

FEM 1

	name	formula	monoisotopic mass	DemoMix 8mL mg/L
1	quercetin-3-arabinoside	C20H18O11	434,1	7,50
2	quercetin-3-glucoside	C21H20O12	464,1	18,16
3	quercetin-3-galactoside	C21H20O12	464,1	3,73
4	quercetin-3-glucuronide	C21H18O13	478,1	10,63
5	quercetin-3-rutinoside	C27H30O16	610,2	18,38
6	malvidin 3-glucoside	C23H25O12	493,1	26,56
7	cholesterol	C27H46O	386,4	90,00
8	<i>trans</i> -resveratrol	C14H12O3	228,1	560,00
9	procyanidin A2	C30H24O12	576,1	18,66

FEM2

1	fructose	C6H12O6	180,1	685,7
2	citramalic acid	C5H8O5	148,0	46,6
3	pyroglutamic acid	C5H7NO3	129,0	105,5
4	spermidine	C7H19N3	145,2	73,2
5	betaine	C5H11NO2	117,1	86,6
6	valine	C5H11NO2	117,1	22,5
7	galactose	C6H12O6	180,1	50,9
8	proline	C5H9NO2	115,1	79,7
9	cysteamine	C2H7NS	77,0	34,1
10	arginine	C6H14N4O2	174,1	121,3
11	cinnamic acid	C9H8O2	148,1	106,3