

Table S3 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 ₈ 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 S4 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±11094567	29646162±2933269	13030849±3281333	22610041±7049505	3.16	3.45E-05
		Isoquercitrin	31997099±11094567	29646162±2933269	13030849±3281333	22610041±7049505	3.16	3.45E-05
		Epicatechin	16950307±5541182	17807797±2217839	4828471±1753571	7848586±3928982	3.08	2.01E-08
		Catechin	16950307±5541182	17807797±2217839	4828471±1753571	7848586±3928982	3.08	2.01E-08
		Procyanidin B2	7137767±2312417	6467664±1076284	6385392±1011206	4734972±1199917	1.56	0.006318
		Schaftoside	1461205±266738	1339221±173315	1355097±159090	899320±127109	1.50	1.7E-07
		Isoschaftoside	1461205±266738	1339221±173315	1355097±159090	899320±127109	1.50	1.7E-07
		Glucosylvitexin	16903955±6516542	16237146±3320670	6916720±3316889	14803758±4519722	2.21	0.000582
		Rutin	7542825±2110041	9107609±4146758	3084561±1497018	5020797±1266709	1.48	1.93E-05
		Aempferol-3-O-rutinoside	2078229±1016259	2447113±1040725	349496±224668	1356601±1061491	1.02	0.000367
		Luteoloside	1147458±904092	888456±354598	16635±7517	318808±3726770	1.01	0.000384

	Cyanidin-3-O-glucoside	1147458±904092	888456±354598	16635±7517	318808±372670	1.01	0.000384
Phenylpropanoids	Chlorogenic acid	19328283±2596623	18297945±1187961	10509320±1352158	13049252±2885996	2.71	3.53E-10
	Citric acid	7375077±1893594	7497182±990399	9154963±1143180	9718171±2930150	2.12	0.025848
	Torachryson 8-O-glucoside	7956415±1884004	6712517±803389	553936±1423967	9858711±2288140	1.77	7.21E-05
Organic acids	Trans-5-O-(4-coumaroyl)-D-quinic acid	3917080±1054348	3827079±453906	1382725±511658	2012613±943316	1.57	5.06E-08
	Quinic acid	5371020±794095	5073644±184834	2886777±370553	3694191±802281	1.38	9.25E-10
	4-Methylactechol-O,O-diacetic acid	37715794±5532522	39648781±2594708	18455151±8015631	2830833±8827143	3.36	5.77E-07
Terpenoids	Asiatic acid	3529042±722614	3038913±554105	5768352±1495285	4746072±630426	1.16	9.80E-07
Others	Diethyl tartrate	4340156±1324554	4598250±783331	251943±575624	2929201±977824	1.57	0.000165
	Hyperin	10630724±5473132	8820308±1223749	3719831±1066759	5850533±2883096	3.15	5.89E-05
	Isoquercitrin	9910363±4993292	8565704±1105306	3510222±1032367	5788044±2635924	3.15	5.89E-05
	Quercetin	9910363±4993292	8565704±1105306	3510222±1032367	5788044±2635924	3.03	4.07E-09
	Epicatechin	5620124±1727301	5076917±628077	1614061±589952	2057832±1056523	2.69	3.74E-08

	Catechin	5620124±1727301	5076917±628077	1614061±589952	2057832±1056523	2.69	3.74E-08
	Glucosylvitexin	15555069±8852332	15665343±4107176	7060443±3318304	14850294±5329380	3.74	0.000523
	Procyanidin B2	5655089±1756538	5430048±639193	3644220±959269	3449341±1014429	2.20	0.000198
	Luteoloside	2850708±2220276	2286829±920796	19952±15866.648	741893±882471	2.48	0.000241
	Rutin	2416332±721496	3068615±1666881	958073±477107	1554885±418180	1.34	5.87E-05
	Cyanidin-3-O-glucoside	2850708±2220276	2286829±920796	19952±15866	741893±882471	2.48	0.000241
	Kaempferol-3-O-rutinoside	839793±430155	1048909±492674	131304±86435	522226±427013	1.01	0.000318
	Chlorogenic acid	6947984±2045625	5736426±345171	2514761±367025	3380085±1150346	2.69	1.43E-08
Phenylpropanoids	4-Methyl-2-oxo-2H-chromen-7-yl β-D-galactopyranoside	731137±229179	722173±78643	256493±88444	366791±183006	1.01	2.65E-07
	Trans-3-Coumaric acid	1074461±602845	1546363±256126	180562±22122	316659±186407	1.42	2.42E-08
Nitrogen- containing compounds	Pyroglutamic acid	1496426±266617	1857540±220942	431649±51426	1012289±462958	1.15	5.77E-10
	Indolelactic acid	46679±28401	129018±30032	7642±2787	33093±25930	1.40	1.35E-07
	trans-Aconitic acid	428628±141836	407408±71065	566363±91003	673245±230755	1.03	0.001477

		Citric acid	396020±129383	398879±88925	558586±87409	652112±245359	1.09	0.001413
		Myriaporone 3	2143664±504573	2029989±514362	873770±192631	990156±207242	2.16	5.06E-10
Others		Phenylacetaldehyde	209705±119954	122996±33255	22250±6874	35115±24110	1.13	8.02E-07

