89	0.99	0.77	0.84	0.98	0.90	0.61	0.98	0.70	1.00	0.97	0.81	0.99
2300	0.73	0.58	1.00	1.00	0.99	0.97	0.99	0.97	0.99	0.99	0.99	0.88	0.99	0.74	0.81	0.97	0.88	0.58	0.98	0.67	0.99	0.96	0.79	0.99
2357	0.71	0.62	0.99	1.00	0.99	0.98	0.99	0.98	0.99	1.00	1.00	0.90	0.99	0.77	0.84	0.98	0.90	0.62	0.98	0.70	1.00	0.97	0.81	0.99
2358	0.80	0.46	0.98	0.97	0.99	0.93	1.00	0.93	0.95	0.96	0.96	0.80	0.97	0.64	0.73	0.93	0.81	0.47	0.94	0.56	0.96	0.91	0.69	0.97
2372	0.61	0.73	0.97	0.98	0.95	1.00	0.95	0.99	0.99	0.99	0.99	0.95	0.97	0.86	0.91	0.99	0.94	0.73	0.98	0.80	0.99	0.99	0.89	0.97
2374	0.56	0.79	0.93	0.94	0.92	0.98	0.90	0.98	0.96	0.96	0.96	0.96	0.92	0.89	0.94	0.98	0.97	0.80	0.98	0.86	0.96	0.99	0.93	0.94
2376	0.70	0.66	0.99	0.99	0.98	0.99	0.98	0.99	0.99	1.00	0.99	0.92	0.98	0.81	0.87	0.99	0.93	0.67	0.99	0.75	1.00	0.98	0.85	0.99
2414	0.72	0.61	0.99	1.00	0.99	0.98	0.99	0.98	0.99	0.99	1.00	0.89	0.99	0.77	0.84	0.98	0.90	0.61	0.98	0.70	0.99	0.97	0.81	0.99
2417	0.73	0.59	1.00	1.00	0.99	0.98	0.99	0.98	0.99	0.99	0.99	0.88	0.99	0.75	0.82	0.98	0.88	0.59	0.98	0.68	0.99	0.96	0.79	1.00
2426	0.72	0.58	1.00	1.00	1.00	0.97	0.99	0.97	0.99	0.99	0.99	0.87	0.98	0.74	0.82	0.97	0.89	0.59	0.98	0.67	0.99	0.96	0.79	1.00
2429A	0.73	0.55	1.00	0.99	1.00	0.96	0.99	0.97	0.98	0.99	0.99	0.86	0.98	0.72	0.80	0.97	0.87	0.56	0.98	0.65	0.99	0.95	0.77	0.99
2429B	0.68	0.62	0.99	0.99	0.99	0.98	0.98	0.98	0.99	0.99	0.99	0.89	0.98	0.77	0.84	0.98	0.91	0.63	0.99	0.71	1.00	0.98	0.82	0.99

Table 4. *Cont.*

	2235	2236A	2236B	2237	2238A	2238B	2239	2240	2265	2266	2267	2269	2269B	2269C	2269D	2269E	2270	2271	2273	2274	2275	2276A	2276B	2277B
SWG-DRUG																								
2160																								
2163																								
2167																								
2168																								
2174																								
2176																								
2177																								
2178																								
2180																								
2181A																								
2181B																								
2184A																								
2184B																								
2221																								
2177																								
2225																								
2228																								
2229																								
2230																								
2231																								
2232																								
2233																								
2234																								
2235	1.00																							
2236A	0.92	1.00																						
2236B	0.93	1.00	1.00																					
2237	0.96	0.89	0.89	1.00																				
2238A	0.99	0.93	0.94	0.98	1.00																			
2238B	0.97	0.98	0.98	0.95	0.98	1.00																		
2239	0.97	0.98	0.98	0.94	0.98	1.00	1.00																	
2240	0.95	0.99	1.00	0.91	0.96	0.99	0.99	1.00																
2265	0.98	0.97	0.97	0.96	0.99	1.00	1.00	0.99	1.00															
2266	0.96	0.98	0.99	0.93	0.97	1.00	1.00	0.99	0.99	1.00														
2267	0.97	0.98	0.98	0.95	0.98	1.00	0.99	0.99	1.00	0.99	1.00													
2269	0.93	1.00	1.00	0.89	0.94	0.99	0.99	1.00	0.98	0.99	0.98	1.00												
2269B	0.99	0.93	0.93	0.97	1.00	0.98	0.98	0.95	0.99	0.97	0.98	0.94	1.00											
2269C	0.95	0.79	0.79	0.95	0.95	0.87	0.88	0.83	0.90	0.86	0.89	0.80	0.95	1.00										
2269D	0.97	0.85	0.85	0.96	0.97	0.92	0.93	0.88	0.94	0.91	0.92	0.86	0.98	0.98	1.00									

2269E	0.98	0.97	0.97	0.96	0.99	1.00	1.00	0.98	1.00	0.99	0.99	0.98	0.99	0.90	0.95	1.00								
2270	0.94	0.99	0.99	0.88	0.94	0.98	0.98	1.00	0.97	0.99	0.98	1.00	0.93	0.80	0.86	0.97	1.00							
2271	0.98	0.97	0.97	0.96	0.99	0.99	1.00	0.98	1.00	0.99	0.99	0.97	0.99	0.91	0.95	1.00	0.97	1.00						
2273	0.92	0.99	0.99	0.86	0.92	0.97	0.97	0.99	0.96	0.98	0.97	0.99	0.91	0.77	0.83	0.96	1.00	0.96	1.00					
2274	0.88	0.98	0.99	0.82	0.88	0.95	0.95	0.98	0.94	0.96	0.94	0.99	0.88	0.71	0.79	0.93	0.99	0.93	0.99	1.00				
2275	0.97	0.98	0.98	0.91	0.97	0.98	0.98	0.99	0.98	0.98	0.99	0.98	0.96	0.87	0.91	0.98	0.98	0.98	0.97	0.95	1.00			
2276A	0.87	0.98	0.98	0.79	0.86	0.93	0.93	0.97	0.92	0.95	0.93	0.98	0.86	0.68	0.75	0.91	0.98	0.91	0.99	0.99	0.94	1.00		
2276B	0.92	0.99	1.00	0.87	0.93	0.98	0.98	0.99	0.97	0.98	0.97	1.00	0.92	0.78	0.84	0.96	1.00	0.96	1.00	0.99	0.97	0.99	1.00	
2277B	0.95	0.99	0.99	0.93	0.96	0.99	0.99	1.00	0.99	0.99	0.99	0.99	0.96	0.84	0.89	0.99	0.99	0.99	0.98	0.97	0.99	0.96	0.99	1.00
2279	0.97	0.98	0.98	0.93	0.98	0.99	0.99	0.99	0.99	0.99	0.99	0.98	0.97	0.88	0.93	0.99	0.98	0.99	0.97	0.95	0.99	0.93	0.97	0.99
2280	0.92	1.00	1.00	0.88	0.93	0.98	0.98	0.99	0.97	0.99	0.98	1.00	0.92	0.78	0.84	0.97	0.99	0.96	1.00	0.99	0.98	0.98	1.00	0.99
2282	0.95	0.99	1.00	0.91	0.96	0.99	0.99	1.00	0.99	1.00	0.99	1.00	0.96	0.83	0.89	0.99	0.99	0.99	0.99	0.98	0.99	0.96	0.99	1.00
2284A	0.95	0.99	1.00	0.91	0.96	0.99	0.99	1.00	0.99	1.00	0.99	1.00	0.96	0.83	0.89	0.99	0.99	0.99	0.99	0.98	0.99	0.96	0.99	1.00
2284B	0.93	0.99	1.00	0.88	0.93	0.98	0.98	1.00	0.97	0.98	0.98	1.00	0.93	0.79	0.84	0.97	0.99	0.97	1.00	0.99	0.98	0.99	1.00	0.99
2288	0.95	0.99	0.99	0.92	0.96	1.00	0.99	1.00	0.99	0.99	0.99	0.99	0.96	0.84	0.89	0.99	0.99	0.99	0.98	0.97	0.98	0.95	0.99	1.00
2289	0.89	0.99	0.99	0.84	0.89	0.96	0.96	0.98	0.95	0.97	0.96	0.99	0.89	0.72	0.79	0.94	0.98	0.94	0.99	0.99	0.96	0.99	0.99	0.98
2293	0.98	0.95	0.95	0.96	0.99	0.98	0.99	0.97	0.99	0.98	0.99	0.96	0.99	0.93	0.97	0.99	0.95	0.99	0.94	0.91	0.98	0.89	0.95	0.97
2293B	0.97	0.85	0.85	0.96	0.97	0.92	0.92	0.89	0.94	0.90	0.93	0.86	0.97	0.98	1.00	0.94	0.86	0.95	0.83	0.79	0.92	0.75	0.84	0.89
2297	0.95	0.99	0.99	0.92	0.96	0.99	0.99	1.00	0.99	0.99	0.99	1.00	0.96	0.84	0.90	0.99	0.99	0.99	0.99	0.97	0.99	0.96	0.99	1.00
2300	0.94	1.00	1.00	0.91	0.95	0.99	0.99	1.00	0.98	0.99	0.99	1.00	0.95	0.82	0.88	0.98	0.99	0.98	0.99	0.98	0.99	0.97	0.99	1.00
2357	0.96	0.99	0.99	0.92	0.97	1.00	0.99	1.00	0.99	1.00	0.99	1.00	0.96	0.84	0.90	0.99	0.99	0.99	0.99	0.97	0.99	0.96	0.99	1.00
2358	0.90	0.99	0.99	0.83	0.90	0.96	0.96	0.98	0.94	0.97	0.96	0.99	0.89	0.74	0.79	0.94	0.98	0.94	0.99	0.99	0.97	0.99	0.99	0.97
2372	0.98	0.96	0.96	0.96	0.99	0.99	0.99	0.98	0.99	0.98	0.99	0.97	0.99	0.91	0.95	0.99	0.96	0.99	0.95	0.92	0.98	0.90	0.95	0.98
2374	0.99	0.91	0.92	0.95	0.98	0.96	0.96	0.95	0.97	0.95	0.97	0.93	0.98	0.95	0.97	0.97	0.93	0.98	0.91	0.88	0.97	0.85	0.91	0.95
2376	0.97	0.98	0.98	0.93	0.98	0.99	0.99	0.99	0.99	0.99	1.00	0.99	0.97	0.88	0.92	0.99	0.98	0.99	0.98	0.96	1.00	0.94	0.98	0.99
2414	0.95	0.99	0.99	0.92	0.96	0.99	0.99	1.00	0.99	0.99	0.99	0.99	0.96	0.85	0.90	0.99	0.99	0.99	0.98	0.97	0.99	0.96	0.99	1.00
2417	0.94	1.00	1.00	0.91	0.96	0.99	0.99	1.00	0.99	0.99	0.99	1.00	0.95	0.83	0.88	0.98	0.99	0.98	0.99	0.98	0.99	0.96	0.99	1.00
2426	0.95	0.99	0.99	0.90	0.95	0.99	0.99	1.00	0.98	0.99	0.99	1.00	0.95	0.82	0.88	0.98	1.00	0.98	0.99	0.98	0.98	0.97	0.99	0.99
2429A	0.94	0.99	1.00	0.89	0.94	0.98	0.98	1.00	0.98	0.99	0.98	1.00	0.94	0.80	0.86	0.97	1.00	0.97	1.00	0.99	0.98	0.98	1.00	0.99
2429B	0.96	0.98	0.99	0.92	0.96	0.99	0.99	1.00	0.99	0.99	0.99	0.99	0.96	0.85	0.90	0.98	0.99	0.99	0.99	0.97	0.99	0.96	0.99	0.99

Table 4. *Cont.*

	2279	2280	2282	2284A	2284B	2288	2289	2293	2293B	2297	2300	2357	2358	2372	2374	2376	2414	2417	2426	2429A	2429B
SWG-DRUG																					
2160																					
2163																					
2167																					
2168																					
2174																					
2176																					
2177																					
2178																					
2180																					
2181A																					
2181B																					
2184A																					
2184B																					
2221																					
2177																					
2225																					
2228																					
2229																					
2230																					
2231																					
2232																					
2233																					
2234																					
2235																					
2236A																					
2236B																					
2237																					
2238A																					
2238B																					
2239																					
2240																					
2265																					
2266																					
2267																					
2269																					
2269B																					
2269C																					
2269D																					

	2279	2280	2282	2284A	2284B	2288	2289	2293	2293B	2297	2300	2357	2358	2372	2374	2376	2414	2417	2426	2429A	2429B
2269E																					
2270																					
2271																					
2273																					
2274																					
2275																					
2276A																					
2276B																					
2277B																					
2279	1.00																				
2280	0.98	1.00																			
2282	0.99	0.99	1.00																		
2284A	0.99	0.99	1.00	1.00																	
2284B	0.97	1.00	0.99	0.99	1.00																
2288	0.99	0.99	1.00	1.00	0.99	1.00															
2289	0.95	0.99	0.98	0.98	0.99	0.98	1.00														
2293	0.99	0.95	0.97	0.97	0.95	0.98	0.92	1.00													
2293B	0.93	0.84	0.89	0.89	0.84	0.89	0.79	0.97	1.00												
2297	0.99	0.99	1.00	1.00	0.99	1.00	0.98	0.98	0.90	1.00											
2300	0.99	1.00	1.00	1.00	0.99	1.00	0.99	0.97	0.88	1.00	1.00										
2357	0.99	0.99	1.00	1.00	0.99	1.00	0.98	0.98	0.90	1.00	1.00	1.00									
2358	0.95	0.99	0.98	0.98	0.99	0.97	0.99	0.91	0.79	0.98	0.98	0.97	1.00								
2372	0.99	0.96	0.98	0.98	0.96	0.98	0.93	0.99	0.95	0.98	0.98	0.98	0.93	1.00							
2374	0.97	0.91	0.95	0.95	0.92	0.94	0.88	0.99	0.97	0.95	0.94	0.95	0.88	0.98	1.00						
2376	1.00	0.98	0.99	0.99	0.98	0.99	0.96	0.99	0.92	1.00	0.99	1.00	0.96	0.99	0.97	1.00					
2414	0.99	0.99	1.00	1.00	0.99	1.00	0.98	0.98	0.90	1.00	1.00	1.00	0.97	0.98	0.95	1.00	1.00				
2417	0.99	1.00	1.00	1.00	0.99	1.00	0.98	0.97	0.88	1.00	1.00	1.00	0.98	0.98	0.94	0.99	1.00	1.00			
2426	0.99	0.99	1.00	1.00	0.99	0.99	0.98	0.97	0.88	1.00	1.00	1.00	0.98	0.97	0.94	0.99	0.99	1.00	1.00		
2429A	0.98	1.00	1.00	1.00	1.00	0.99	0.99	0.96	0.86	0.99	0.99	0.99	0.99	0.96	0.93	0.99	0.99	0.99	1.00	1.00	
2429B	0.99	0.99	1.00	1.00	0.99	0.99	0.97	0.98	0.90	0.99	0.99	0.99	0.97	0.98	0.96	0.99	0.99	0.99	1.00	0.99	1.00

Table S5. Numerical values obtained by classification using PLS-DA for samples seized in models M1 and M2.

Seized sample	M1	M2
2160	0.802861	1.522480
2163	−0.083072	0.185963
2167	−0.082315	0.152725
2168	−0.103678	0.127541
2174	0.087168	0.434644
2176	−0.121217	0.117482
2177	0.072088	0.379310
2178	0.038394	0.366524
2180	0.034829	0.368271
2181A	0.019486	0.346670
2181B	0.392656	0.938611
2184A	−0.007212	0.285882
2184B	0.583158	1.169147
2221	0.348716	0.850193
2177	0.072088	0.379310
2225	0.166466	0.519228
2228	0.579492	1.118258
2229	0.032015	0.317682
2230	0.490491	1.021487
2231	0.004094	0.294683
2232	0.094478	0.437063
2233	0.352130	0.801815
2234	−0.079796	0.181403
2235	0.193738	0.557645
2236A	−0.094149	0.168379
2236B	−0.108634	0.149299
2237	0.388984	0.954159
2238A	0.144126	0.499034
2238B	0.009323	0.302126
2239	−0.015867	0.258848
2240	−0.043617	0.258870
2265	0.068775	0.396304
2266	−0.038826	0.206105
2267	0.038593	0.356999
2269	−0.092830	0.137142
2269B	0.106019	0.436478
2269C	0.260234	0.731861
2269D	0.126996	0.488243
2269E	0.020858	0.323033
2270	−0.057336	0.255391
2271	0.038380	0.362106
2273	−0.102226	0.169420
2274	−0.158122	0.057466
2275	−0.089185	0.151923
2276A	−0.125673	0.090764
2276B	−0.084535	0.182895
2277B	−0.035327	0.259562
2279	−0.067703	0.236849
2280	−0.095963	0.174937
2282	−0.046389	0.255246
2284A	−0.046389	0.255246
2284B	−0.033239	0.246154
2288	−0.048095	0.244623
2289	−0.169627	0.051199
2293	0.014844	0.365987

2293B	0.149126	0.560541
2297	−0.055766	0.232340
2300	−0.065817	0.219540
2357	−0.014110	0.287086
2358	−0.101535	0.095982
2372	0.059298	0.432811
2374	0.147040	0.502563
2376	−0.024276	0.249570
2414	−0.077333	0.204790
2417	−0.078299	0.203609
2426	−0.071601	0.197531
2429A	−0.043020	0.234559
2429B	−0.017761	0.273661