

Supplementary material

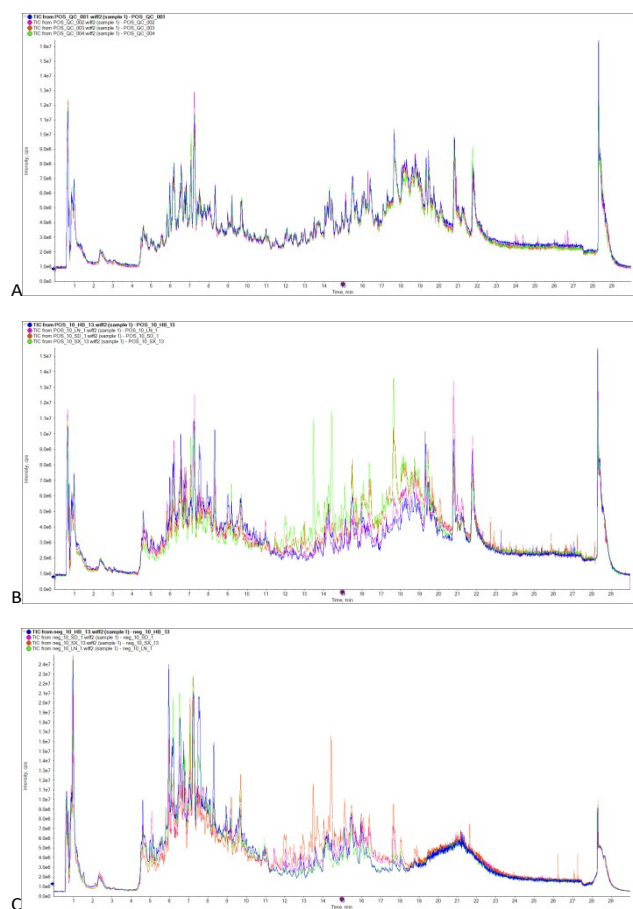


Fig. S1 The TIC Chromatogram of QC(A), different regions in positive(B) and negative(C) ion modes
Different colors represent samples of different regions

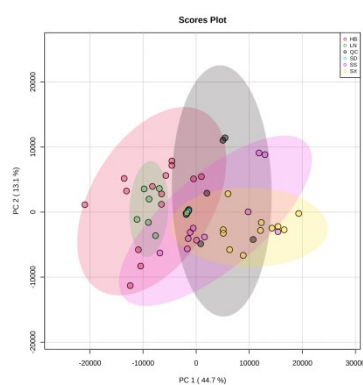


Fig. S2 PCA score plot of 265 compounds of hawthorn leaves.

HB (hebei, red), LN (Liaoning, green), QC (quality control, gray), SD (Shandong, sky blue), SS (commercially, purple), SX (Shanxi, yellow).

Table S1 A total of 233 compounds of hawthorn leaves in positive and negative ion mode

Mode	Name	Formula	RT(min)	Adduct / Charge	Precursor Mass	Fragmentation ions
	Sarcosine	C ₃ H ₇ NO ₂	0.8	[M+H] ⁺	90.055	44.0495(C ₂ H ₆ N ⁺)、44.9971(CHO ₂ ⁺)、45.0335(C ₂ H ₅ O ⁺)
	Alanine	C ₃ H ₇ NO ₂	0.81	[M+H] ⁺	90.055	90.0560(C ₃ H ₇ NO ₂ ⁺)、44.0492(C ₂ H ₆ N ⁺)
	2-Aminoisobutyric acid	C ₄ H ₉ NO ₂	0.82	[M+H] ⁺	104.071	104.0706(C ₄ H ₁₀ NO ₂ ⁺)、60.0808(C ₃ H ₁₀ N ⁺)、58.0651(C ₃ H ₈ N ⁺)、45.0699(C ₃ H ₉ ⁺)、44.9971(CHO ₂ ⁺)、44.0495(C ₂ H ₆ N ⁺)、43.0542(C ₃ H ₇ ⁺)、42.0338(C ₂ H ₄ N ⁺)
	Proline	C ₅ H ₉ NO ₂	0.98	[M+H] ⁺	116.071	70.065(C ₄ H ₈ N ⁺)、43.0540
	Indole	C ₈ H ₇ N	5.37	[M+H] ⁺	118.065	118.0651(C ₈ H ₈ N ⁺)
	Betaine	C ₅ H ₁₁ NO ₂	0.87	[M+H] ⁺	118.086	118.0864(C ₅ H ₁₂ NO ₂ ⁺)、59.0729(C ₂ H ₃ O ₂ ⁻)、58.0647(C ₃ H ₈ N ⁺)
	N-Methyl-a-aminoisobutyric acid	C ₅ H ₁₁ NO ₂	0.87	[M+H] ⁺	118.086	118.0867(C ₅ H ₁₂ NO ₂ ⁺)、117.2002、116.9001、102.0005、88.1003、85.1002、82.4006、73.9009、71.6005、59.2001(C ₂ H ₃ O ₂ ⁻)、58.1009(C ₃ H ₈ N ⁺)、57.2001、56.2003、55.30001、45.8007、44.0002、43.1001
	L-Homoserine	C ₄ H ₉ NO ₃	0.83	[M+H] ⁺	120.066	74.0597(C ₃ H ₈ NO ⁺)、57.0334(C ₃ H ₅ N ⁺)、56.0494(C ₃ H ₆ N ⁺)、46.0285(C ₂ H ₈ N ⁺)、45.0328
	L-Threonine	C ₄ H ₉ NO ₃	0.83	[M+H] ⁺	120.066	74.0597(C ₃ H ₆ NO ₂ ⁺)、73.0157、57.0334(C ₃ H ₅ O ⁺)、56.0894(C ₃ H ₆ N ⁺)、55.0120、29.0833、28.0109
	Phenylacetaldehyde	C ₈ H ₈ O	3.14	[M+H] ⁺	121.065	121.1007(C ₈ H ₉ O ⁺)、105.0697、91.0544(C ₇ H ₇ ⁺)、77.0385(C ₆ H ₅ ⁺)、65.0386、51.0229(C ₄ H ₃ ⁺)、43.0181

4-Hydroxybenzaldehyde	C ₇ H ₆ O ₂	6.53	[M+H] ⁺	123.044	123.0466(C ₇ H ₇ O ₂ ⁺)、79.0547(C ₆ H ₇ ⁺)、77.0397(C ₆ H ₅ ⁺)、67.0536(C ₄ H ₃ O ⁺)、55.0180(C ₃ H ₃ O ⁺)、51.0231、41.0403(C ₂ HO ⁺)
Nicotinamide	C ₆ H ₆ N ₂ O	2.07	[M+H] ⁺	123.055	123.0556(C ₆ H ₇ N ₂ O ⁺)、106.0283(C ₆ H ₄ NO ⁺)、96.0444(C ₅ H ₆ NO ⁺)、81.0697、80.0499(C ₅ H ₅ N ⁺)、77.0386、68.9819、56.9651、53.0385、51.0230、44.9962、41.0384
Nicotinic acid	C ₆ H ₅ NO ₂	0.98	[M+H] ⁺	124.039	124.0309(C ₆ H ₆ NO ₂ ⁺)、122.0269、96.0444、92.0471、80.0490(C ₅ H ₆ N ⁺)、79.0413、78.0470(C ₅ H ₄ N ⁺)、55.0558、53.0384、51.0238、41.0387、39.0216
Picolinic acid	C ₆ H ₅ NO ₂	0.98	[M+H] ⁺	124.039	124.0402(C ₆ H ₆ NO ₂ ⁺)、108.0526(C ₅ H ₆ NO ⁺)、78.0340(C ₅ H ₄ N ⁺)、53.0378(C ₄ H ₅ ⁺)、51.0242(C ₄ H ₃ ⁺)、43.0204
1,3,5-Benzenetriol	C ₆ H ₆ O ₃	4.8	[M+H] ⁺	127.039	127.0396(C ₆ H ₇ O ₃ ⁺)、109.0274(C ₆ H ₅ O ₂ ⁺)、85.0629(C ₄ H ₅ O ₂ ⁺)、81.0700、79.0560、67.0537、56.9671、53.0394、43.0178(C ₂ H ₃ O ⁺)、39.0222
Pyroglutamic acid	C ₅ H ₇ NO ₃	0.82	[M+H] ⁺	130.05	85.0287(C ₄ H ₅ O ₂ ⁺)、84.0444(C ₄ H ₅ NO ⁺)、56.0495(C ₂ H ₂ NO ⁺)、44.0133(CH ₂ NO ⁺)、41.0384(C ₂ HO ⁺)、39.0228
Pipecolic acid	C ₆ H ₁₁ NO ₂	0.73	[M+H] ⁺	130.086	130.0503、102.0542、85.0266(C ₄ H ₅ O ₂ ⁺)、84.0442(C ₅ H ₁₀ N ⁺)、70.9796、56.9649、56.0493(C ₃ H ₆ N ⁺)、44.0129(C ₂ H ₆ N ⁺)、41.0355(C ₃ H ₅ ⁺)、39.0234、30.0346
Mevalonolactone	C ₆ H ₁₀ O ₃	4.69	[M+H] ⁺	131.07	131.0692(C ₆ H ₁₁ O ₃ ⁺)、104.0555、89.0397、84.9597、72.9380、71.0490、67.0544、57.0769(C ₃ H ₅ O ⁺)、53.0369、43.0475、41.0385、38.0158
Isoleucine	C ₆ H ₁₃ NO ₂	2.84	[M+H] ⁺	132.102	86.0960(C ₅ H ₁₂ N ⁺)、69.0697(C ₅ H ₉ ⁺)、57.0560(C ₄ H ₉ ⁺)、45.0332(C ₃ H ₉ ⁺)、44.0492、41.0384(C ₃ H ₅ ⁺)、39.0226
Leucine	C ₆ H ₁₃ NO ₂	3	[M+H] ⁺	132.102	86.0960(C ₅ H ₁₂ N ⁺)、44.0492、43.0539(C ₃ H ₇ ⁺)、41.0384(C ₃ H ₅ ⁺)、39.0226
L-Asparagine	C ₄ H ₈ N ₂ O ₃	0.78	[M+H] ⁺	133.061	116.0329(C ₄ H ₆ NO ₃ ⁺)、87.0558(C ₃ H ₇ N ₂ O ⁺)、74.0235(C ₂ H ₄ NO ₂ ⁺)、70.0283(C ₃ H ₄ NO ⁺)、44.0495(C ₂ H ₆ N ⁺)、

					31.9892
Cinnamaldehyde	C ₉ H ₈ O	6.13	[M+H] ⁺	133.065	133.0650(C ₉ H ₉ O ⁺)、132.0564、118.0398、115.0544、105.0695(C ₈ H ₉ ⁺)、103.0553(C ₈ H ₇ ⁺)、94.0426、91.0556、79.0531(C ₆ H ₇ ⁺)、77.0381(C ₆ H ₅ ⁺)、73.0648、65.0383、55.0176(C ₃ H ₃ O ⁺)、51.0227(C ₄ H ₃ ⁺)、45.0336、
L-Aspartic acid	C ₄ H ₇ NO ₄	0.82	[M+H] ⁺	134.045	88.0389(C ₃ H ₆ NO ₂ ⁺)、75.0271(C ₃ H ₇ O ₂ ⁺)、74.0234(C ₂ H ₄ NO ₂ ⁺)、71.0309(C ₃ H ₃ O ₂ ⁺)、70.0293(C ₃ H ₄ NO ⁺)、46.0286(C ₂ H ₈ N ⁺)、43.0176(C ₂ H ₃ O ⁺)、43.0053、31.9903(CH ₆ N ⁺)
Adenine	C ₅ H ₅ N ₅	1.57	[M+H] ⁺	136.062	136.0618(C ₅ H ₆ N ₅ ⁺)、119.0351(C ₅ H ₃ N ₄ ⁺)、109.0103(C ₄ H ₅ N ₄ ⁺)、94.0394(C ₄ H ₂ N ₃ ⁺)、32.0243、72.9370、65.0132、55.0132、40.0180
Anisaldehyde	C ₈ H ₈ O ₂	4.82	[M+H] ⁺	137.06	137.0593(C ₆ H ₉ O ₂ ⁺)、122.0355、95.0844(C ₆ H ₇ O ⁺)、94.0414、91.0545(C ₆ H ₃ O ⁺)、81.0701(C ₅ H ₅ O ⁺)、77.3082(C ₆ H ₅ ⁺)
Trigonelline	C ₇ H ₇ NO ₂	0.97	[M+H] ⁺	138.055	138.0554(C ₇ H ₈ NO ₂ ⁺)、120.0443(C ₇ H ₆ NO ⁺)、94.0654(C ₆ H ₈ N ⁺)、93.0579、92.0495(C ₆ H ₆ N ⁺)、80.0486(C ₅ H ₆ N ⁺)、78.0342(C ₅ H ₄ N ⁺)、65.0385、53.0383、42.0335(C ₂ H ₄ N ⁺)、39.0227
Tyramine	C ₈ H ₁₁ NO	3.17	[M+H] ⁺	138.091	121.0647(C ₈ H ₉ O ⁺)、103.0535(C ₆ H ₇ ⁺)、95.0838(C ₆ H ₇ O ⁺)、93.0688(C ₇ H ₉ ⁺)、91.0539(C ₇ H ₇ ⁺)、82.0746、77.0388(C ₆ H ₅ ⁺)、68.0575(C ₄ H ₆ N ⁺)、58.0745、54.0438、51.0234、41.0403(C ₂ HO ⁺)
Stachydrine	C ₇ H ₁₃ NO ₂	0.98	[M+H] ⁺	144.102	144.1023(C ₇ H ₁₄ NO ₂ ⁺)、102.0530(C ₄ H ₈ NO ₂ ⁺)、98.0956(C ₆ H ₁₂ N ⁺)、84.0808、72.0805、58.0649(C ₃ H ₈ N ⁺)、42.0339(C ₂ H ₄ N ⁺)
4-Guanidinobutanoic acid	C ₅ H ₁₁ N ₃ O ₂	0.99	[M+H] ⁺	146.092	146.0961(C ₅ H ₁₂ N ₃ O ₂ ⁺)、111.0560 (C ₅ H ₇ N ₂ O ⁺)、104.0708(C ₄ H ₁₀ NO ₂ ⁺)、87.0446(C ₄ H ₇ O ₂ ⁺)、86.0601(C ₄ H ₈ NO ⁺)、69.0334(C ₄ H ₅ O ⁺)、60.0557(CH ₆ N ₃ ⁺)、56.0495(C ₃ H ₆ N ⁺)、45.0334(C ₂ H ₅ O ⁺)、

					44.0127(C ₂ H ₆ N ⁺) 、 43.0178(C ₂ H ₃ O ⁺) 、 41.0384(C ₃ H ₅ ⁺) 、 39.0225
L-Glutamine	C ₅ H ₁₀ N ₂ O ₃	0.82	[M+H] ⁺	147.076	130.0497(C ₅ H ₈ NO ₃ ⁺) 、 84.0439(C ₄ H ₆ NO ⁺) 、 56.0491(C ₃ H ₆ N ⁺) 、 41.0383(C ₂ HO ⁺)
Glutamic acid	C ₅ H ₉ NO ₄	0.84	[M+H] ⁺	148.06	102 、 0551(C ₄ H ₈ NO ₂ ⁺) 、 85.0477(C ₄ H ₅ O ₂ ⁺) 、 84.0443(C ₄ H ₆ NO ⁺) 、 57.0523(C ₃ H ₅ O ⁺) 、 56.0496(C ₃ H ₆ N ⁺) 、 41.0386(C ₂ HO ⁺) 、 39.0229
Anise oil	C ₁₀ H ₁₂ O	6.57	[M+H] ⁺	149.096	149.0247 、 131.0857 、 128.0601 、 121.0299 、 115.0538 、 107.0530 、 103.0553 、 93.0704 、 91.0545 、 80.0312 、 77.0388 、 73.0853 、 65.0392 、 59.0488 、 51.0248 、 45.0341 、 41.0383 、 39.0225
L-Carvone	C ₁₀ H ₁₄ O	6.47	[M+H] ⁺	151.112	
Guanine	C ₅ H ₅ N ₅ O	4.52	[M+H] ⁺	152.057	152.0574(C ₅ H ₆ N ₅ O ⁺) 、 135.0301(C ₅ H ₃ N ₄ O ⁺) 、 110.0362 、 92.0549 、 59.0480
Methyl 4-hydroxybenzoate	C ₈ H ₈ O ₃	6.89	[M+H] ⁺	153.055	121.0288(C ₇ H ₅ O ₂ ⁺) 、 107.0852(C ₇ H ₇ O ⁺) 、 97.0650 、 91.0535 、 79.0546(C ₆ H ₇ ⁺) 、 67.0541 、 65.0382 、 39.0221
p-Menthone	C ₁₀ H ₁₆ O	8.2	[M+H] ⁺	153.127	135.1143 、 109.1020 、 107.0859 、 97.0644 、 91.0543 、 81.0693 、 77.0387 、 67.0542 、 55.0542(C ₄ H ₇ ⁺) 、 43.0537 、 41.0382 、 39.0231
Camphor	C ₁₀ H ₁₆ O	9.06	[M+H] ⁺	153.127	153.1267(C ₁₀ H ₁₇ O ⁺) 、 107.0915 、 97.0657 、 91.0541 、 81.0701 、 77.0369 、 67.0545 、 55.0533 、 43.0175 、 41.0380 、 39.0234
2-Pyrocatechuic acid	C ₇ H ₆ O ₄	4.96	[M+H] ⁺	155.034	137.0237(C ₇ H ₅ O ₃ ⁺) 、 111.0435(C ₆ H ₇ O ₂ ⁺) 、 109.0285(C ₆ H ₅ O ₂ ⁺) 、 93.0349(C ₆ H ₅ O ⁺) 、 81.0337 、 68.9983(C ₃ HO ₂ ⁺) 、 65.0382 、 55.0171 、 53.0385 、 41.0382 、 39.0225
.beta.-Resorcylic acid	C ₇ H ₆ O ₄	4.96	[M+H] ⁺	155.034	137.0237(C ₇ H ₅ O ⁺) 、 109.0285 、 96.0200 、 93.0349(C ₆ H ₅ O ⁺) 、 81.0337 、 79.0563 、 68.9983 、 65.0382 、

					55.0171 、 53.0385 、 43.0172 、 41.0382 、 39.0225
Gentisic acid	C ₇ H ₆ O ₄	4.98	[M+H] ⁺	155.034	137.0237(C ₇ H ₅ O ₃ ⁺) 、 109.0285(C ₆ H ₅ O ₂ ⁺) 、 96.0200 、 93.0349(C ₆ H ₅ O ⁺) 、 81.0337 、 79.0563 、 68.9983(C ₃ HO ₂ ⁺) 、 65.0382 、 55.0171 、 53.0385 、 43.0172(C ₂ H ₃ O ⁺) 、 41.0382(C ₂ HO ⁺) 、 39.0225
3,5-Dihydroxybenzoic acid	C ₇ H ₆ O ₄	5.14	[M+H] ⁺	155.034	137.0239(C ₇ H ₅ O ₃ ⁺) 、 119.0535(C ₇ H ₃ O ₂ ⁺) 、 107.0123 、 95.0866(C ₆ H ₇ O ⁺) 、 81.0726 、 67.0541 、 55.0175 、 41.0389
Histidine	C ₆ H ₉ N ₃ O ₂	0.74	[M+H] ⁺	156.077	110.0718 、 95.0603 、 93.0447 、 85.0754 、 83.0607 、 82.0529 、 66.0343 、 56.0486 、 54.0336 、 41.0384 、 39.0242
6-Methylcoumarin	C ₁₀ H ₈ O ₂	6.13	[M+H] ⁺	161.06	161.0604(C ₁₀ H ₉ O ₂ ⁺) 、 143.0494 、 142.0405 、 133.0651(C ₉ H ₉ O ⁺) 、 131.0504 、 115.0543 、 105.0708 、 103.0541 、 89.0386 、 77.0391 、 65.0382 、 55.0185
L-Carnitine	C ₇ H ₁₅ NO ₃	0.84	[M+H] ⁺	162.112	162.1118 、 103.03888 、 85.0286 、 60.0804 、 43.0177
Trans-3-Coumaric acid	C ₉ H ₈ O ₃	6.08	[M+H] ⁺	165.055	147.0439 、 119.0493 、 95.0488 、 91.0541 、 89.0387 、 65.0385
Methionine sulfoxide	C ₅ H ₁₁ NO ₃ S	0.87	[M+H] ⁺	166.053	149.0256(C ₅ H ₉ O ₃ S ⁺) 、 102.0554 、 84.0465 、 75.0261 、 74.0238 、 69.0352 、 65.0057 、 56.0495 、 46.0282 、 43.0178
Phenylalanine	C ₉ H ₁₁ NO ₂	4.73	[M+H] ⁺	166.086	120.0810(C ₈ H ₁₀ N ⁺) 、 103.0543(C ₈ H ₇ ⁺) 、 93.0699(C ₇ H ₉ ⁺) 、 91.0550(C ₇ H ₇ ⁺) 、 79.0547(C ₆ H ₇ ⁺) 、 77.0383(C ₆ H ₅ ⁺)
Griffonilide	C ₈ H ₈ O ₄	4.58	[M+H] ⁺	169.05	127.0078(C ₇ H ₁₁ O ₂ ⁺) 、 123.0082(C ₇ H ₇ O ₂ ⁺) 、 107.0804(C ₆ H ₃ O ₂ ⁺) 、 97.030095.0126 、 91.0524 、 69.0334 、 56.9644(C ₃ H ₅ O ⁺) 、 55.0553(C ₃ H ₃ O ⁺) 、 43.0173 、 39.0228

Homogentisic acid	C ₈ H ₈ O ₄	4.62	[M+H] ⁺	169.05	141.0202、127.0065(H ₇ O ₃ ⁺)、123.0443(C ₇ H ₇ O ₂ ⁺)、107.0865(C ₇ H ₇ O ⁺)、95.0491(C ₆ H ₇ O ⁺)、91.0540(C ₆ H ₃ O ⁺)、 77.0372、67.0536、65.293、55.0183、41.0386(C ₂ HO ⁺)
Vanillic acid	C ₈ H ₈ O ₄	4.95	[M+H] ⁺	169.05	151.0391(C ₈ H ₇ O ₃ ⁺)、141.0553、136.0206、127.0078(C ₆ H ₇ O ₃ ⁺)、123.0086(C ₇ H ₇ O ₂ ⁺)、105.0685(C ₇ H ₅ O ⁺)、 93.0342(C ₆ H ₅ O ⁺)、81.0660、67.0631、65.0383、56.9625(C ₃ H ₅ O ⁺)、43.0172(C ₂ H ₃ O ⁺)、41.0384(C ₂ HO ⁺)、 39.0224
Pyridoxine	C ₈ H ₁₁ NO ₃	2.24	[M+H] ⁺	170.081	170.0863、152.070、134.0596(C ₈ H ₈ NO ⁺)、124.054、106.6050、93.0586、77.0392、65.0381、56.9637、 53.0385、41.0381
Vitamin B6	C ₈ H ₁₁ NO ₃	2.32	[M+H] ⁺	170.081	170.0863、152.070、134.0596(C ₈ H ₈ NO ⁺)、124.054、106.6050、93.0586、77.0392、65.0381、56.9637、 53.0385、41.0381
Trans-Aconitic acid	C ₆ H ₆ O ₆	2.4	[M+H] ⁺	175.024	139.0034(C ₆ H ₃ O ₄ ⁺)、111.0074(C ₅ H ₃ O ₃ ⁺)、68.9971、55.0175、43.0176(C ₂ H ₃ O ⁺)
L(+)-Arginine	C ₆ H ₁₄ N ₄ O ₂	0.75	[M+H] ⁺	175.119	175.1192(C ₆ H ₁₅ N ₄ O ₂ ⁺)、130.0972、116.0697(C ₅ H ₁₄ N ₃ ⁺)、70.0650(C ₄ H ₈ N ⁺)、60.0556(CH ₆ N ₃ ⁺)、 43.0293(CH ₃ N ₂ ⁺)、38.9631
Indoleacetic acid	C ₁₀ H ₉ NO ₂	6.6	[M+H] ⁺	176.071	130.0648(C ₉ H ₈ N ⁺)、117.0568、103.0536、102.0469(C ₄ H ₈ NO ₂ ⁺)、77.0386(C ₆ H ₅ ⁺)、41.0378(C ₂ HO ⁺)
Ascorbic acid	C ₆ H ₈ O ₆	2.17	[M+H] ⁺	177.039	159.0762(C ₆ H ₇ O ₅ ⁺)、149.0248(C ₅ H ₉ O ₅ ⁺)、129.0224(C ₅ H ₅ O ₄ ⁺)、128.9514、121.1015(C ₄ H ₉ O ₄ ⁺)、 105.0708(C ₃ H ₅ O ₄ ⁺)、97.0277(C ₄ HO ₃ ⁺)、95.1026、84.9601(C ₃ HO ₃ ⁺)、77.0385(C ₃ H ₉ O ₂ ⁺)、72.9373(C ₃ H ₅ O ₂ ⁺)、 69.0349、57.0337(C ₂ HO ₂ ⁺)、43.0176(C ₂ H ₃ O ⁺)、39.0230
Hymecromone	C ₁₀ H ₈ O ₃	6.15	[M+H] ⁺	177.055	159.0429(C ₁₀ H ₇ O ₂ ⁺)、149.0587(C ₉ H ₉ O ₂ ⁺)、131.0486(C ₉ H ₇ O ⁺)、115.0541、107.0493(C ₆ H ₃ O ₂ ⁺)、105.0694、 103.0541、91.0549(C ₆ H ₃ O ⁺)、79.0555、77.0380、55.0182

Esculetin	C ₉ H ₆ O ₄	6.44	[M+H] ⁺	179.034	179.0374(C ₉ H ₇ O ₄ ⁺)、151.0387(C ₈ H ₇ O ₃ ⁺)、137.0584(C ₈ H ₈ O ₂ ⁺)、133.0292(C ₈ H ₅ O ₂ ⁺)、123.0446(CC ₇ H ₇ O ₂ ⁺)、107.0498(C ₆ H ₃ O ₂ ⁺)、105.0345、103.0565、95.0494、89.0405、79.0569、77.0398、65.0393、55.0173(C ₃ H ₃ O ⁺)、51.0245、43.0170
Daphnetin	C ₉ H ₆ O ₄	6.44	[M+H] ⁺	179.034	179.0374(C ₉ H ₇ O ₄ ⁺)、151.0387、137.0584、133.0292、123.0446(C ₆ H ₃ O ₃ ⁺)、107.0498、105.0345、103.0565、95.0494、89.0405、79.0569、77.0398、65.0393、55.0173、51.0245、43.0170
Coniferyl aldehyde	C ₁₀ H ₁₀ O ₃	4.6	[M+H] ⁺	179.07	147.0440(C ₉ H ₇ O ₂ ⁺)、137.0608、119.0497、105.0682、94.0491、91.0547(C ₆ H ₃ O ⁺)、77.0375、65.0388、57.0698(C ₃ H ₅ O ⁺)
Mellein	C ₁₀ H ₁₀ O ₃	6.15	[M+H] ⁺	179.07	
4-Methoxycinnamic acid	C ₁₀ H ₁₀ O ₃	18.6	[M+H] ⁺	179.07	179.1644(C ₁₀ H ₁₁ O ₃ ⁺)、161.0617(C ₁₀ H ₉ O ₂ ⁺)、150.1219、133.0638(C ₉ H ₉ O ⁺)、118.0418、105.0693(C ₈ H ₉ ⁺)、103.0549(C ₈ H ₇ ⁺)、91.0541(C ₆ H ₃ O ⁺)、90.0466、89.0381、79.0573(C ₆ H ₇ ⁺)、45.0337(CHO ₂ ⁺)、38.9628
Caffeic acid	C ₉ H ₈ O ₄	5.46	[M+H] ⁺	181.05	163.0388(C ₉ H ₉ O ₄ ⁺)、151.0373、145.0289、135.0443、117.0334、107.0490、93.0338、89.0387、77.0391、63.0230、54.9472(C ₃ H ₃ O ⁺)、39.0236
L-Tyrosine	C ₉ H ₁₁ NO ₃	3.12	[M+H] ⁺	182.081	165.5070(C ₉ H ₉ O ₃ ⁺)、145.9049、136.0770(C ₈ H ₁₀ NO ⁺)、123.0515、119.0494、118.0689、109.0638、95.0486(C ₆ H ₇ O ⁺)、91.0546(C ₇ H ₇ ⁺)、77.0382(C ₆ H ₅ ⁺)、65.0387、51.0223、43.0180
Sorbitol	C ₆ H ₁₄ O ₆	0.87	[M+H] ⁺	183.086	111.0446、99.0444、87.0444、85.0285、83.0489、81.0338、69.0330、61.0281、57.0333、53.0384、45.0332、43.0175、41.0384
Angelicin	C ₁₁ H ₆ O ₃	6.14	[M+H] ⁺	187.039	

Indoleacrylic acid	C ₁₁ H ₉ NO ₂	5.34	[M+H] ⁺	188.071	188.0728(C ₁₁ H ₁₀ NO ₂ ⁺)、170.061、146.0609、143.0736、142.0650、118.0653、117.0571、115.0548、 91.0541、90.0472
N-Acetylglutamic acid	C ₇ H ₁₁ NO ₅	3.01	[M+H] ⁺	190.071	148.0614(C ₅ H ₁₀ NO ₄ ⁺)、130.0500(C ₅ H ₈ NO ₃ ⁺)、102.0548(C ₄ H ₈ NO ₂ ⁺)、84.0443(C ₄ H ₆ NO ⁺)、56.0490、 43.0180(C ₂ H ₃ O ⁺)
Citric acid	C ₆ H ₈ O ₇	2.39	[M+H] ⁺	193.034	139.0025、129.0188(C ₅ H ₅ O ₄ ⁺)、111.0077、87.0072(C ₃ H ₃ O ₃ ⁺)、68.9968、43.0175(C ₂ H ₃ O ⁺)
Senkyunolide A	C ₁₂ H ₁₆ O ₂	6.83	[M+H] ⁺	193.122	193.1584(C ₁₂ H ₁₇ O ₂ ⁺)、175.1488(C ₁₂ H ₁₅ O ⁺)、165.1649、137.0978、135.1164、133.1002、123.0855、 119.0853、109.1010、99.0803、91.0548、79.0540、67.0544、65.0406、57.0704、55.0543、43.0178、 41.0385
Sedanolide	C ₁₂ H ₁₈ O ₂	10.99	[M+H] ⁺	195.138	163.0406、135.0433、131.0855、121.1004、111.0781(C ₇ H ₁₁ O ⁺)、105.0703、97.0664、93.0705、 91.0545、83.0500(C ₆ H ₁₁ ⁺)、81.0698(C ₆ H ₉ ⁺)、79.0538(C ₆ H ₇ ⁺)、76.9589、67.0543、65.0377、55.0541、 43.0180(C ₃ H ₇ ⁺)
Cantharidin	C ₁₀ H ₁₂ O ₄	5.9	[M+H] ⁺	197.081	179.0661(C ₁₀ H ₁₁ O ₃ ⁺)、151.0393(C ₉ H ₁₁ O ₂ ⁺)、149.0613、123.0433(C ₈ H ₁₁ O ⁺)、108.0207、93.0335、 73.0287(C ₄ H ₉ O ⁺)、65.0374、55.0167、41.0377
L-Acetylcarnitine	C ₉ H ₁₇ NO ₄	1	[M+H] ⁺	204.123	204.0873(C ₉ H ₁₈ NO ₄ ⁺)、158.0825(C ₈ H ₁₆ NO ₂ ⁺)、138.0639、126.0557(C ₇ H ₁₂ NO ⁺)、114.0554(C ₆ H ₁₂ NO ⁺)、 103.0393(C ₄ H ₇ O ₃ ⁻)、102.0537(C ₅ H ₁₂ NO ⁺)、86.0605(C ₅ H ₁₂ N ⁺)、70.0655、68.051、57.0336(C ₂ HO ₂ ⁻)、 44.0490(C ₂ H ₆ N ⁺)、43.0546(C ₂ H ₃ O ⁺)
L-Tryptophan	C ₁₁ H ₁₂ N ₂ O ₂	5.34	[M+H] ⁺	205.097	188.071(C ₁₁ H ₁₀ NO ₂ ⁺)、170.0606(C ₁₁ H ₈ NO ⁺)、159.0920(C ₁₀ H ₁₁ N ₂ ⁺)、146.0597(C ₁₀ H ₁₂ N ⁺)、 144.0812(C ₁₀ H ₁₀ N ⁺)、118.0651(C ₈ H ₈ N ⁺)、117.0572、115.0542、91.0539

Patchouli alcohol (loss H2O)	C ₁₅ H ₂₄	17.23	[M+H] ⁺	205.195	205.1421(C ₁₅ H ₂₅ ⁺)、189.1090(C ₁₄ H ₂₁ ⁺)、163.9890、149.0228、135.1160、121.1020、95.0864、93.0692、 81.0697、67.0529、57.0699(C ₄ H ₉ ⁺)、55.0543(C ₄ H ₇ ⁺)、41.0380(C ₃ H ₅ ⁺)
Xanthurenic acid	C ₁₀ H ₇ NO ₄	4.98	[M+H] ⁺	206.045	206.0459(C ₁₀ H ₈ NO ₄ ⁺)、160.0401(C ₉ H ₆ NO ₂ ⁺)、132.0465、111.0094、77.0404、58.0644、46.0641 206.0809(C ₁₁ H ₁₂ NO ₃ ⁺)、188.0424(C ₁₁ H ₁₀ NO ₂ ⁺)、178.0659(C ₉ H ₈ NO ₃ ⁺)、170.0605(C ₁₁ H ₈ NO ⁺)、
Indolelactic acid	C ₁₁ H ₁₁ NO ₃	6.18	[M+H] ⁺	206.081	162.0623(CH ₁₂ NO ⁺)、160.0495(C ₁₀ H ₁₀ NO ⁺)、159.0425、144.0539(C ₁₀ H ₁₀ N ⁺)、132.08506(C ₉ H ₁₀ N ⁺)、 130.0651(C ₉ H ₈ N ⁺)、118.0656(C ₈ H ₈ N ⁺)、116.0583(C ₈ H ₆ N ⁺)、115.0546(C ₅ H ₇ O ₃ ⁺)、105.0698、 94.0414(C ₆ H ₈ N ⁺)、91.0541(C ₃ H ₇ O ₃ ⁺)、77.0373(C ₆ H ₅ ⁺)、55.0180(C ₄ H ₅ ⁺)
α-Asarone	C ₁₂ H ₁₆ O ₃	10.4	[M+H] ⁺	209.117	209.1567(C ₁₂ H ₁₇ O ₃ ⁺)、192.9951、191.1443、177.9175、173.1306、158.1169、145.1009(C ₁₀ H ₉ O ⁺)、 135.0806(C ₈ H ₇ O ₂ ⁺)、121.1014、107.0850、91.0537、81.0690、77.0391、69.0335、55.0175(C ₃ H ₃ O ⁺)、 41.0379(C ₃ H ₅ ⁺)
Germacrone	C ₁₅ H ₂₂ O	15.36	[M+H] ⁺	219.174	219.1744(C ₁₅ H ₂₃ O ⁺)、203.1446(C ₁₄ H ₁₉ O ⁺)、189.1262(C ₁₃ H ₁₇ O ⁺)、177.279(C ₁₂ H ₁₇ O ⁺)、163.1070(C ₁₁ H ₁₅ O ⁺)、 135.0810、133.11005、131.0864、119.0863、115.0546、91.0548、81.0698(C ₆ H ₉ ⁺)、77.0391、 57.0703(C ₄ H ₉ ⁺)、55.0537(C ₄ H ₇ ⁺)、41.0384(C ₃ H ₅ ⁺)
Pantothenic acid	C ₉ H ₁₇ NO ₅	4.95	[M+H] ⁺	220.118	220.1826(C ₉ H ₁₈ NO ₅ ⁺)、205.1579、185.0533、177.1281、157.0502、145.1003、129.0610、 98.9747(C ₅ H ₇ O ₂ ⁺)、95.0497、91.0541(C ₄ H ₁₁ O ₂ ⁺)、57.0713(C ₃ H ₅ O ⁺)、43.0172(C ₂ H ₃ O ⁺)
Monobutyl phthalate	C ₁₂ H ₁₄ O ₄	12.24	[M+H] ⁺	223.096	207.0326(C ₁₂ H ₁₁ O ₄ ⁺)、191.0018(C ₁₁ H ₁₁ O ₃ ⁺)、149.0231(C ₈ H ₅ O ₃ ⁺)、121.0285(C ₇ H ₅ O ₂ ⁺)、93.0335、65.0387
Fraxinellone	C ₁₄ H ₁₆ O ₃	8.26	[M+H] ⁺	233.117	189.0582(C ₁₁ H ₉ O ₃ ⁺)、173.1307、163.1144、159.0784、149.1018、129.0709、115.0533、105.0698、 93.0715、91.0524、77.0412、73.274、55.0533、41.0387(C ₃ H ₅ ⁺)

Muscone	C ₁₆ H ₃₀ O	18.76	[M+H] ⁺	239.237	239.0877(C ₁₆ H ₃₁ O ⁺)、211.0864(C ₁₄ H ₂₇ O ⁺)、109.1011、95.0848、89.0603、71.0849(C ₅ H ₁₁ ⁺)、 57.0698(C ₄ H ₉ ⁺)、43.0541(C ₃ H ₇ ⁺)
Sclareolide	C ₁₆ H ₂₆ O ₂	16.87	[M+H] ⁺	251.201	251.2009(C ₁₆ H ₂₇ O ₂ ⁺)、215.1797、209.1503(C ₁₃ H ₂₁ O ₂ ⁺)、168.9092(C ₁₀ H ₁₇ O ₂ ⁺)、149.0227、 137.0600(C ₁₀ H ₁₇ ⁺)、121.1017、109.1004、95.0853、81.0700、67.0543、55.0535(C ₄ H ₇ ⁺)、43.0177(C ₂ H ₃ O ⁺)
Glycerophosphocholine	C ₈ H ₂₀ NO ₆ P	0.84	[M+H] ⁺	258.11	258.1097(C ₈ H ₂₁ NO ₆ P ⁺)、184.0739(C ₅ H ₁₃ O ₅ P ⁺)、166.0635(C ₄ H ₉ NO ₄ P ⁺)、125.0003(C ₂ H ₆ O ₄ P ⁺)、 104.1071(C ₅ H ₁₄ NO ⁺)、86.0964(C ₅ H ₁₂ N ⁺)、60.0809(C ₃ H ₁₀ N ⁺)、45.0335(C ₂ H ₅ O ⁺)
Glucose 1-phosphate	C ₆ H ₁₃ O ₉ P	1.01	[M+H] ⁺	261.037	261.1384(C ₆ H ₁₄ O ₉ P ⁺)、243.0353(C ₆ H ₁₂ O ₈ P ⁺)、215.0433(C ₅ H ₁₂ O ₇ P ⁺)、181.0612(C ₆ H ₁₃ O ₆ ⁺)、 169.0329(C ₃ H ₆ O ₆ P ⁺)、155.0196、115.0390、109.0131、98.9844、85.0291、81.0336、69.0336、 57.0356、43.0191(C ₂ H ₃ O ⁺)
Mannose 6-phosphate	C ₆ H ₁₃ O ₉ P	1.02	[M+H] ⁺	261.037	261.1384、243.0353、215.0433(C ₅ H ₁₂ O ₇ P ⁺)、181.0612、169.0329、155.0196、115.0390、109.013、 198.9844、85.0291、81.0336、69.0336、57.0356、43.0191
Glucose 6-phosphate	C ₆ H ₁₃ O ₉ P	1.03	[M+H] ⁺	261.037	261.1384、243.0353、215.0433(C ₅ H ₁₂ O ₇ P ⁺)、181.0612、169.0329、155.0196、115.0390、109.0131、 98.9844、85.0291、81.0336、69.0336、57.0356、43.0191
Adenosine	C ₁₀ H ₁₃ N ₅ O ₄	4.49	[M+H] ⁺	268.104	136.0617(C ₅ H ₆ N ₅ ⁺)、119.0355(C ₅ H ₃ N ₄ ⁺)
Inosine	C ₁₀ H ₁₂ N ₄ O ₅	4.55	[M+H] ⁺	269.088	
Naringenin	C ₁₅ H ₁₂ O ₅	8.28	[M+H] ⁺	273.076	273.0748(C ₁₅ H ₁₃ O ₅ ⁺)、197.1381、153.0188(C ₇ H ₅ O ₄ ⁺)、151.0430(C ₈ H ₇ O ₃ ⁺)、147.0459(C ₉ H ₇ O ₂ ⁺)、 123.0444(C ₇ H ₇ O ₂ ⁺)、121.0287(C ₇ H ₅ O ₂ ⁺)、119.0490(C ₈ H ₇ O ⁺)、107.0487(C ₇ H ₇ O ⁺)、91.0549、 77.0382(C ₆ H ₅ ⁺)、68.9965(C ₄ H ₅ O ⁺)、43.0174(C ₂ H ₃ O ⁺)

Phloretin	C ₁₅ H ₁₄ O ₅	8.63	[M+H] ⁺	275.091	169.0497(C ₈ H ₉ O ₄ ⁺) 、 107.0491(C ₇ H ₇ O ⁺)
Alpha-Linolenic acid	C ₁₈ H ₃₀ O ₂	18.07	[M+H] ⁺	279.232	279.0942(C ₁₈ H ₃₁ O ₂ ⁺) 、 201.0469 、 149.0234(C ₁₁ H ₁₇ ⁺) 、 137.1327(C ₁₀ H ₁₇ ⁺) 、 123.1170(C ₉ H ₁₅ ⁺) 、 109.1012(C ₈ H ₁₃ ⁺) 、 95.0855(C ₇ H ₁₁ ⁺) 、 81.0696(C ₆ H ₉ ⁺) 、 67.0539(C ₅ H ₇ ⁺) 、 55.0541(C ₄ H ₇ ⁺)
Guanosine	C ₁₀ H ₁₃ N ₅ O ₅	4.52	[M+H] ⁺	284.099	152.0569(C ₅ H ₆ N ₅ O ⁺) 、 135.0308(C ₅ H ₃ N ₄ O ⁺) 、 110.0345(C ₄ H ₄ N ₃ O ⁺)
Fisetin	C ₁₅ H ₁₀ O ₆	5.57	[M+H] ⁺	287.055	287.0562(C ₁₅ H ₁₁ O ₆ ⁺) 、 213.0568 、 189.0568 、 163.0338(C ₉ H ₇ O ₃ ⁺) 、 137.0240(C ₇ H ₅ O ₂ ⁺) 、 125.0601 、 111.1179(C ₆ H ₇ O ₂ ⁺) 、 69.0685
Kaempferol	C ₁₅ H ₁₀ O ₆	7.02	[M+H] ⁺	287.055	287.0561(C ₁₅ H ₁₁ O ₆ ⁺) 、 259.0640(C ₁₄ H ₁₁ O ₅ ⁺) 、 231.0640 、 213.0577 、 165.0174(C ₉ H ₉ O ₃ ⁺) 、 163.0195 、 152.0735 、 121.0286 、 111.0053(C ₆ H ₇ O ₂ ⁺) 、 93.0313(C ₆ H ₅ O ⁺) 、 69.0723(C ₄ H ₅ O ⁺)
Luteolin	C ₁₅ H ₁₀ O ₆	7.03	[M+H] ⁺	287.055	287.0561 、 259.0640 、 231.0640 、 213.0577 、 165.0174 、 163.0195 、 152.0735 、 121.0286 、 111.0053 、 93.0313 、 69.0723
Kaempferol	C ₁₅ H ₁₀ O ₆	8.1	[M+H] ⁺	287.055	287.0553(C ₁₅ H ₁₁ O ₆ ⁺) 、 259.0638(C ₁₄ H ₁₁ O ₅ ⁺) 、 215.1314 、 165.0175(C ₉ H ₉ O ₃ ⁺) 、 153.0184(C ₇ H ₅ O ₄ ⁺) 、 137.0238(C ₇ H ₅ O ₃ ⁺) 、 121.0291 、 68.9969(C ₄ H ₅ O ⁺) 、 43.0169(C ₂ H ₃ O ⁺)
Eriodictyol	C ₁₅ H ₁₂ O ₆	7.73	[M+H] ⁺	289.071	289.0741(C ₁₅ H ₁₃ O ₆ ⁺) 、 171.1368 、 163.0398(C ₉ H ₇ O ₃ ⁺) 、 153.0178(C ₇ H ₅ O ₄ ⁺) 、 135.0459(C ₈ H ₇ O ₂ ⁺) 、 123.0440(C ₇ H ₇ O ₂ ⁺) 、 111.0432(C ₆ H ₇ O ₂ ⁺) 、 93.0327(C ₆ H ₅ O ⁺) 、 55.0174
Epicatechin	C ₁₅ H ₁₄ O ₆	6.52	[M+H] ⁺	291.086	207.0654(C ₁₁ H ₁₁ O ₄ ⁺) 、 179.0709 、 165.0550(C ₉ H ₉ O ₃ ⁺) 、 161.0598 、 147.0438 、 139.0382(C ₇ H ₇ O ₃ ⁺) 、 123.0435(C ₇ H ₇ O ₂ ⁺) 、 119.0492 、 111.0440(C ₆ H ₇ O ₂ ⁺)
Catechin	C ₁₅ H ₁₄ O ₆	6.52	[M+H] ⁺	291.086	207.0654(C ₁₁ H ₁₁ O ₄ ⁺) 、 179.0709 、 165.0550(C ₉ H ₉ O ₃ ⁺) 、 161.0598 、 147.0438 、 139.0382(C ₇ H ₇ O ₃ ⁺) 、

					123.0435(C ₇ H ₇ O ₂ ⁺)、119.0492、111.0440
Sphinganine	C ₁₈ H ₃₉ NO ₂	13.1	[M+H] ⁺	302.305	302.3056(C ₁₈ H ₄₀ NO ₂ ⁺)、284.2954(C ₁₈ H ₃₈ NO ⁺)、258.2808(C ₁₆ H ₃₆ NO ⁺)、121.1044、106.0862(C ₄ H ₁₂ NO ₂ ⁺)、 88.0758(C ₄ H ₁₀ NO ⁺)、70.0651、57.0695(C ₄ H ₉ ⁺)、43.0541(C ₃ H ₇ ⁺)
Ellagic acid	C ₁₄ H ₆ O ₈	7.54	[M+H] ⁺	303.014	303.0503(C ₁₄ H ₇ O ₆ ⁺)、257.0454(C ₁₃ H ₅ O ₆ ⁺)、229.0504、201.556、165.0190、153.0189、137.0236、 121.0290
Quercetin	C ₁₅ H ₁₀ O ₇	7.55	[M+H] ⁺	303.05	303.0503(C ₁₅ H ₁₁ O ₇ ⁺)
Dihydroquercetin	C ₁₅ H ₁₂ O ₇	5.77	[M+H] ⁺	305.066	259.0877、231.0656、213.0541、189.0555、167.0388(C ₈ H ₇ O ₄ ⁺)、153.0201(C ₇ H ₅ O ₄ ⁺)、149.0324、 123.0453(C ₇ H ₇ O ₂ ⁺)、119.0868、97.0276
Isorhamnetin	C ₁₆ H ₁₂ O ₇	7.88	[M+H] ⁺	317.066	317.0789(C ₁₆ H ₁₃ O ₇ ⁺)、302.0412、285.0352(C ₁₅ H ₉ O ₆ ⁺)、257.0508、229.0610、217.0561(C ₁₁ H ₅ O ₅ ⁺)、 203.0313、183.0410(C ₉ H ₁₁ O ₄ ⁺)、153.0175(C ₇ H ₅ O ₄ ⁺)、139.0402(C ₇ H ₇ O ₃ ⁺)、98.9757(C ₅ H ₇ O ₂ ⁺)、38.9621
Salidroside +NH3	C ₁₄ H ₂₀ O ₇ .NH ₃	5.46	[M+H] ⁺	318.155	211.0784(C ₁₁ H ₁₅ O ₄ ⁺)、187.0790、157.0657、145.0508(C ₆ H ₉ O ₄ ⁺)、127.0392、121.0652(C ₈ H ₉ O ⁺)、 109.0291(C ₇ H ₉ O ⁺)、97.0298、85.0285、69.0329(C ₄ H ₅ O ⁺)、61.0271(C ₂ H ₅ O ₂ ⁺)、55.0173
Berberine	C ₂₀ H ₁₇ NO ₄	9.23	[M+H] ⁺	336.123	336.12300(C ₂₀ H ₁₈ NO ₄ ⁺)、320.0951(C ₁₉ H ₁₄ NO ₄ ⁺)、306.0815(C ₁₈ H ₁₂ NO ₄ ⁺)、278.0853、122.9554(C ₇ H ₇ O ₂ ⁺)
Esculin hydrate	C ₁₅ H ₁₆ O ₉	5.58	[M+H] ⁺	341.087	179.0342、163.0382、133.0281、123.0445
Alpha-Lactose	C ₁₂ H ₂₂ O ₁₁	0.99	[M+H] ⁺	343.123	163.0604(C ₆ H ₁₁ O ₅ ⁺)、145.0498(C ₆ H ₉ O ₄ ⁺)、127.0393、115.0393、109.0294、97.0287、91.0382(C ₃ H ₇ O ₃ ⁺)、 85.0286、69.0331、61.2086(C ₂ H ₅ O ₂ ⁺)、43.0532(C ₂ H ₃ O ⁺)

Maltitol	C ₁₂ H ₂₄ O ₁₁	0.95	[M+H] ⁺	345.139	183.0872(C ₅ H ₁₅ O ₆ ⁺)、165.0761(C ₆ H ₁₃ O ₅ ⁺)、148.0598、147.0650(C ₆ H ₁₁ O ₄ ⁺)、129.0548、127.0382、 111.0444、99.0440、83.0494、81.0328、69.0336、57.0330、43.0179(C ₂ H ₃ O ⁺)
Adenosine monophosphate	C ₁₀ H ₁₄ N ₅ O ₇ P	2.28	[M+H] ⁺	348.07	252.9952(C ₆ H ₁₀ N ₂ O ₇ P ⁺)、176.9879、136.0617(C ₅ H ₆ N ₅ ⁺)、98.9841(H ₄ PO ₄ ⁺)
Chlorogenic acid	C ₁₆ H ₁₈ O ₉	5.96	[M+H] ⁺	355.102	163.0383(C ₉ H ₇ O ₃ ⁺)、145.0280(C ₉ H ₅ O ₂ ⁺)、135.0438(C ₈ H ₇ O ₂ ⁺)、117.0334(C ₈ H ₅ O ⁺)、89.0388(C ₃ H ₅ O ₃ ⁺)
Sweroside	C ₁₆ H ₂₂ O ₉	6.51	[M+H] ⁺	359.134	
Riboflavin	C ₁₇ H ₂₀ N ₄ O ₆	6.45	[M+H] ⁺	377.146	377.1463(C ₁₇ H ₂₁ N ₄ O ₆ ⁺)、359.0725(C ₁₇ H ₁₉ N ₄ O ₅ ⁺)、243.0882(C ₁₂ H ₁₁ N ₄ O ₂ ⁺)、198.0667、172.0878、 137.0594(C ₅ H ₁₃ O ₄ ⁺)、73.0292(C ₃ H ₅ O ₂ ⁺)、45.0330(C ₂ H ₅ O ⁺)
Vitamin B2	C ₁₇ H ₂₀ N ₄ O ₆	6.46	[M+H] ⁺	377.146	377.1463(C ₁₇ H ₂₁ N ₄ O ₆ ⁺)、243.0882(C ₁₂ H ₁₁ N ₄ O ₂ ⁺)、198.0667、172.0878、137.0594(C ₅ H ₁₃ O ₄ ⁺)
Vitamin D2	C ₂₈ H ₄₄ O	20.06	[M+H] ⁺	397.346	
7-Oxocholesterol	C ₂₇ H ₄₄ O ₂	21.46	[M+H] ⁺	401.341	401.3457(C ₂₇ H ₄₅ O ₂ ⁺)、383.336(C ₂₇ H ₄₃ O ⁺)、365.3180、257.2322、235.1459、201.0262、175.1142、 159.1193、123.0212(C ₈ H ₁₁ O ⁺)、95.0865、81.0698、71.0843(C ₅ H ₁₁ ⁺)、57.0685(C ₄ H ₉ ⁺)
Nodakenin	C ₂₀ H ₂₄ O ₉	9.21	[M+H] ⁺	409.149	
Puerarin	C ₂₁ H ₂₀ O ₉	7.13	[M+H] ⁺	417.118	417.1746(C ₂₁ H ₂₁ O ₉ ⁺)、371.1391(C ₂₀ H ₁₉ O ₇ ⁺)、285.1327(C ₁₃ H ₁₇ O ₇ ⁺)、251.0954、239.9817、201.0158、 163.0394(C ₉ H ₇ O ₃ ⁺)、145.1000(C ₆ H ₉ O ₄ ⁺)、125.0988、98.9744
Kaempferol 3-alpha-L-arabinofuranoside	C ₂₀ H ₁₈ O ₁₀	5.88	[M+H] ⁺	419.097	419.1552(C ₂₀ H ₁₉ O ₁₀ ⁺)、287.0566(C ₁₅ H ₁₁ O ₆ ⁺)、177.0902(C ₉ H ₅ O ₄ ⁺)、149.0278(C ₅ H ₉ O ₅ ⁺)、121.0286(C ₄ H ₉ O ₅ ⁺)、 109.0280(C ₆ H ₅ O ₂ ⁺)、85.2081、57.0665、41.0388(C ₂ HO ⁺)

ADP	C ₁₀ H ₁₅ N ₅ O ₁₀ P ₂	4.37	[M+H] ⁺	428.037	102.1283
Isovitexin	C ₂₁ H ₂₀ O ₁₀	7.42	[M+H] ⁺	433.113	433.1135(C ₂₁ H ₂₁ O ₁₀ ⁺)、415.1035(C ₂₁ H ₁₉ O ₉ ⁺)、397.0926(C ₂₁ H ₁₇ O ₈ ⁺)、367.0822(C ₁₇ H ₁₉ O ₉ ⁺)、337.0715、 323.0920(C ₁₅ H ₁₅ O ₈ ⁺)、313.0709(C ₁₇ H ₁₃ O ₆ ⁺)、284.0685、283.0605(C ₁₆ H ₁₁ O ₅ ⁺)
Vitexin	C ₂₁ H ₂₀ O ₁₀	7.42	[M+H] ⁺	433.113	433.1135(C ₂₁ H ₂₁ O ₁₀ ⁺)、415.1035(C ₂₁ H ₁₉ O ₉ ⁺)、397.0926(C ₂₁ H ₁₇ O ₈ ⁺)、367.0822(C ₁₇ H ₁₉ O ₉ ⁺)、337.0715、 323.0920(C ₁₅ H ₁₅ O ₈ ⁺)、313.0709(C ₁₇ H ₁₃ O ₆ ⁺)、284.0685、283.0605(C ₁₆ H ₁₁ O ₅ ⁺)
Naringenin-7-O-glucoside	C ₂₁ H ₂₂ O ₁₀	8.28	[M+H] ⁺	435.129	273.0770(C ₁₂ H ₁₇ O ₇ ⁺)、153.0184(C ₅ H ₁₃ O ₅ ⁺)、147.0441(C ₅ H ₇ O ₅ ⁺)
Betulin	C ₃₀ H ₅₀ O ₂	19.72	[M+H] ⁺	443.388	443.3372(C ₃₀ H ₅₁ O ₂ ⁺)、425.3804(C ₃₀ H ₄₉ O ⁺)、395.3712(C ₂₈ H ₄₃ O ⁺)、245.2279、235.2052(C ₁₆ H ₂₇ O ⁺)、 217.1966、191.1809、135.1168、121.1021、95.0852
Uvaol	C ₃₀ H ₅₀ O ₂	20.61	[M+H] ⁺	443.388	443.3338(C ₃₀ H ₅₁ O ₂ ⁺)、425.3823(C ₃₀ H ₄₉ O ⁺)、407.3589(C ₃₀ H ₄₇ ⁺)、383.3381(C ₂₇ H ₄₃ O ⁺)、356.1104、 325.2974、245.2019、235.2090(C ₁₆ H ₂₇ O ⁺)、203.1817、191.1803、161.1311、149.1324、121.1012、 109.1013、93.0703、69.0702(C ₅ H ₉ ⁺)、43.0548(C ₃ H ₇ ⁺)
Luteoloside	C ₂₁ H ₂₀ O ₁₁	5.55	[M+H] ⁺	449.108	287.0549(C ₁₅ H ₁₁ O ₆ ⁺)
Cyanidin-3-O-glucoside	C ₂₁ H ₂₀ O ₁₁	5.55	[M+H] ⁺	449.108	287.0549(C ₁₅ H ₁₁ O ₆ ⁺)
Astragalin	C ₂₁ H ₂₀ O ₁₁	8.1	[M+H] ⁺	449.108	287.0551(C ₁₅ H ₁₁ O ₆ ⁺)
Orientin	C ₂₁ H ₂₀ O ₁₁	6.84	[M+H] ⁺	449.108	431.1005(C ₂₁ H ₂₁ O ₁₁ ⁺)、413.0915(C ₂₁ H ₁₉ O ₁₀ ⁺)、395.0766、353.0666、329.0671(C ₁₇ H ₁₃ O ₇ ⁺)、 299.0559(C ₁₆ H ₁₁ O ₆ ⁺)、297.0757(C ₁₂ H ₁₅ O ₈ ⁺)、287.0565(C ₁₅ H ₁₁ O ₆ ⁺)
Homoorientin (Isoorientin)	C ₂₁ H ₂₀ O ₁₁	6.84	[M+H] ⁺	449.108	431.1005(C ₂₁ H ₂₁ O ₁₁ ⁺)、413.0915(C ₂₁ H ₁₉ O ₁₀ ⁺)、395.0766、353.0666、329.0671(C ₁₇ H ₁₃ O ₇ ⁺)、

					299.0559(C ₁₆ H ₁₁ O ₆ ⁺)、297.0757(C ₁₂ H ₁₅ O ₈ ⁺)、287.0565(C ₁₅ H ₁₁ O ₆ ⁺)
Betulonicacid	C ₃₀ H ₄₆ O ₃	18.3	[M+H] ⁺	455.352	455.3543(C ₃₀ H ₄₇ O ₃ ⁺)、437.3423、409.3479(C ₂₉ H ₄₅ O ⁺)、391.3368、315.2315、301.2171、275.2014、255.2113、247.1699(C ₁₆ H ₂₃ O ₂ ⁺)、203.1792、201.1641、189.1639、161.1332、147.1165、133.1014、119.0861、95.0858、81.0696、55.0548
Ursolic Acid	C ₃₀ H ₄₈ O ₃	18.58	[M+H] ⁺	457.368	457.3679(C ₃₀ H ₄₉ O ₃ ⁺)、439.3587(C ₃₀ H ₄₇ O ₂ ⁺)、411.3627(C ₂₈ H ₄₃ O ₂ ⁺)、393.3144、351.2006、315.2697(C ₂₁ H ₃₁ O ₂ ⁺)、275.1974(C ₁₉ H ₃₁ O ⁺)、229.1965、217.1941、203.1794、191.1802、189.1645、163.1470、135.1166、119.0851、109.0864、93.0688、81.0696、55.0535(C ₄ H ₇ ⁺)、43.0197(C ₂ H ₃ O ⁺)
Betulinic acid	C ₃₀ H ₄₈ O ₃	18.58	[M+H] ⁺	457.368	457.3679(C ₃₀ H ₄₉ O ₃ ⁺)、439.3587(C ₃₀ H ₄₇ O ₂ ⁺)、411.3627(C ₂₈ H ₄₃ O ₂ ⁺)、393.3144、351.2006、315.2697(C ₂₁ H ₃₁ O ₂ ⁺)、275.1974(C ₁₉ H ₃₁ O ⁺)、229.1965、217.1941、203.1794、191.1802、189.1645、163.1470、135.1166、119.0851、109.0864、93.0688、81.0696、55.0535(C ₄ H ₇ ⁺)、43.0197(C ₂ H ₃ O ⁺)
Luteolin-7-O-β-D-glucuronide	C ₂₁ H ₁₈ O ₁₂	7.76	[M+H] ⁺	463.087	463.1252(C ₂₁ H ₁₉ O ₁₂ ⁺)、445.1152(C ₂₁ H ₁₇ O ₁₁ ⁺)、427.1057(C ₂₁ H ₁₅ O ₁₀ ⁺)、353.1005(C ₁₅ H ₁₃ O ₁₀ ⁺)、343.0828(C ₁₇ H ₁₁ O ₈ ⁺)、313.0713(C ₁₆ H ₁₃ O ₆ ⁺)、287.0553(C ₁₅ H ₁₁ O ₆ ⁺)、245.0470(C ₁₃ H ₉ O ₅ ⁺)、153.0193(C ₈ H ₉ O ₃ ⁺)、133.0299(C ₈ H ₅ O ₂ ⁺)
Hyperin	C ₂₁ H ₂₀ O ₁₂	7.54	[M+H] ⁺	465.103	303.0493(C ₁₅ H ₁₁ O ₇ ⁺)、91.0389
Isoquercitrin	C ₂₁ H ₂₀ O ₁₂	7.54	[M+H] ⁺	465.103	303.0493(C ₁₅ H ₁₁ O ₇ ⁺)、91.0389
Sumaresinolic acid	C ₃₀ H ₄₈ O ₄	16.4	[M+H] ⁺	473.363	455.3512(C ₃₀ H ₄₇ O ₃ ⁺)、437.3420(C ₃₀ H ₄₅ O ₂ ⁺)、409.3462(C ₂₉ H ₄₅ O ⁺)、391.3368(C ₂₄ H ₃₉ O ₄ ⁺)、215.1795、201.1644、191.1797、189.1635、133.1015、119.0855、105.0693
Corosolic acid	C ₃₀ H ₄₈ O ₄	16.25	[M+H] ⁺	473.363	473.3563(C ₃₀ H ₄₉ O ₄ ⁺)、437.3403(C ₃₀ H ₄₅ O ₂ ⁺)、409.3472(C ₂₉ H ₄₅ O ⁺)、391.3362(C ₂₄ H ₃₉ O ₄ ⁺)、

					355.2715(C ₂₄ H ₃₅ O ₂ ⁺)、287.2010(C ₁₉ H ₂₇ O ₂ ⁺)、261.1841、229.1972、205.1582、203.1799、201.1646、 189.1636、187.1487(C ₁₁ H ₂₃ O ₂ ⁺)、177.1629、135.1179、107.0856、95.0858
Asiatic acid	C ₃₀ H ₄₈ O ₅	14.94	[M+H] ⁺	489.357	489.2793(C ₃₀ H ₄₉ O ₅ ⁺)、471.3458(C ₃₀ H ₄₇ O ₄ ⁺)、453.3365(C ₃₀ H ₄₅ O ₃ ⁺)、435.3723(C ₂₆ H ₄₃ O ₅ ⁺)、 407.3312(C ₂₄ H ₃₉ O ₅ ⁺)、395.2976、371.2930(C ₂₅ H ₃₉ O ₂ ⁺)、341.2487、301.2171(C ₂₀ H ₂₉ O ₂ ⁺)、261.1837、 247.1690(C ₁₆ H ₂₃ O ₂ ⁺)、213.1631、201.1643(C ₁₁ H ₂₁ O ₃ ⁺)、187.1479(C ₁₀ H ₁₉ O ₃ ⁺)、135.1172(C ₆ H ₁₅ O ₃ ⁺)、 119.0855(C ₅ H ₁₁ O ₃ ⁺)、107.0856、83.0488(C ₆ H ₁₁ ⁺)、69.0348(C ₅ H ₉ ⁺)
Maltotriose	C ₁₈ H ₃₂ O ₁₆	1.53	[M+H] ⁺	505.176	293.0071(C ₁₁ H ₁₇ O ₉ ⁺)、163.0610(C ₆ H ₁₁ O ₅ ⁺)、145.0504(C ₆ H ₉ O ₄ ⁺)、127.0429、97.0280、85.0294
Raffinose	C ₁₈ H ₃₂ O ₁₆	1.55	[M+H] ⁺	505.176	293.0071、163.0610(C ₆ H ₁₁ O ₅ ⁺)、145.0504(C ₆ H ₉ O ₄ ⁺)、127.0429、97.0280、85.0294
Procyanidin B2	C ₃₀ H ₂₆ O ₁₂	6.2	[M+H] ⁺	579.15	579.1540(C ₃₀ H ₂₇ O ₁₂ ⁺)、427.1054(C ₂₂ H ₁₉ O ₉ ⁺)、409.0937(C ₂₂ H ₁₇ O ₈ ⁺)、301.0708(C ₁₆ H ₁₃ O ₆ ⁺)、 291.0878(C ₁₅ H ₁₅ O ₆ ⁺)、271.0610(C ₁₅ H ₁₁ O ₅ ⁺)、233.0453、163.0392、127.0392(C ₆ H ₇ O ₃ ⁺)、123.0444(C ₇ H ₇ O ₂ ⁺)
Vitexin-2-O-rhamnoside	C ₂₇ H ₃₀ O ₁₄	7.24	[M+H] ⁺	579.171	579.1705(C ₂₇ H ₃₁ O ₁₄ ⁺)、433.1121(C ₂₁ H ₂₁ O ₁₀ ⁺)、415.1018(C ₁₉ O ₉ ⁺)、397.0914(C ₂₁ H ₁₇ O ₈ ⁺)、 337.0708(C ₁₅ H ₁₃ O ₉ ⁺)、313.0701、283.0599(C ₁₆ H ₁₁ O ₅ ⁺)、271.0611(C ₁₅ H ₁₁ O ₅ ⁺)
Linarin	C ₂₈ H ₃₂ O ₁₄	9.48	[M+H] ⁺	593.186	593.1888(C ₂₈ H ₃₃ O ₁₄ ⁺)、447.1305(C ₂₂ H ₂₃ O ₁₀ ⁺)、285.0765(C ₁₆ H ₁₃ O ₅ ⁺)
Glucosylvitexin	C ₂₇ H ₃₀ O ₁₅	7.07	[M+H] ⁺	595.166	595.1656(C ₂₇ H ₃₁ O ₁₅ ⁺)、475.1247(C ₂₃ H ₂₃ O ₁₁ ⁺)、433.1117(C ₂₁ H ₂₁ O ₁₀ ⁺)、415.1018(C ₂₁ H ₁₉ O ₉ ⁺)、 397.0918(C ₂₁ H ₁₇ O ₈ ⁺)、337.0708(C ₁₅ H ₁₃ O ₉ ⁺)、313.0697(C ₁₇ H ₁₃ O ₆ ⁺)、295.0606(C ₁₁ H ₁₉ O ₉ ⁺)、 271.5970(C ₁₅ H ₁₁ O ₅ ⁺)
Kaempferol-3-O-rutinoside	C ₂₇ H ₃₀ O ₁₅	7.81	[M+H] ⁺	595.166	287.0549(C ₁₅ H ₁₁ O ₆ ⁺)

Kaempferol-3-gentiobioside	C ₂₇ H ₃₀ O ₁₆	6.18	[M+H] ⁺	611.161	449.1098(C ₂₁ H ₂₁ O ₁₁ ⁺)、287.0560(C ₁₅ H ₁₁ O ₆ ⁺)、97.0295
Rutin	C ₂₇ H ₃₀ O ₁₆	7.31	[M+H] ⁺	611.161	303.0491(C ₁₅ H ₁₁ O ₇ ⁺)
Glutathione,oxidized	C ₂₀ H ₃₂ N ₆ O ₁₂ S ₂	4.43	[M+H] ⁺	613.159	613.1611(C ₂₀ H ₃₃ N ₆ O ₁₂ S ₂ ⁺)、595.1512(C ₂₀ H ₃₁ N ₆ O ₁₁ S ₂ ⁺)、538.1185(C ₁₈ H ₂₈ N ₅ O ₁₀ S ₂ ⁺)、 484.1172(C ₁₅ H ₂₆ N ₅ O ₉ S ₂ ⁺)、421.0858(C ₁₄ H ₂₁ N ₄ O ₇ S ₂ ⁺)、409.0859(C ₁₃ H ₂₁ N ₄ O ₇ S ₂ ⁺)、355.0753(C ₁₀ H ₁₉ N ₄ O ₆ S ₂ ⁺)、 288.0640(C ₁₀ H ₁₄ N ₃ O ₅ S ⁺)、243.0441(C ₉ H ₁₁ N ₂ O ₆ ⁺)、231.0437(C ₈ H ₁₁ N ₂ O ₄ S ⁺)、209.0081(C ₅ H ₉ N ₂ O ₃ S ₂ ⁺)、 177.0325(C ₅ H ₉ N ₂ O ₃ S ⁺)、153.0655、131.0451(C ₄ H ₇ N ₂ O ₃ ⁺)
Narcissoside	C ₂₈ H ₃₂ O ₁₆	7.9	[M+H] ⁺	625.176	479.1223(C ₂₂ H ₂₃ O ₁₂ ⁺)、317.0662(C ₁₆ H ₁₃ O ₇ ⁺)
Isorhamnetin-3-O-neohespeidoside	C ₂₈ H ₃₂ O ₁₆	7.9	[M+H] ⁺	625.176	479.1223(C ₂₂ H ₂₃ O ₁₂ ⁺)、317.0662(C ₁₆ H ₁₃ O ₇ ⁺)
Quercetin 3-O-sophoroside	C ₂₇ H ₃₀ O ₁₇	6.71	[M+H] ⁺	627.156	465.1037、303.0503(C ₁₅ H ₁₁ O ₇ ⁺)
Coproporphyrin I	C ₃₆ H ₃₈ N ₄ O ₈	15.28	[M+H] ⁺	655.276	
Nicotinamide Adenine Dinucleotide	C ₂₁ H ₂₇ N ₇ O ₁₄ P ₂	4.37	[M+H] ⁺	664.116	542.0662(C ₁₅ H ₂₂ N ₅ O ₁₃ P ₂ ⁺)、524.0589(C ₁₅ H ₂₀ N ₅ O ₁₂ P ₂ ⁺)、444.0936、428.0394、348.0718、 232.0859(C ₁₀ H ₁₀ N ₅ O ₂ ⁺)、136.0619(C ₅ H ₆ N ₅ ⁺)
Pedunculoside +NH3	C ₃₆ H ₅₈ O ₁₀ .NH ₃	11.06	[M+H] ⁺	668.437	668.4362、489.3827、471.3503、453.3373、407.3322、353.2859、327.2656、265.1815、205.1592、 201.1637、189.1635、187.1486、149.1352、95.0842
3-(3,5-Dimethylphenoxy)-1,2-propanediol	C ₁₁ H ₁₆ O ₃	8.33	[M+H] ⁺	197.117	197.1172(C ₁₁ H ₁₇ O ₃ ⁺)、179.1065(C ₁₁ H ₁₅ O ₂ ⁺)、161.0958(C ₁₁ H ₁₃ O ⁺)、135.1169(C ₉ H ₁₁ O ⁺)、133.1013、 131.0857、119.0850(C ₅ H ₁₁ O ₃ ⁺)、107.0859(C ₈ H ₁₁ ⁺)、105.0701(C ₈ H ₉ ⁺)、93.0697(C ₇ H ₉ ⁺)、91.0546(C ₇ H ₇ ⁺)、 77.0381(C ₃ H ₉ O ₂ ⁺)、67.0548、43.0175(C ₂ H ₃ O ⁺)

4-Methyl-2-oxo-2H-chromen-7-yl β-D-galactopyranoside	C ₁₆ H ₁₈ O ₈	6.64	[M+H] ⁺	339.108	147.0436 、 119.0492 、 91.0545
Actinidic acid	C ₃₀ H ₄₆ O ₅	13.48	[M+H] ⁺	487.341	487.3405(C ₃₀ H ₄₇ O ₅ ⁺) 、 441.3359(C ₂₉ H ₄₅ O ₃ ⁺) 、 423.3265(C ₂₉ H ₄₃ O ₂ ⁺) 、 405.3163(C ₂₄ H ₃₇ O ₅ ⁺) 、 307.2282(C ₁₉ H ₃₁ O ₃ ⁺) 、 249.1482(C ₁₆ H ₂₅ O ₂ ⁺) 、 205.1590 、 203.1425(C ₁₁ H ₂₃ O ₃ ⁺) 、 185.1327(C ₁₀ H ₁₇ O ₃ ⁺) 、 175.1480(C ₉ H ₁₉ O ₃ ⁺) 、 119.0860(C ₅ H ₁₁ O ₃ ⁺)
myriaporone 3	C ₁₉ H ₃₂ O ₇	8.34	[M+H] ⁺	373.222	211.1693(C ₁₂ H ₁₉ O ₃ ⁺) 、 193.1586 、 175.1480(C ₈ H ₁₅ O ₄ ⁺) 、 151.1484 、 135.1166(C ₆ H ₁₅ O ₃ ⁺) 、 133.1010(C ₆ H ₁₃ O ₃ ⁺) 、 119.0856(C ₅ H ₁₁ O ₃ ⁺) 、 109.1009(C ₇ H ₉ O ⁺) 、 107.0855 、 95.0856 、 81.0701(C ₆ H ₉ ⁺) 、 69.0700(C ₅ H ₉ ⁺)
3-Butenoic acid	C ₄ H ₆ O ₂	3.07	[M-H] ⁻	85.03	44.9978
Maleic acid	C ₄ H ₄ O ₄	1.31	[M-H] ⁻	115.004	44.9999(CHO ₂ ⁻) 、 41.0053 、 31.9905
Amber Acid	C ₄ H ₆ O ₄	2.86	[M-H] ⁻	117.019	99.9262 、 73.0290(C ₃ H ₅ O ₂ ⁻) 、 55.0201(C ₃ H ₃ O ⁻) 、 31.9912
Succinic acid	C ₄ H ₆ O ₄	2.86	[M-H] ⁻	117.019	99.9262 、 73.0290(C ₃ H ₅ O ₂ ⁺) 、 55.0201(C ₃ H ₃ O ⁺) 、 31.9912
Dimethylmalonic acid	C ₅ H ₈ O ₄	4.93	[M-H] ⁻	131.035	87.0450(C ₄ H ₇ O ₂ ⁻) 、 45.0039 、 44.9988(CHO ₂ ⁻) 、 42.9877(C ₃ H ₇ ⁻)
Methylsuccinic acid	C ₅ H ₈ O ₄	4.93	[M-H] ⁻	131.035	87.0450(C ₄ H ₇ O ₂ ⁺) 、 45.0039(C ₂ H ₅ O ⁺) 、 44.9988(CHO ₂ ⁺) 、 42.9877(C ₂ H ₃ O ⁺)
Glutaric acid	C ₅ H ₈ O ₄	4.94	[M-H] ⁻	131.035	87.0450 、 45.0039 、 44.9988 、 42.9877
L-Asparagine	C ₄ H ₈ N ₂ O ₃	0.78	[M-H] ⁻	131.046	72.0084(C ₂ H ₂ NO ₂ ⁻) 、 58.0298(C ₂ H ₄ NO ⁻) 、 41.9984(CNO ⁻) 、 41.0034(C ₂ HO ⁻)

Aspartic acid	C ₄ H ₇ NO ₄	0.79	[M-H] ⁻	132.03	99.9274(C ₄ H ₆ NO ₂ ⁻)、88.0389(C ₃ H ₆ NO ₂)、72.0075(C ₂ H ₂ NO ₂ ⁻)、71.0141(C ₃ H ₃ O ₂ ⁻)、45.0001(CHO ₂ ⁻)、 43.0021(C ₂ H ₃ O ⁻)、42.0370(C ₂ H ₄ N ⁻)、41.9981、31.9911
L-Malic acid	C ₄ H ₆ O ₅	1.29	[M-H] ⁻	133.014	72.9934(C ₂ HO ₃ ⁻)、71.0140(C ₃ H ₃ O ₂ ⁻)、59.0143(C ₂ H ₃ O ₂ ⁻)、44.9981(CHO ₂ ⁻)、43.0190(C ₂ H ₃ O ⁻)、41.0033、 32.9978、31.9904
4-Hydroxybenzoic acid	C ₇ H ₆ O ₃	4.74	[M-H] ⁻	137.024	93.0340(C ₆ H ₅ O ⁻)、65.0392(C ₄ HO ⁻)
Salicylic acid	C ₇ H ₆ O ₃	4.74	[M-H] ⁻	137.024	97.0295(C ₅ H ₅ O ₂ ⁻)
Protocatechuic Aldehyde	C ₇ H ₆ O ₃	5.93	[M-H] ⁻	137.024	
Glutamic acid	C ₅ H ₉ NO ₄	0.83	[M-H] ⁻	146.046	102.0549(C ₄ H ₃ NO ₂ ⁻)、75.0258、74.0244(C ₂ H ₄ NO ₂ ⁻)、61.9892、59.0133(C ₂ H ₃ O ₂ ⁻)、43.0019(C ₂ H ₃ O ⁻)、 41.9986(C ₂ H ₄ N ⁻)、41.0037(C ₂ HO ⁻)
L-2-Hydroxyglutaric acid	C ₅ H ₈ O ₅	0.85	[M-H] ⁻	147.03	102.0585、71.0148(C ₃ H ₃ O ₂ ⁻)、59.0119(C ₂ H ₃ O ₂ ⁻)、41.0028、31.9901
Citramalic acid	C ₅ H ₈ O ₅	3.08	[M-H] ⁻	147.03	87.0089(C ₃ H ₃ O ₃ ⁻)、85.0302(C ₄ H ₅ O ₂ ⁻)、61.9886、59.0141(C ₂ H ₃ O ₂ ⁻)、57.0346(C ₃ H ₅ O ⁻)、44.9980(CHO ₂ ⁻)、 41.0031(C ₂ HO ⁻)、31.9902
D-Ribose	C ₅ H ₁₀ O ₅	1.02	[M-H] ⁻	149.046	
3-Methylphenylacetic acid	C ₉ H ₁₀ O ₂	6.14	[M-H] ⁻	149.061	107.0479
2,3-Dihydroxybenzoic acid	C ₇ H ₆ O ₄	5.19	[M-H] ⁻	153.019	109.0295(C ₆ H ₅ O ₂ ⁻)、108.0218、91.0184(C ₆ H ₃ O ⁻)、53.0399
Gentisic acid	C ₇ H ₆ O ₄	5.19	[M-H] ⁻	153.019	109.029、108.0218、91.0184、53.0399

Protocatechuic acid	C ₇ H ₆ O ₄	5.2	[M-H] ⁻	153.019	109.029 、108.0218 、91.0184 、53.0399
p-Coumaric acid	C ₉ H ₈ O ₃	6.02	[M-H] ⁻	163.04	119.0515(C ₈ H ₇ O ⁻) 、117.0345(C ₈ H ₅ O ⁻) 、93.0356(C ₆ H ₅ O ⁻)
Phenylalanine	C ₉ H ₁₁ NO ₂	4.75	[M-H] ⁻	164.072	103.0555 、77.0372 、72.0084 、61.9867
Phthalic acid	C ₈ H ₆ O ₄	6.53	[M-H] ⁻	165.019	120.9425(C ₇ H ₅ O ₂ ⁻) 、96.9601(C ₅ H ₅ O ₂ ⁻) 、77.0408(C ₆ H ₅ ⁻) 、34.9718
Shikimic acid	C ₇ H ₁₀ O ₅	6.06	[M-H] ⁻	173.046	40.9952(C ₂ H ₃ O ⁻)
L-Arginine	C ₆ H ₁₄ N ₄ O ₂	0.73	[M-H] ⁻	173.104	131.0824(C ₅ H ₁₁ N ₂ O ₂ ⁻) 、85.0767(C ₄ H ₉ N ₂) 、41.0142(CHN ₂) 、40.0068(C ₂ H ₂ N ⁻)
Esculetin	C ₉ H ₆ O ₄	6.44	[M-H] ⁻	177.019	149.0245(C ₈ H ₅ O ₃ ⁻) 、147.0262(C ₈ H ₃ O ₃ ⁻) 、133.0293(C ₈ H ₅ O ₂ ⁻) 、121.0247(C ₆ HO ⁻) 、105.0353(C ₆ HO ₂ ⁻) 、 93.0347 、89.0398 、79.0204 、77.0403 、41.0029
2-Methoxycinnamic acid	C ₁₀ H ₁₀ O ₃	6.15	[M-H] ⁻	177.056	131.0508(C ₉ H ₇ O ⁻) 、130.0419 、104.02040 、59.0117
Caffeic acid	C ₉ H ₈ O ₄	5.45	[M-H] ⁻	179.035	135.0457(C ₈ H ₇ O ₂ ⁻) 、117.0357(C ₈ H ₅ O ⁻) 、47.0077 、44.9973(CHO ₂ ⁻)
D-Galactose	C ₆ H ₁₂ O ₆	0.97	[M-H] ⁻	179.056	85.0298 、81.0327 、75.0088(C ₃ H ₇ O ₂ ⁻) 、73.0288(C ₃ H ₅ O ₂ ⁻) 、71.0123(C ₃ H ₃ O ₂ ⁻) 、59.0139(C ₂ H ₃ O ₂ ⁻) 、 56.9976(C ₂ HO ₂ ⁻) 、47.0138 、44.9978(C ₂ H ₅ O ⁻) 、43.0184(C ₂ H ₃ O ⁻)
D-Mannose	C ₆ H ₁₂ O ₆	0.97	[M-H] ⁻	179.056	179.0561(C ₆ H ₁₁ O ₆ ⁻) 、135.0663(C ₅ H ₁₁ O ₄ ⁻)
D-Glucose	C ₆ H ₁₂ O ₆	0.97	[M-H] ⁻	179.056	179.0561(C ₆ H ₁₁ O ₆ ⁻) 、135.0663(C ₅ H ₁₁ O ₄ ⁻)
Homovanillic acid	C ₉ H ₁₀ O ₄	5.17	[M-H] ⁻	181.051	

Galactitol	C ₆ H ₁₄ O ₆	0.83	[M-H] ⁻	181.072	73.0293(C ₃ H ₅ O ₂ ⁻)、71.0139(C ₃ H ₃ O ₂ ⁻)、59.0138(C ₂ H ₃ O ₂ ⁻)、55.0189、44.9980(C ₂ H ₅ O ⁻)、43.0189(C ₂ H ₃ O ⁻)、 41.0032(C ₂ HO ⁻)
Mannitol	C ₆ H ₁₄ O ₆	0.84	[M-H] ⁻	181.072	73.0293(C ₃ H ₅ O ₂ ⁻)、71.0139(C ₃ H ₃ O ₂ ⁻)、59.0138(C ₂ H ₃ O ₂ ⁻)、55.0189、44.9980(C ₂ H ₅ O ⁻)、43.0189(C ₂ H ₃ O ⁻)、 41.0032(C ₂ HO ⁻)
Sorbitol	C ₆ H ₁₄ O ₆	0.85	[M-H] ⁻	181.072	181.0718(C ₆ H ₁₃ O ₆ ⁻)、165.0768(C ₆ H ₁₃ O ₅ ⁻)
4-Pyridoxic acid	C ₈ H ₉ NO ₄	4.59	[M-H] ⁻	182.046	138.0537(C ₇ H ₈ NO ₂ ⁻)、120.0435(C ₇ H ₆ NO ⁻)、108.0453(C ₆ H ₆ NO ⁻)、96.9603、92.0510、80.0478、66.0307、 61.9887、41.0040
Azelaic acid	C ₉ H ₁₆ O ₄	8.59	[M-H] ⁻	187.098	125.1039(C ₈ H ₁₃ O ⁻)、123.0814(C ₈ H ₁₁ O ⁻)、97.0672(C ₆ H ₉ O ⁻)、95.0502(C ₆ H ₇ O ⁻)、80.0265、57.0347(C ₃ H ₅ O ⁻)、 44.9995(CHO ₂ ⁻)
N-Acetylglutamic acid	C ₇ H ₁₁ NO ₅	2.96	[M-H] ⁻	188.056	159.8925、143.8999(C ₆ H ₁₀ NO ₃ ⁻)、142.8929、141.8624、126.0522、102.0560(C ₄ H ₈ NO ₂ ⁻)、 100.0765(C ₅ H ₁₀ NO ⁻)、61.9904、58.0286(C ₂ H ₄ NO ⁻)、54.0352、41.9987(CHO ₂ ⁻)
Isocitric acid	C ₆ H ₈ O ₇	1.39	[M-H] ⁻	191.02	171.0268、162.8992、145.8867、129.0198、117.0196、111.0084、99.0112、93.0353、85.0290、 73.0293、57.0350、44.9970
Citric acid	C ₆ H ₈ O ₇	2.37	[M-H] ⁻	191.02	111.0089、87.0087(C ₃ H ₃ O ₃ ⁻)、85.0297、67.0187、59.0136(C ₂ H ₃ O ₂ ⁻)、58.0050、57.0347、43.0190(C ₂ H ₃ O ⁻)、 41.0033(C ₂ HO ⁻)
Quinic acid	C ₇ H ₁₂ O ₆	5.97	[M-H] ⁻	191.056	191.0568(C ₇ H ₁₁ O ₆ ⁻)、127.0393(C ₆ H ₇ O ₃ ⁻)、108.0219、93.0347、87.0085(C ₃ H ₃ O ₃ ⁻)、85.0293、81.0352、 59.0135(C ₂ H ₃ O ₂ ⁻)、44.9980(CHO ₂ ⁻)

Ferulic Acid	C ₁₀ H ₁₀ O ₄	8.99	[M-H] ⁻	193.051	
Isoferulic acid	C ₁₀ H ₁₀ O ₄	8.99	[M-H] ⁻	193.051	
Galactonic acid	C ₆ H ₁₂ O ₇	0.87	[M-H] ⁻	195.051	105.0195(C ₃ H ₅ O ₄ ⁻)、87.0087(C ₃ H ₃ O ₃ ⁻)、75.0087(C ₂ H ₃ O ₃ ⁻)、71.0138(C ₃ H ₃ O ₂ ⁻)、59.0139(C ₂ H ₃ O ₂ ⁻)、58.0067、 56.9983(C ₂ HO ₂ ⁻)、47.0134、44.9984(CHO ₂ ⁻)、41.0035(C ₂ HO ⁻)
L-Tryptophan	C ₁₁ H ₁₂ N ₂ O ₂	5.35	[M-H] ⁻	203.083	142.0678(C ₁₀ H ₈ N ⁻)、116.0499(C ₈ H ₆ N ⁻)、79.0174、71.0133(C ₃ H ₃ O ₂ ⁻)、69.0313、51.0238(C ₄ H ₃ ⁻)、43.0190
Glucaric acid	C ₆ H ₁₀ O ₈	0.92	[M-H] ⁻	209.03	89.0368(C ₃ H ₅ O ₃ ⁻)、87.0086(C ₃ H ₃ O ₃ ⁻)、83.0149、72.9935(C ₂ HO ₃ ⁻)、71.0142、59.0138(C ₂ H ₃ O ₂ ⁻)、57.0345、 44.9998(CHO ₂ ⁻)、41.0034、31.9906
Pantothenic acid	C ₉ H ₁₇ NO ₅	4.96	[M-H] ⁻	218.103	146.0846(C ₆ H ₁₂ NO ₃ ⁻)、116.0730(C ₅ H ₁₀ NO ₂ ⁻)、99.0466(C ₅ H ₇ O ₂ ⁻)、88.0399(C ₃ H ₆ NO ₂ ⁻)、71.0502(C ₄ H ₇ O ⁻)、 59.0202(C ₂ H ₃ O ₂ ⁻)、44.0142(CH ₂ NO ⁻)、41.9987(CNO ⁻)
Traumatic acid	C ₁₂ H ₂₀ O ₄	11.47	[M-H] ⁻	227.129	183.1381(C ₁₁ H ₁₉ O ₂ ⁻)、143.8648、136.9185、116.9962、96.9652、92.9969、61.9889、59.0139(C ₃ H ₃ O ₂ ⁻)
Dodecanedioic acid	C ₁₂ H ₂₂ O ₄	11.97	[M-H] ⁻	229.145	211.1381(C ₁₂ H ₁₉ O ₃ ⁻)、167.1457(C ₁₁ H ₁₉ O ⁻)、138.9673、127.0752(C ₇ H ₁₁ O ₂ ⁻)、111.0071(C ₈ H ₁₅ ⁻)、92.9973
Valerenic acid	C ₁₅ H ₂₂ O ₂	16.03	[M-H] ⁻	233.155	233.1554(C ₁₅ H ₂₁ O ₂ ⁻)、217.1272(C ₁₄ H ₁₇ O ₂ ⁻)
Uridine	C ₉ H ₁₂ N ₂ O ₆	3.63	[M-H] ⁻	243.062	130.9697(C ₅ H ₇ O ₄ ⁻)、122.8943(C ₅ H ₃ N ₂ O ₂ ⁻)、110.0244、86.9775、82.0300、66.0345、41.9980(CNO ⁻)
Inosine	C ₁₀ H ₁₂ N ₄ O ₅	4.57	[M-H] ⁻	267.073	
Naringenin	C ₁₅ H ₁₂ O ₅	8.27	[M-H] ⁻	271.061	177.0203(C ₉ H ₅ O ₄ ⁻)、165.0060(C ₈ H ₅ O ₄ ⁻)、151.0033(C ₇ H ₃ O ₄ ⁻)、119.0590(C ₈ H ₇ O ⁻)、107.0159(C ₆ H ₃ O ₂ ⁻)、 93.0415(C ₆ H ₅ O ⁻)、83.0142、63.0256

Arbutin	C ₁₂ H ₁₆ O ₇	4.04	[M-H] ⁻	271.082	152.9182(C ₈ HO ₃ ⁻)、109.0307(C ₆ H ₅ O ₂ ⁻)、108.0220、71.0128(C ₃ H ₃ O ₂ ⁻)
Phloretin	C ₁₅ H ₁₄ O ₅	8.62	[M-H] ⁻	273.077	
Guanosine	C ₁₀ H ₁₃ N ₅ O ₅	4.56	[M-H] ⁻	282.084	
Helicid	C ₁₃ H ₁₆ O ₇	6.45	[M-H] ⁻	283.082	192.9782(C ₁₀ H ₉ O ₄ ⁻)、165.4018(C ₉ H ₉ O ₃ ⁻)、137.0248、121.0277(C ₇ H ₅ O ₂ ⁻)、119.0503(C ₄ H ₇ O ₄ ⁻)、96.9603、 87.0097(C ₃ H ₃ O ₃ ⁻)、77.0391(C ₆ H ₅ ⁻)
Hexadecanedioic acid	C ₁₆ H ₃₀ O ₄	14.99	[M-H] ⁻	285.207	285.2024(C ₁₆ H ₂₉ O ₄ ⁻)、267.1976(C ₁₆ H ₂₇ O ₃ ⁻)、241.2202(C ₁₅ H ₂₉ O ₃ ⁻)、223.2071(C ₁₅ H ₂₇ O ⁻)、178.9913、 166.9932、128.9953、57.0341(C ₃ H ₅ O ⁻)
Epicatechin	C ₁₅ H ₁₄ O ₆	6.52	[M-H] ⁻	289.072	221.0815、203.0718(C ₁₁ H ₇ O ₄ ⁻)、187.0403、173.0607、159.0453、151.0405(C ₈ H ₇ O ₃ ⁻)、137.0246(C ₇ H ₅ O ₃ ⁻)、 123.0452(C ₇ H ₇ O ₂ ⁻)、109.0295(C ₆ H ₅ O ₂ ⁻)、97.0297、81.0348、57.0348、41.0033(C ₂ HO ⁻)
Catechin	C ₁₅ H ₁₄ O ₆	6.52	[M-H] ⁻	289.072	221.0815、203.0718(C ₁₁ H ₇ O ₄ ⁻)、187.0403、173.0607、159.0453、151.0405(C ₈ H ₇ O ₃ ⁻)、137.0246(C ₇ H ₅ O ₃ ⁻)、 123.0452(C ₇ H ₇ O ₂ ⁻)、109.0295(C ₆ H ₅ O ₂ ⁻)、97.0297、81.0348、57.0348、41.0033(C ₂ HO ⁻)
9,10-Dihydroxy-12Z-octadecenoic acid	C ₁₈ H ₃₄ O ₄	14.41	[M-H] ⁻	313.238	295.2272(C ₁₈ H ₃₁ O ₃ ⁻)、277.2163(C ₁₈ H ₂₉ O ₂ ⁻)、216.9887、201.1147(C ₁₀ H ₁₇ O ₄ ⁻)、199.0762(C ₁₁ H ₁₉ O ₃ ⁻)、 178.9951、171.1043(C ₁₀ H ₁₉ O ₂ ⁻)、155.1027(C ₉ H ₁₅ O ₂ ⁻)、125.1042(C ₉ H ₁₇ ⁻)、91.0251、44.9880(CHO ₂ ⁻)
Esculin hydrate	C ₁₅ H ₁₆ O ₉	5.58	[M-H] ⁻	339.072	191.0551、177.0193、176.01104、145.0314、133.0285、105.0366
Maltitol	C ₁₂ H ₂₄ O ₁₁	0.95	[M-H] ⁻	343.125	181.0758(C ₆ H ₁₃ O ₆ ⁻)、163.0586(C ₆ H ₁₁ O ₅ ⁻)、131.0327、119.0377(C ₄ H ₇ O ₄ ⁻)、101.0252(C ₄ H ₅ O ₃ ⁻)、 89.0242(C ₃ H ₅ O ₃ ⁻)、85.0235、71.0145(C ₃ H ₃ O ₂ ⁻)、59.0140(C ₂ H ₃ O ₂ ⁻)、43.0296
Adenosine monophosphate	C ₁₀ H ₁₄ N ₅ O ₇ P	2.22	[M-H] ⁻	346.056	134.0469(C ₅ H ₄ N ₅ ⁻)、96.9672(H ₂ PO ₄ ⁻)、78.9598

Neochlorogenic acid	C ₁₆ H ₁₈ O ₉	5.33	[M-H] ⁻	353.088	191.0555(C ₇ H ₁₁ O ₆ ⁻)、179.0347(C ₉ H ₇ O ₄ ⁻)、161.0236(C ₉ H ₅ O ₃ ⁻)、135.0452(C ₈ H ₇ O ₂ ⁻)、134.0373
Cryptochlorogenic acid	C ₁₆ H ₁₈ O ₉	5.33	[M-H] ⁻	353.088	191.0555(C ₇ H ₁₁ O ₆ ⁻)、179.0347(C ₉ H ₇ O ₄ ⁻)、161.0236(C ₉ H ₅ O ₃ ⁻)、135.0452(C ₈ H ₇ O ₂ ⁻)、134.0373
Chlorogenic acid	C ₁₆ H ₁₈ O ₉	5.97	[M-H] ⁻	353.088	233.0459、191.0558(C ₇ H ₁₁ O ₆ ⁻)、173.0462、155.0355、135.0453、111.0455、93.0350、85.0285(C ₄ H ₅ O ₂ ⁻)、45.0012
4-O-Feruloylquinic acid	C ₁₇ H ₂₀ O ₉	6.93	[M-H] ⁻	367.103	193.0508(C ₁₀ H ₉ O ₄ ⁻)、191.0558(C ₇ H ₁₁ O ₆ ⁻)、173.0461(C ₇ H ₉ O ₅ ⁻)、149.0600(C ₉ H ₉ O ₂ ⁻)、134.0366、111.0439、93.0346(C ₆ H ₅ O ⁻)、87.0082(C ₃ H ₃ O ₃ ⁻)、43.0183(C ₂ H ₃ O ⁻)
Emodin 8-O-β-D-glucoside	C ₂₀ H ₂₄ O ₉	9.2	[M-H] ⁻	407.135	245.0817(C ₁₀ H ₁₃ O ₇ ⁻)、230.0582、215.0351
Isovitexin	C ₂₁ H ₂₀ O ₁₀	7.41	[M-H] ⁻	431.098	341.0667(C ₁₈ H ₁₃ O ₇ ⁻)、311.0556(C ₁₇ H ₁₁ O ₆ ⁻)、283.0614(C ₁₆ H ₁₁ O ₅ ⁻)、44.9983
Naringenin-7-O-glucoside	C ₂₁ H ₂₂ O ₁₀	8.27	[M-H] ⁻	433.114	271.0613(C ₁₂ H ₁₅ O ₇ ⁻)、177.0214(C ₉ H ₅ O ₄ ⁻)、151.0043(C ₅ H ₁₁ O ₅ ⁻)、119.0506(C ₈ H ₇ O ⁻)、107.0156(C ₇ H ₇ O ⁻)
Trilobatin	C ₂₁ H ₂₄ O ₁₀	7.93	[M-H] ⁻	435.13	345.0989(C ₁₈ H ₁₇ O ₇ ⁻)、315.0863(C ₁₇ H ₁₅ O ₆ ⁻)、302.0309、273.0757(C ₁₅ H ₁₃ O ₅ ⁻)、221.0455、209.0444、197.0452、167.0345(C ₈ H ₇ O ₄ ⁻)、165.0558(C ₉ H ₉ O ₃ ⁻)、125.0245(C ₆ H ₅ O ₃ ⁻)
Phloridzin	C ₂₁ H ₂₄ O ₁₀	8.61	[M-H] ⁻	435.13	435.1400(C ₂₁ H ₂₃ O ₁₀ ⁻)、407.0798(C ₁₉ H ₁₉ O ₁₀ ⁻)、273.0762(C ₁₅ H ₁₃ O ₅ ⁻)、255.0318(C ₁₁ H ₁₁ O ₇ ⁻)、217.0187、179.0343(C ₉ H ₇ O ₄ ⁻)、167.0355(C ₈ H ₇ O ₄ ⁻)、123.0449(C ₆ H ₃ O ₃ ⁻)、93.0369(C ₆ H ₅ O ⁻)、61.9882
Loganin +HCOOH	C ₁₇ H ₂₆ O ₁₀ ·HCOOH	5.55	[M-H] ⁻	435.151	389.1550(C ₁₇ H ₂₅ O ₁₀ ⁻)、347.0690、333.0589、315.0561、289.0734、272.0280、227.0920(C ₁₁ H ₁₅ O ₅ ⁻)、212.0687、165.0180、152.0457、143.0377、101.0247(C ₄ H ₅ O ₃ ⁻)、71.0153(C ₃ H ₃ O ₂ ⁻)、44.9987(CHO ₂ ⁻)
Orientin	C ₂₁ H ₂₀ O ₁₁	6.85	[M-H] ⁻	447.093	447.1347(C ₂₁ H ₁₉ O ₁₁ ⁻)、357.0600(C ₁₈ H ₁₃ O ₈ ⁻)、327.0523(C ₁₇ H ₁₁ O ₇ ⁻)、293.0903、285.0901(C ₁₂ H ₁₃ O ₈ ⁻)、255.0752、161.0419(C ₆ H ₉ O ₅ ⁻)、131.0346(C ₅ H ₇ O ₄ ⁻)、125.0247、89.0250(C ₃ H ₅ O ₃ ⁻)、59.0137(C ₂ H ₃ O ₂ ⁻)、

					44.9975
					447.1347(C ₂₁ H ₁₉ O ₁₁ ⁻)、357.0600(C ₁₈ H ₁₃ O ₈ ⁻)、327.0523(C ₁₇ H ₁₁ O ₇ ⁻)、293.0903、285.0901(C ₁₂ H ₁₃ O ₈ ⁻)、
Homoorientin (Isoorientin)	C ₂₁ H ₂₀ O ₁₁	6.85	[M-H] ⁻	447.093	255.0752、161.0419(C ₆ H ₉ O ₅ ⁻)、131.0346(C ₅ H ₇ O ₄ ⁻)、125.0247、89.0250(C ₃ H ₅ O ₃ ⁻)、59.0137(C ₂ H ₃ O ₂ ⁻)、
					44.9975
Luteoloside	C ₂₁ H ₂₀ O ₁₁	5.55	[M-H] ⁻	447.093	447.1148(C ₂₁ H ₁₉ O ₁₁ ⁻)、285.0401(C ₁₅ H ₉ O ₆ ⁻)、284.0317、283.0311(C ₁₅ H ₇ O ₆ ⁻)、255.0311、152.0102
Cyanidin-3-O-glucoside	C ₂₁ H ₂₀ O ₁₁	5.55	[M-H] ⁻	447.093	447.0926、285.0401、284.0324、255.0299(C ₁₅ H ₁₁ O ₄ ⁻)、152.0102
Astragalin	C ₂₁ H ₂₀ O ₁₁	8.09	[M-H] ⁻	447.093	447.0926(C ₂₁ H ₁₉ O ₁₁ ⁻)、285.0401、284.0324、255.0299、227.0342
					447.1056(C ₂₁ H ₁₉ O ₇ ⁻)、301.0338(C ₁₅ H ₉ O ₇ ⁻)、300.0268、285.0422(C ₁₅ H ₉ O ₆ ⁻)、271.0211(C ₁₂ H ₁₅ O ₇ ⁻)、
Quercetin 7-rhamnoside; Vincetoxicoside B	C ₂₁ H ₂₀ O ₁₁	8.55	[M-H] ⁻	447.093	255.0208(C ₁₂ H ₁₅ O ₆ ⁻)、233.0076、163.0106(C ₈ H ₃ O ₄ ⁻)、151.0521(C ₈ H ₇ O ₃ ⁻)、135.0490(C ₅ H ₁₁ O ₄ ⁻)、121.0296、
					93.0348(C ₆ H ₅ O ⁻)、71.0121
					449.2197(C ₂₁ H ₂₁ O ₁₁ ⁻)、287.0534、269.1399、225.1491、209.1184、175.0041、151.0032、135.0456、
Flavanomarein	C ₂₁ H ₂₂ O ₁₁	7.54	[M-H] ⁻	449.109	101.0246、89.0238、59.0136
					325.0352(C ₁₄ H ₁₃ O ₅ ⁻)、287.0563(C ₁₅ H ₁₁ O ₆ ⁻)、285.0418(C ₁₅ H ₉ O ₆ ⁻)、151.0038(C ₈ H ₇ O ₃ ⁻)、135.0438(C ₈ H ₇ O ₂ ⁻)、
Eriodictyol-7-O-glucoside	C ₂₁ H ₂₂ O ₁₁	8.18	[M-H] ⁻	449.109	125.0267、44.9976
Betulonicacid	C ₃₀ H ₄₆ O ₃	18.14	[M-H] ⁻	453.337	453.3014(C ₃₀ H ₄₅ O ₃ ⁻)、407.2951(C ₂₉ H ₄₃ O ⁻)、352.9820、328.9867、288.9931、151.9466、116.9269
Betulinic acid	C ₃₀ H ₄₈ O ₃	18.35	[M-H] ⁻	455.353	455.3532(C ₃₀ H ₄₇ O ₃ ⁻)

Oleanolic acid	C ₃₀ H ₄₈ O ₃	18.35	[M-H] ⁻	455.353	455.3532(C ₃₀ H ₄₇ O ₃ ⁻)
Ursolic Acid	C ₃₀ H ₄₈ O ₃	18.35	[M-H] ⁻	455.353	455.3532(C ₃₀ H ₄₇ O ₃ ⁻)
Hyperin	C ₂₁ H ₂₀ O ₁₂	7.54	[M-H] ⁻	463.088	463.0923(C ₂₁ H ₁₉ O ₁₂ ⁻)、301.0366(C ₁₅ H ₉ O ₇ ⁻)、300.0274、271.0237、255.0315、179.0003(C ₆ H ₁₁ O ₆ ⁻)、 151.0057(C ₇ H ₃ O ₄ ⁻)、44.9981
Isoquercitrin	C ₂₁ H ₂₀ O ₁₂	7.54	[M-H] ⁻	463.088	463.0923(C ₂₁ H ₁₉ O ₁₂ ⁻)、301.0366、300.0274、271.0237、255.0315、179.0003、151.0057、44.9981
Maslinic acid	C ₃₀ H ₄₈ O ₄	16.08	[M-H] ⁻	471.348	471.3456(C ₃₀ H ₄₇ O ₄ ⁻)、453.3368
Corosolic acid	C ₃₀ H ₄₈ O ₄	16.38	[M-H] ⁻	471.348	471.3456(C ₃₀ H ₄₇ O ₄ ⁻)、453.3368
Asiatic acid	C ₃₀ H ₄₈ O ₅	14.9	[M-H] ⁻	487.343	487.3423(C ₃₀ H ₄₇ O ₅ ⁻)
Maltotriose	C ₁₈ H ₃₂ O ₁₆	1.52	[M-H] ⁻	503.162	353.1091(C ₁₃ H ₂₁ O ₁₁ ⁻)、249.0665(C ₉ H ₁₃ O ₈ ⁻)、221.0634(C ₈ H ₁₃ O ₇ ⁻)、190.9951、161.0512(C ₆ H ₉ O ₅ ⁻)、 133.0119(C ₄ H ₅ O ₄ ⁻)、115.0036、89.0257(C ₃ H ₅ O ₃ ⁻)、71.0132(C ₃ H ₃ O ₂ ⁻)
Raffinose	C ₁₈ H ₃₂ O ₁₆	1.55	[M-H] ⁻	503.162	503.14932(C ₁₈ H ₃₁ O ₁₆ ⁻)、311.00975(C ₁₁ H ₁₉ O ₁₀ ⁻)、282.9340、221.0671(C ₈ H ₁₃ O ₇ ⁻)、179.0559(C ₆ H ₁₁ O ₆ ⁻)、 161.0478(C ₆ H ₉ O ₅ ⁻)、119.0373(C ₄ H ₇ O ₄ ⁻)、101.0239(C ₄ H ₅ O ₃ ⁻)、71.0154(C ₃ H ₃ O ₂ ⁻)
Madecassic acid	C ₃₀ H ₄₈ O ₆	13.3	[M-H] ⁻	503.338	503.3373(C ₃₀ H ₄₇ O ₆ ⁻)、485.3259(C ₃₀ H ₄₅ O ₅ ⁻)、441.3320(C ₂₉ H ₄₅ O ₃ ⁻)、421.3085(C ₂₄ H ₃₇ O ₆ ⁻)
Schaftoside	C ₂₆ H ₂₈ O ₁₄	6.76	[M-H] ⁻	563.141	
Isoschaftoside	C ₂₆ H ₂₈ O ₁₄	6.76	[M-H] ⁻	563.141	

Procyanidin B2	C ₃₀ H ₂₆ O ₁₂	6.21	[M-H] ⁻	577.135	451.1029(C ₂₄ H ₁₉ O ₉ ⁻)、425.0887、407.0756(C ₂₂ H ₁₅ O ₈ ⁻)、339.0860、289.0708(C ₁₅ H ₁₃ O ₆ ⁻)、273.0403(C ₁₄ H ₉ O ₆ ⁻)、245.0819(C ₁₃ H ₉ O ₅ ⁻)、205.0506、161.0244、125.0243(C ₆ H ₅ O ₃ ⁻)
Vitexin-2-O-rhamnoside	C ₂₇ H ₃₀ O ₁₄	7.23	[M-H] ⁻	577.156	577.1559(C ₂₇ H ₂₉ O ₁₄ ⁻)、457.1152(C ₂₃ H ₂₁ O ₁₀ ⁻)、413.0854(C ₂₁ H ₁₇ O ₉ ⁻)、341.0670(C ₁₈ H ₁₃ O ₇ ⁻)、293.0443(C ₁₁ H ₁₇ O ₉ ⁻)
Glucosylvitexin	C ₂₇ H ₃₀ O ₁₅	7.06	[M-H] ⁻	593.151	593.1495(C ₂₇ H ₂₉ O ₁₅ ⁻)、473.1086(C ₂₃ H ₂₁ O ₁₁ ⁻)、413.0867(C ₂₁ H ₁₇ O ₉ ⁻)、311.0560(C ₁₇ H ₁₁ O ₆ ⁻)、293.0447(C ₁₁ H ₁₇ O ₉ ⁻)
Lonicerin	C ₂₇ H ₃₀ O ₁₅	7.62	[M-H] ⁻	593.151	593.0875(C ₂₇ H ₂₉ O ₁₅ ⁻)、384.9873、284.0329、255.0330
Kaempferol-3-O-rutinoside	C ₂₇ H ₃₀ O ₁₅	7.8	[M-H] ⁻	593.151	593.1495(C ₂₇ H ₂₉ O ₁₅ ⁻)、285.0403(C ₁₅ H ₉ O ₆ ⁻)、284.0327
Tracheloside +HCOOH	C ₂₇ H ₃₄ O ₁₂ ·HCOOH	8.13	[M-H] ⁻	595.203	595.3268、387.1472(C ₁₇ H ₂₃ O ₁₀ ⁻)、372.1250、341.1413(C ₂₀ H ₂₁ O ₅ ⁻)、181.0508、151.0408(C ₅ H ₁₁ O ₅ ⁻)、116.9253、44.9986(CHO ₂ ⁻)
Rutin	C ₂₇ H ₃₀ O ₁₆	7.3	[M-H] ⁻	609.146	609.1439(C ₂₇ H ₂₉ O ₁₆ ⁻)、301.0348(C ₁₅ H ₉ O ₇ ⁻)、300.0268、271.0252
Glutathione,oxidized	C ₂₀ H ₃₂ N ₆ O ₁₂ S ₂	4.45	[M-H] ⁻	611.145	611.1504(C ₂₀ H ₃₁ N ₆ O ₁₂ S ₂ ⁻)、338.0651(C ₁₀ H ₁₆ N ₃ O ₆ S ₂ ⁻)、306.0772(C ₁₀ H ₁₆ N ₃ O ₆ S ⁻)、304.0626(C ₁₀ H ₁₄ N ₃ O ₆ S ⁻)、272.0895(C ₁₀ H ₁₄ N ₃ O ₆ ⁻)、254.0790(C ₁₀ H ₁₂ N ₃ O ₅ ⁻)、160.0087(C ₅ H ₆ NO ₃ S ⁻)、128.0358(C ₅ H ₆ NO ₃ ⁻)
Narcissoside	C ₂₈ H ₃₂ O ₁₆	7.89	[M-H] ⁻	623.162	623.1611、425.1878、315.0509(C ₁₆ H ₁₁ O ₇ ⁻)、314.0727、151.0045(C ₇ H ₃ O ₄ ⁻)、119.0367(C ₅ H ₁₁ O ₃ ⁻)
Isorhamnetin-3-O-neohespeidoside	C ₂₈ H ₃₂ O ₁₆	7.89	[M-H] ⁻	623.162	623.1611、425.1878、315.0509、314.0727、151.0045、119.0367
Methylhesperidin	C ₂₉ H ₃₆ O ₁₅	7.88	[M-H] ⁻	623.198	623.1631、425.1878、315.0509、314.0727、179.0592、151.0045、119.0344

Herbacetin-3,8-diglucopyranoside	C ₂₇ H ₃₀ O ₁₇	5.82	[M-H] ⁻	625.141	625.1361、505.0864(C ₂₃ H ₂₁ O ₁₃ ⁻)、463.0891(C ₂₁ H ₁₉ O ₁₂ ⁻)、462.0811、343.0391、301.0400(C ₁₅ H ₉ O ₇ ⁻)、 205.0675
Quercetin 3-O-sophoroside	C ₂₇ H ₃₀ O ₁₇	6.73	[M-H] ⁻	625.141	625.1414、463.0898(C ₂₁ H ₁₉ O ₁₂ ⁻)、301.0351(C ₁₅ H ₉ O ₇ ⁻)、300.02770、271.0232、178.9975、 125.0251(C ₆ H ₅ O ₃ ⁻)、61.9888
Nicotinamide Adenine Dinucleotide	C ₂₁ H ₂₇ N ₇ O ₁₄ P ₂	4.38	[M-H] ⁻	662.102	540.0548(C ₁₅ H ₂₀ N ₅ O ₁₃ P ₂ ⁻)、426.0236(C ₁₆ H ₂₀ N ₃ O ₁₄ P ₂ ⁻)、346.0578(C ₁₀ H ₁₃ N ₅ O ₇ P ⁻)、328.0443(C ₁₀ H ₁₁ N ₅ O ₆ P ⁻)、 272.9576、211.0018(C ₅ H ₈ O ₇ P ⁻)、158.9264、134.0475(C ₅ H ₄ N ₅ ⁻)
Pedunculoside +HCOOH	C ₃₆ H ₅₈ O ₁₀ ·HCOOH	11.05	[M-H] ⁻	695.401	695.4040、487.3425(C ₃₀ H ₄ 7O ₅ ⁻)、44.9981(CHO ₂ ⁻)
Diethyl tartrate	C ₈ H ₁₄ O ₆	5.76	[M-H] ⁻	205.072	129.0563(C ₄ HO ₅ ⁻)、115.0767(C ₅ H ₇ O ₃ ⁻)、113.0608(C ₅ H ₅ O ₃ ⁻)、99.0815、81.0711、72.9932(C ₂ HO ₃ ⁻)、 59.0141(C ₂ H ₃ O ₂ ⁻)、44.9985(CHO ₂ ⁻)
4-methycatechol-O,O-diacetic acid	C ₁₁ H ₁₂ O ₆	6.14	[M-H] ⁻	239.056	239.0559、177.0559、149.0606、148.0525、133.0656、121.0291、107.0500、106.0419、93.0341、 87.0085、59.0137、41.0030
trans-5-O-(4-coumaroyl)-D-quinic acid	C ₁₆ H ₁₈ O ₈	6.64	[M-H] ⁻	337.093	191.0558(C ₇ H ₁₁ O ₆ ⁻)、173.0459(C ₁₀ H ₅ O ₃ ⁻)、163.0400(C ₉ H ₇ O ₃ ⁻)、119.0500(C ₈ H ₇ O ⁻)、111.0452、 93.0345(C ₆ H ₅ O ⁻)、87.0086(C ₃ H ₃ O ₃ ⁻)
Nerriifolin	C ₃₀ H ₄₆ O ₈	12.98	[M-H] ⁻	533.312	

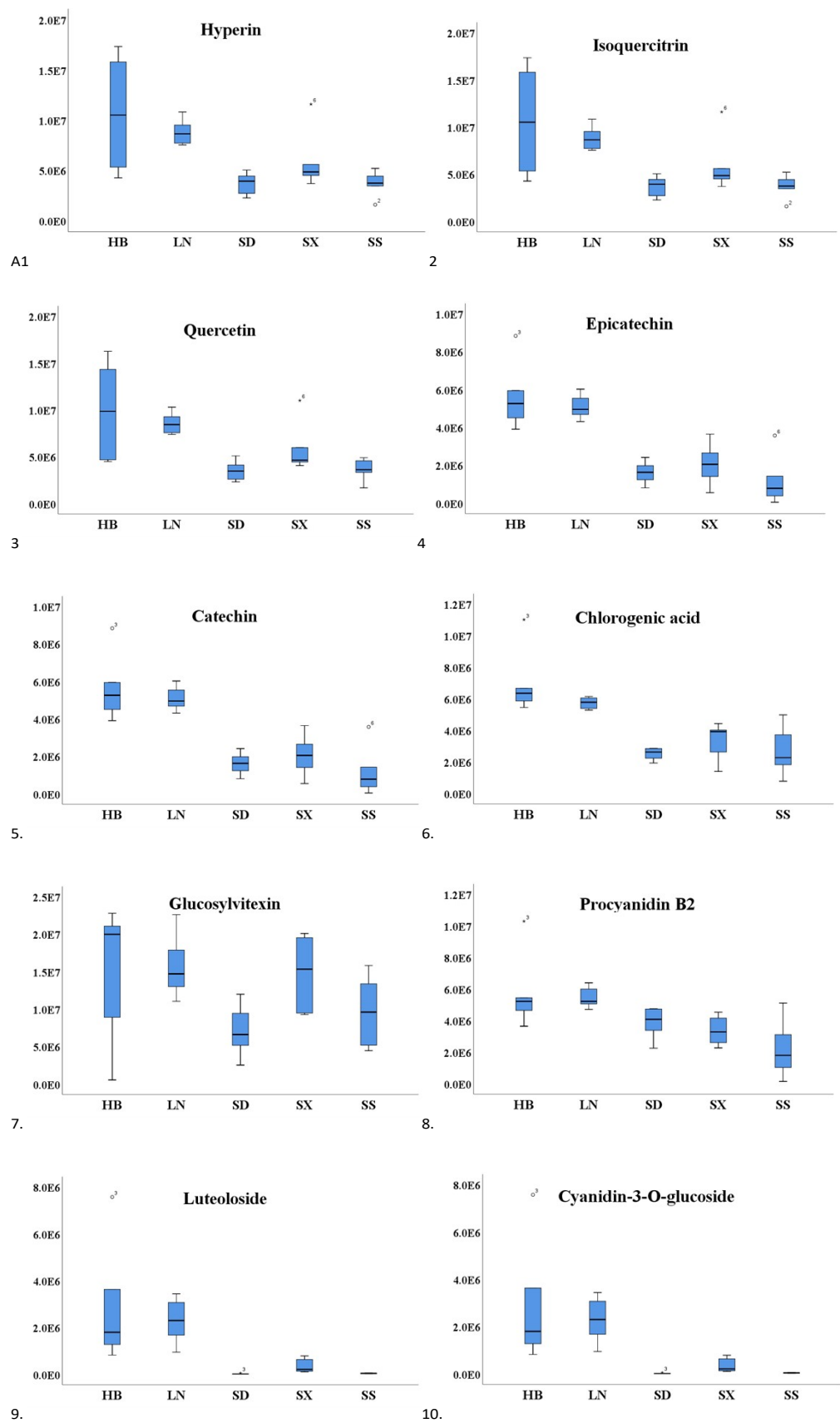
Note: 161 different components (positive ion mode) and 116 different components (negative ion mode), Contains 44 overlapping components.

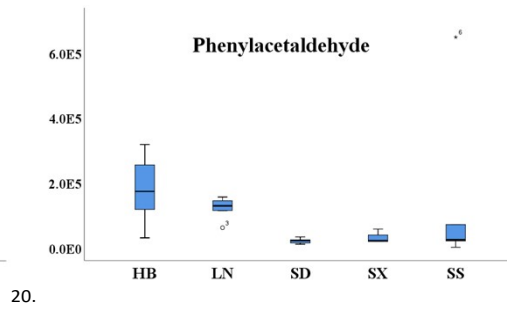
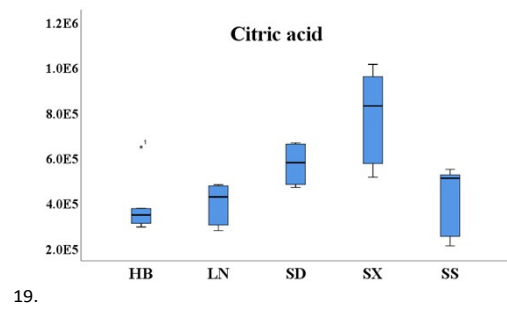
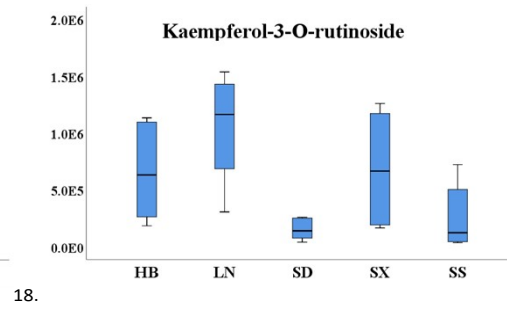
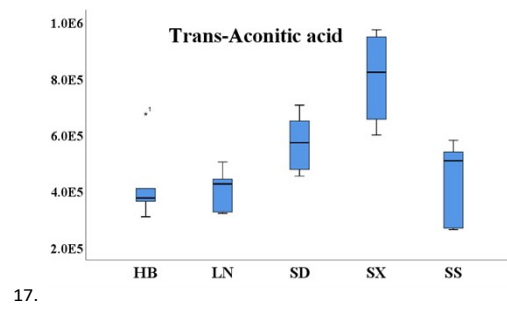
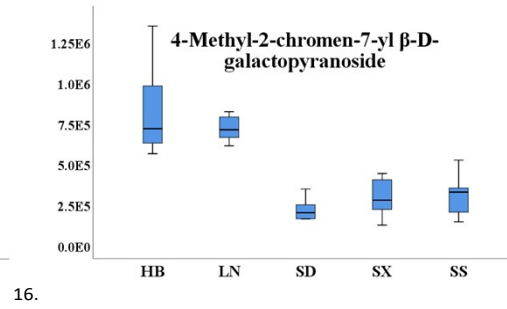
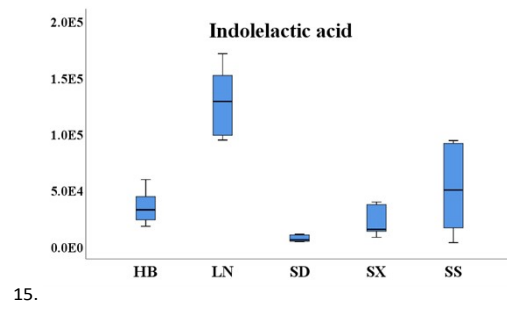
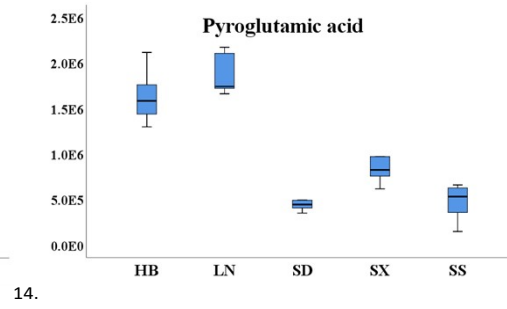
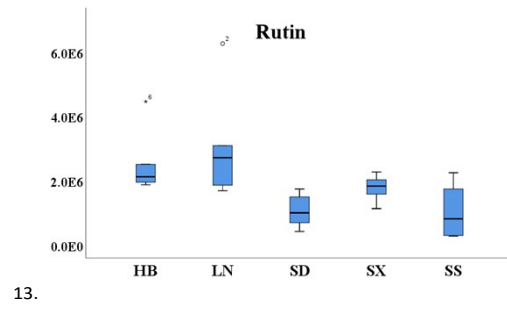
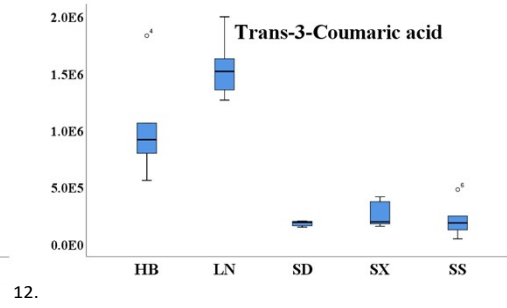
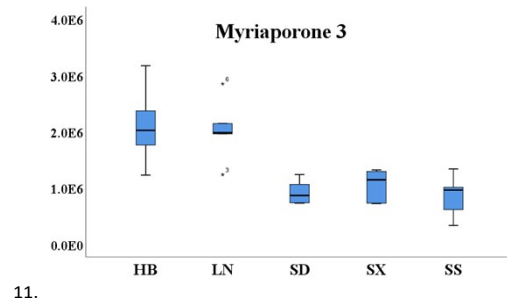
Table S2 Forty differential metabolites of hawthorn leaves in different geographical regions.

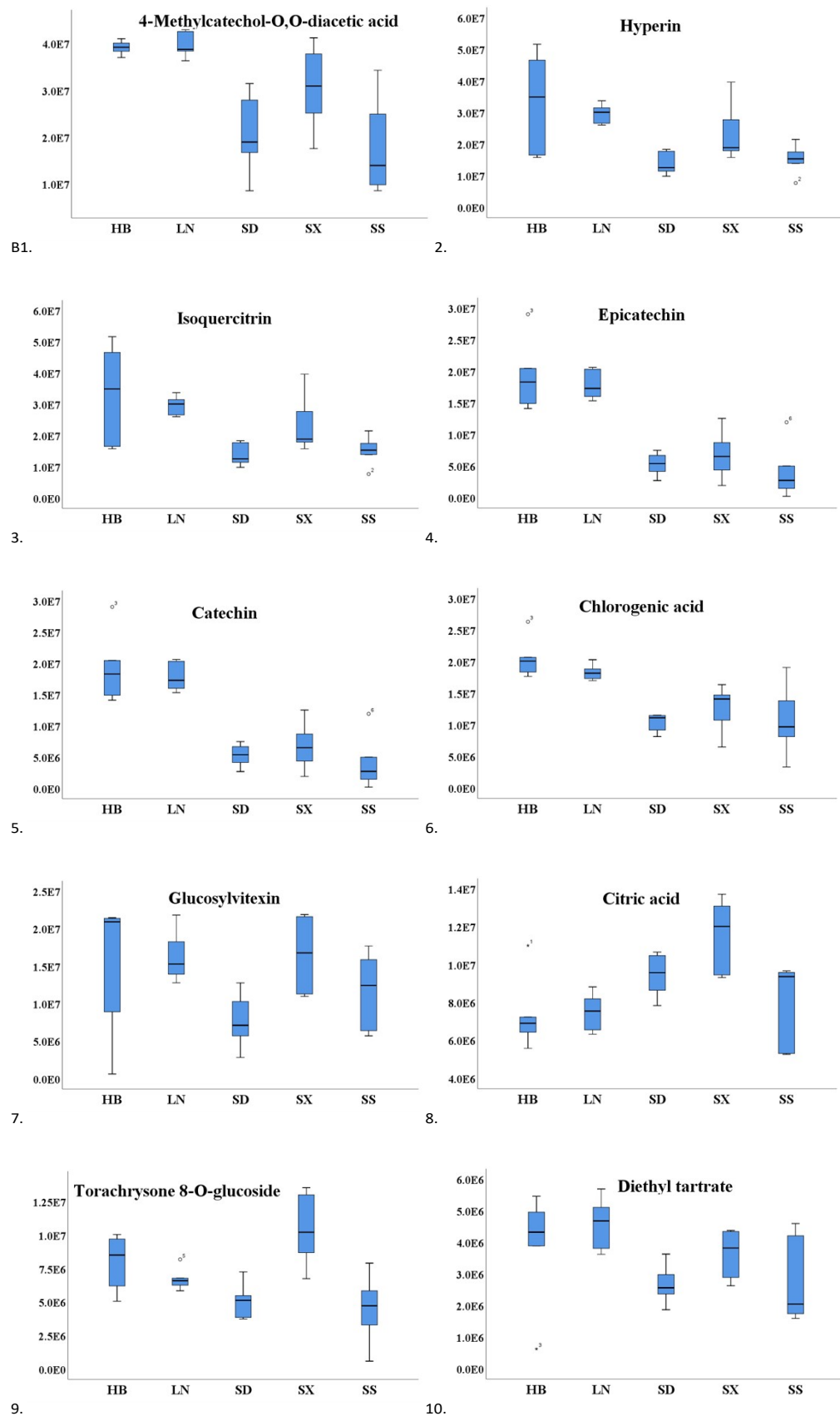
mode	class	Compounds	Intensity				VIP(>1)	P
			HB	LN	SD	SX		
ESI(+)	Flavonoids	Hyperin	31997099±110	29646162±29	13030849±32	22610041±70	3.16	3.45E
			94567	33269	81333	49505		-05
		Isoquercitrin	31997099±110	29646162±29	13030849±32	22610041±70	3.16	3.45E
			94567	33269	81333	49505		-05
		Epicatechin	16950307±554	17807797±22	4828471±175	7848586±392	3.08	2.01E
			1182	17839	3571	8982		-08
		Catechin	16950307±554	17807797±22	4828471±175	7848586±392	3.08	2.01E
			1182	17839	3571	8982		-08
		Procyanidin B2	7137767±2312	6467664±107	6385392±101	4734972±119	1.56	0.006
			417	6284	1206	9917		318
		Schaftoside	1461205±2667	1339221±173	1355097±159	899320±1271	1.50	1.7E-
			38	315	090	09		07
		Isoschaftoside	1461205±2667	1339221±173	1355097±159	899320±1271	1.50	1.7E-
			38	315	090	09		07
		Glucosylvitexin	16903955±651	16237146±33	6916720±331	14803758±45	2.21	0.000
			6542	20670	6889	19722		582
		Rutin	7542825±2110	9107609±414	3084561±149	5020797±126	1.48	1.93E
			041	6758	7018	6709		-05
		Kaempferol-3-O-rutinoside	2078229±1016	2447113±104	349496±2246	1356601±106	1.02	0.000
			259	0725	68	1491		367
		Luteoloside	1147458±9040	888456±3545	16635±7517	318808±3726	1.01	0.000
			92	98		770		384
		Cyanidin-3-O-glucoside	1147458±9040	888456±3545	16635±7517	318808±3726	1.01	0.000
			92	98		70		384
	Phenylprop anoids	Chlorogenic acid	19328283±259	18297945±11	10509320±13	13049252±28	2.71	3.53E
			6623	87961	52158	85996		-10

Organic acids	Citric acid	7375077±1893	7497182±990	9154963±114	9718171±293	2.12	0.025
		594	399	3180	0150		848
	Torachryson 8-O-glucoside	7956415±1884	6712517±803	553936±1423	9858711±228	1.77	7.21E
		004	389	967	8140		-05
	Trans-5-O-(4-coumaroyl)-D-quinic acid	3917080±1054	3827079±453	1382725±511	2012613±943	1.57	5.06E
		348	906	658	316		-08
	Quinic acid	5371020±7940	5073644±184	2886777±370	3694191±802	1.38	9.25E
		95	834	553	281		-10
	4-Methylactechol-O,O-diacetic acid	37715794±553	39648781±25	18455151±80	2830833±882	3.36	5.77E
		2522	94708	15631	7143		-07
	Terpenoids Asiatic acid	3529042±7226	3038913±554	5768352±149	4746072±630	1.16	9.80E
		14	105	5285	426		-07
Others	Diethyl tartrate	4340156±1324	4598250±783	251943±5756	2929201±977	1.57	0.000
		554	331	24	824		165
Flavonoids	Hyperin	10630724±547	8820308±122	3719831±106	5850533±288	3.15	5.89E
		3132	3749	6759	3096		-05
	Isoquercitrin	9910363±4993	8565704±110	3510222±103	5788044±263	3.15	5.89E
		292	5306	2367	5924		-05
	Quercetin	9910363±4993	8565704±110	3510222±103	5788044±263	3.03	4.07E
		292	5306	2367	5924		-09
	Epicatechin	5620124±1727	5076917±628	1614061±589	2057832±105	2.69	3.74E
		301	077	952	6523		-08
	Catechin	5620124±1727	5076917±628	1614061±589	2057832±105	2.69	3.74E
		301	077	952	6523		-08
	Glucosylvitexin	15555069±885	15665343±41	7060443±331	14850294±53	3.74	0.000
		2332	07176	8304	29380		523
	Procyanidin B2	5655089±1756	5430048±639	3644220±959	3449341±101	2.20	0.000
		538	193	269	4429		198
	Luteoloside	2850708±2220	2286829±920	19952±15866.	741893±8824	2.48	0.000

		276	796	648	71	241	
	Rutin	2416332±7214	3068615±166	958073±4771	1554885±418	1.34	5.87E
		96	6881	07	180		-05
	Cyanidin-3-O-glucoside	2850708±2220	2286829±920	19952±15866	741893±8824	2.48	0.000
		276	796		71		241
	Kaempferol-3-O-rutinoside	839793±43015	1048909±492	131304±8643	522226±4270	1.01	0.000
		5	674	5	13		318
	Chlorogenic acid	6947984±2045	5736426±345	2514761±367	3380085±115	2.69	1.43E
		625	171	025	0346		-08
Phenylprop anoids	4-Methyl-2-oxo-2H-chromen-7-yl β-D-galactopyranoside	731137±22917	722173±7864	256493±8844	366791±1830	1.01	2.65E
		9	3	4	06		-07
	Trans-3-Coumaric acid	1074461±6028	1546363±256	180562±2212	316659±1864	1.42	2.42E
		45	126	2	07		-08
Nitrogen- containing compounds	Pyroglutamic acid	1496426±2666	1857540±220	431649±5142	1012289±462	1.15	5.77E
		17	942	6	958		-10
	Indolelactic acid	46679±28401	129018±3003	7642±2787	33093±25930	1.40	1.35E
			2				-07
	trans-Aconitic acid	428628±14183	407408±7106	566363±9100	673245±2307	1.03	0.001
		6	5	3	55		477
Organic acids	Citric acid	396020±12938	398879±8892	558586±8740	652112±2453	1.09	0.001
		3	5	9	59		413
	Myriaporone 3	2143664±5045	2029989±514	873770±1926	990156±2072	2.16	5.06E
		73	362	31	42		-10
Others	Phenylacetaldehyde	209705±11995	122996±3325	22250±6874	35115±24110	1.13	8.02E
		4	5				-07







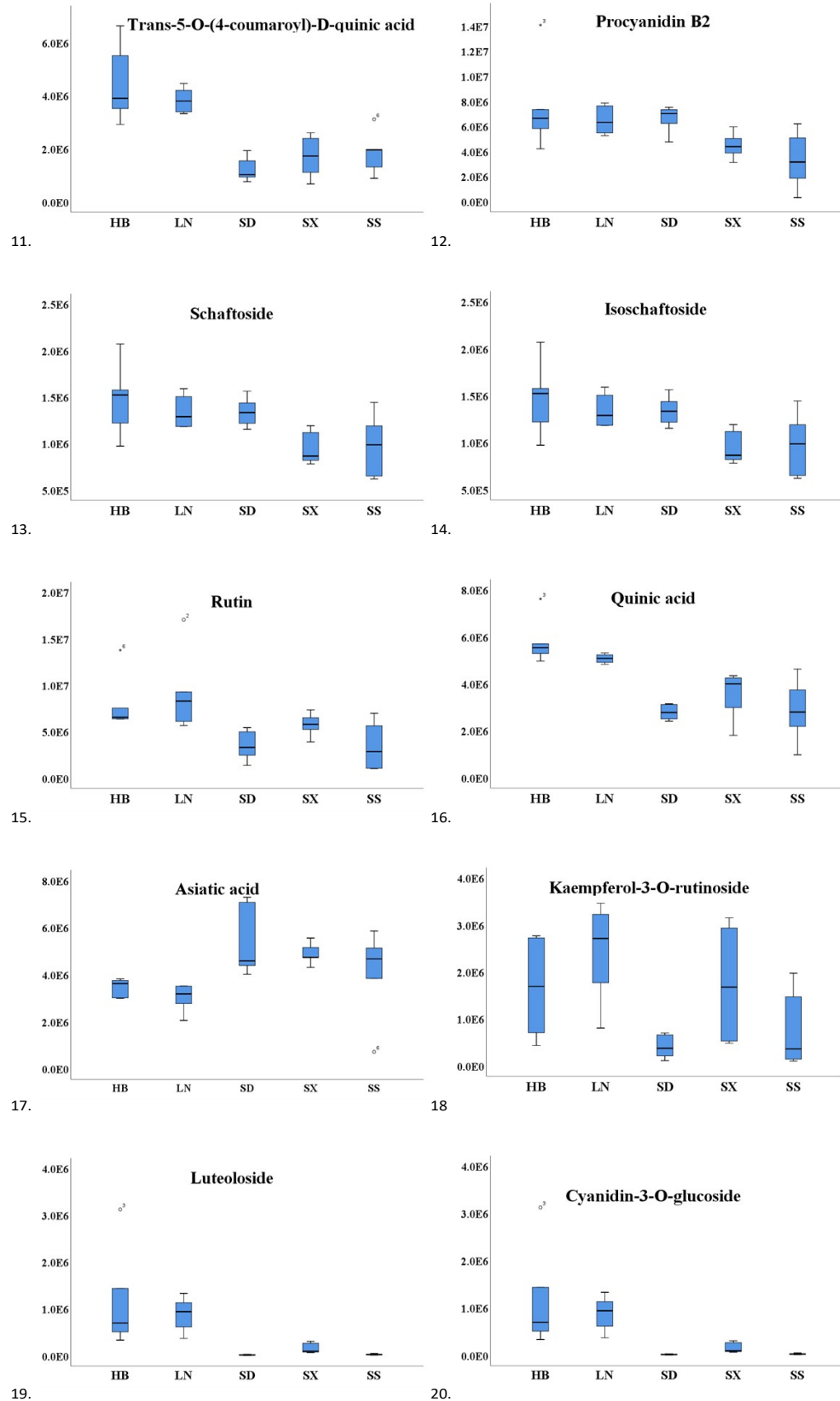


Fig. S3 Box plot of 40 differential metabolites: (A1) Hyperin (2) Isoquercitrin (3) Quercetin (4) Epicatechin (5) Catechin (6) Chlorogenic acid (7) Glucosylvitexin (8) Procyanidin B2 (9) Luteoloside (10) Cyanidin-3-O-glucoside (11) Myriaporone 3 (12) Trans-3-Coumaric acid (13) Rutin (14) Pyroglutamic acid (15) Indolelactic acid (16) 4-Methyl-2-oxo-2H-chromen-7-yl-β-D-galactopyranoside (17) Trans-Aconitic acid (18) Kaempferol-3-O-rutinoside (19) Citric acid (20) Phenylacetaldehyde.

(B1) 4-methylcatechol-O,O-diacetic acid (2) Hyperin (3) Isoquercitrin (4) Epicatechin (5) Catechin (6) Chlorogenic acid (7) Glucosylvitexin (8) Citric acid (9) Torachryson 8-O-glucoside (10) Diethyl tartrate (11) Trans-5-O-(4-coumaroyl)-D-quinic acid (12) Procyanidin B2 (13) Schaftoside (14) Isoschaftoside (15) Rutin (16) Quinic acid (17) Asiatic acid (18) Kaempferol-3-O-rutinoside (19) Luteoloside (20) Cyanidin-3-O-glucoside.
