

Compound	t _{ret.} (min.)	RI _{ex} p.	RI _{lit.}	linden SIL		raspberry SIL		tea SIL	
				Area	TIC (%)	Area	TIC (%)	Area	TIC (%)
L-Alanine, TMS	8.195	939	N/A	10775105	0,03	12326561	0,05	17280530	0,06
Ethylamine, di-TMS	8.484	964	966 ^a	45309538	0,14	55158698	0,20	47888109	0,16
Carbodiimide, di-TMS	9.126	964	966 ^a	-	-	4735125	0,02	6642265	0,02
1,2-Dihydroxyethylene, di-TMS	9.663	978	N/A	-	-	4710395	0,02	-	-
Lactic acid, di-TMS	13.251	107 ₁	1073 _a	15899762	0,05	13855944	0,05	7011491	0,02
Glycolic acid, di-TMS	13.873	108 ₀	1083 _a	20709973	0,06	28732266	0,11	10189061	0,03
L-Valine, TMS	14.128	108 ₆	1083 _b	18550441	0,06	19778687	0,07	6925883	0,02
Pyruvic acid, enol, di-TMS	14.387	109 ₂	1095 _a	-	-	-	-	6634275	0,02
L-Alanine, di-TMS	15.082	110 ₈	1112 _a	-	-	-	-	5305633	0,02
Oxalic acid, di-TMS	16.528	114 ₁	1143 _a	-	-	-	-	7016845	0,02
β-Lactic acid, di-TMS	16.945	115 ₁	1151 _b	6671205	0,02	15518959	0,06	-	-
L-Leucine, TMS	17.235	115 ₈	1156 _a	5658388	0,02	5912213	0,02	-	-
L-Proline, TMS	17.926	117 ₃	1174 _a	54532213	0,17	11242973 ₀	0,41	-	-
L-Isoleucine, TMS	18.118	117 ₈	1178 _b	17728133	0,05	14693330	0,05	-	-
Malonic acid, di-TMS	19.700	121 ₄	1216 _a	6671707	0,02	32529528	0,12	8462788	0,03
L-Valine, di-TMS	20.213	122	1226	-	-	7592328	0,03	-	-

		6	a						
1,3-Dihydroxyacetone, di-TMS	20.469	123 ₁	N/A	6261343	0,02	29617745	0,11	7048647	0,02
Urea, di-TMS	21.318	125 ₁	1255 _a	-	-	10951967	0,04	8115525	0,03
L-Serine, di-TMS	21.979	126 ₆	N/A	41352796	0,13	19046359	0,07	29524381	0,10
Phosphoric acid, tri-TMS	22.966	128 ₈	1289 _a	458749485	1,42	43925059 ₀	1,62	217585561	0,74
Glycerol, tri-TMS	23.162	129 ₂	1293 _a	465083833	1,44	56506145 ₄	2,08	32262955	0,11
L-Threonine	23.661	130 ₄	1305 _a	24328342	0,08	60253101	0,22	24233593	0,08
Succinic acid, di-TMS	24.464	132 ₃	1324 _a	71181892	0,22	19852197 ₃	0,73	41856718	0,14
Glyceric acid, tri-TMS	25.593	134 ₉	1348 _a	85445160	0,26	11883406 ₀	0,44	27190564	0,09
Fumaric acid, di-TMS	25.912	135 ₆	1355 _a	12861276	0,04	13101634	0,05	5019008	0,02
cis-Dihydro-3,4-dihydroxy-2(3H)-furanone, di-TMS	27.084	138 ₄	1384 _a	29163946	0,09	66716393	0,25	42636348	0,15
L-Threonine, tri-TMS	28.014	140 ₆	1406 _a	-	-	6062836	0,02	15270726	0,05
Tartronic acid, tri-TMS	28.211	141 ₁	1408 _a	-	-	7949314	0,03	-	-
L-Aspartic acid, di-TMS	29.125	143 ₃	1427 _b	-	-	18010185	0,07	179137623	0,61
1,2-Ethanediol phenyl, di-TMS	29.379	143 ₉	N/A	6864235	0,02	-	-	-	-
2,3,4-Trihydroxybutyric acid, γ -lactone, di-TMS	29.460	144 ₁	1441 _a	-	-	5501204	0,02	-	-

3,4-Dihydroxybutanoic acid, tri-TMS	29.942	145 ₃	1456 _a	10070711	0,03	11683924	0,04	5199064	0,02
4-Methoxyphenethoxy, TMS	30.680	147 ₁	N/A	7889854	0,02	-	-	-	-
Malic acid, tri-TMS	32.297	151 ₂	1512 _a	1440925254	4,46	16282786 ₆₉	6,00	512599740	1,75
Salicylic acid, di-TMS	32.579	151 ₉	1522 _a	7006645	0,02	20074314	0,07	6658834	0,02
Pyroglutamic acid, di-TMS	33.065	153 ₁	1532 _a	22238040	0,07	-	-	133799509	0,46
Threitol, tetra-TMS	33.350	153 ₉	1540 _a	19122084	0,06	34871623	0,13	-	-
4-Aminobutyric acid, tri-TMS	33.486	154 ₂	1541 _a	-	-	28929446	0,11	-	-
Aspartic acid, tri-TMS	33.504	154 ₃	1540 _a	-	-	-	-	353006336	1,21
Phenylalanine, TMS	33.709	154 ₈	1549 _a	15093138	0,05	-	-	14534236	0,05
2,3,4-Trihydroxybutyric acid, isomer 1, tetra-TMS	34.729	157 ₄	1575 _a	32093776	0,10	12421384 ₀	0,46	32923961	0,11
NN	34.997	158 ₁	-	70170775	0,22	-	-	-	-
2,3,4-Trihydroxybutyric acid, isomer 2, tetra-TMS	35.456	159 ₃	1595 _a	584776158	1,81	53157286 ₅	1,96	275296529	0,94
α -Hydroxyglutaric acid, tri-TMS	35.566	159 ₆	1597 _a	10454051	0,03	21291024	0,08	-	-
L-Asparagine, di-TMS	35.977	160 ₇	N/A	27376795	0,08	31773863	0,12	20304456	0,07
Carbohydrate, TMS	36.162	161 ₂	-	-	-	67541905	0,25	-	-
Phenylalanine, di-TMS	37.099	163	1640	-	-	6963925	0,03	-	-

		7	a						
Glutamine, tri-TMS	37.209	164 0	1642 a	7159051	0,02	17012653	0,06	104606827	0,36
Arabinofuranose, tetra-TMS	37.394	164 5	1647 a	6301291	0,02	8177055	0,03	9720978	0,03
Arabinose, tetra-TMS	37.536	164 9	1648 a	26111264	0,08	41999022	0,15	18629911	0,06
Arabinoic acid, γ -lactone, tri-TMS	37.707	165 4	1650 a	5249880	0,02	6952497	0,03	-	-
Rhamnose, tetra-TMS	38.002	166 2	1657 a	-	-	-	-	25189208	0,09
Phloroglucinol, tri-TMS	38.040	166 3	1664 a	18992019	0,06	-	-	-	-
Xylofuranose, tetra-TMS	38.139	166 6	1668 a	10048082	0,03	7724196	0,03	-	-
Tartaric acid, tetra-TMS	38.383	167 2	1667 a	-	-	22838662	0,08	14938090	0,05
α -Ribofuranose, tetra-TMS	38.701	168 0	1680 a	59552164	0,18	17263447	0,06	25674128	0,09
Carbohydrate, TMS	38.705	168 1	-	-	-	48851133	0,18	-	-
L-Asparagine, tri-TMS	39.075	169 1	1690 a	-	-	35444750	0,13	-	-
L-Ribose, tetra-TMS	39.152	169 3	1694 a	28118834	0,09	19473397	0,07	-	-
L-Theanine	39.697	170 8	N/A	-	-	-	-	199575739	0,68
Suberic acid, di-TMS	39.738	170 9	1710 a	4126176	0,01	-	-	-	-
Carbohydrate, TMS	39.965	171 6	-	-	-	-	-	41651569	0,14

Levoglucozan pyranose, tri-TMS	40.446	172 ₉	1730 _a	-	-	-	-	7850410	0,03
α -Xylopyranose, tetra-TMS	40.795	173 ₉	1740 _a	20682526	0,06	42466510	0,16	13954855	0,05
Xylitol, penta-TMS	41.064	174 ₇	1750 _a	-	-	6125129	0,02	-	-
Ribitol, penta-TMS	41.504	176 ₀	1761 _a	43445158	0,13	63216543	0,23	58609928	0,20
Lyxofuranose, tetra-TMS	41.836	176 ₉	1770 _a	16068041	0,05	23931269 ₆	0,88	-	-
Carbohydrate, TMS	42.182	177 ₉	-	-	-	21195857 ₈	0,78	95707661	0,33
Carbohydrate acid, TMS	42.580	179 ₀	-	-	-	75454110	0,28	-	-
β -Xylopyranose, TMS	42.742	179 ₅	1796 _a	20056662	0,06	53208792	0,20	55611236	0,19
Carbohydrate, TMS	42.938	180 ₀	-	101381609	0,31	88214575	0,33	56105131	0,19
Ribonic acid, penta-TMS	43.102	180 ₅	1805 _a	161973389	0,50	13367535 ₄	0,49	192520297	0,66
Azelaic acid, di-TMS	43.219	180 ₉	1808 _a	30118642	0,09	27828475	0,10	-	-
Carbohydrate acid, TMS	43.372	181 ₃	-	47611810	0,15	35536818	0,13	98575315	0,34
Gulose, penta-TMS	43.988	183 ₂	1834 _a	-	-	-	-	104918215	0,36
Methyl glucofuranoside, tetra-TMS , isomer 1	44.096	183 ₅	1836 _a	1002492625	3,10	33858770 ₅	1,25	1209751993	4,14
Caffeine	44.463	184 ₆	1842 _a	-	-	-	-	468850176	1,60
α -Fructofuranose, penta-TMS	44.507	184	1845	-	-	16441152	6,06	-	-

		7	a			93			
Shikimic acid, tetra-TMS	44.521	184 7	1843 a	2847293813	8,81	-	-	444023097	1,52
β -Fructofuranose, penta-TMS	44.826	185 7	1854 a	2636745262	8,16	27365282 82	10,08	888536398	3,04
α -Galactofuranose, penta-TMS	45.158	186 6	1865 a	73347034	0,23	18906377 3	0,70	71568102	0,24
Glucopyranose, penta-TMS	45.562	187 9	N/A	1040375411	3,22	37501449 9	1,38	504887385	1,73
Methyl glucofuranoside, tetra-TMS , isomer 2	45.694	188 2	1882 b	1427496505	4,42	61621589 0	2,27	452880195	1,55
β -Glucofuranose, penta-TMS	45.921	188 9	1889 a	645484998	2,00	80377885 6	2,96	80056406	0,27
L-Tyrosine, di-TMS	46.147	189 6	N/A	139972066	0,43	-	-	-	-
Quinic acid, penta-TMS	46.396	190 4	1901 a	2179338477	6,74	46893436 1	1,73	1852243296	6,33
2-Amino-2-deoxyglucose, tetra-TMS	46.596	191 0	1907 a	118413556	0,37	-	-	-	-
Carbohydrate, TMS	46.720	191 4	-	169065377	0,52	17723691 7	0,65	-	-
Carbohydrate, TMS	46.870	191 8	-	152515676	0,47	-	-	-	-
Gluconic acid, δ -lactone, tetra-TMS	46.960	192 1	1920 a	330305866	1,02	47015265 2	1,73	137502547	0,47
α -D-Glucopyranose, penta-TMS	47.353	193 3	1935 a	2558717864	7,92	28448805 74	10,48	1501447692	5,13
β -Mannopyranose, penta-TMS	47.664	194 3	1943 a	858464643	2,66	63701204 3	2,35	825075574	2,82
Carbohydrate, TMS	47.746	194 6	-	-	-	46184954 5	1,70	222288195	0,76

p-Coumaric acid, di-TMS	47.748	194 ₆	1947 _a	246793840	0,76	-	-	-	-
Coniferyl alcohol, di-TMS	47.962	195 ₂	1954 _a	-	-	-	-	14192868	0,05
D-Gulonic acid, γ -lactone, tetra-TMS	48.018	195 ₄	1958 _a	-	-	42710517	0,16	31947380	0,11
NN	48.170	195 ₉	-	243337656	0,75	54766025 ₉	2,02	-	-
Carbohydrate, TMS	48.263	196 ₂	-	298934507	0,93	-	-	51440918	0,18
Mannitol, hexa-TMS	48.481	196 ₉	1973 _a	132359224	0,41	98729149	0,36	-	-
Carbohydrate, TMS	48.558	197 ₁	-	-	-	-	-	31690689	0,11
Glucitol, hexa-TMS	48.891	198 ₁	1880 _a	181960217	0,56	44112211	0,16	16254241	0,06
Gallic acid, tetra-TMS	48.995	198 ₅	1985 _a	28617282	0,09	15188823 ₇	0,56	124939390	0,43
D-chiro-Inositol, hexa-TMS	49.369	199 ₆	N/A	-	-	14749598 ₁	0,54	-	-
deoxy-Inositol, penta-TMS	49.678	200 ₆	2004 _a	1090257604	3,37	58543508 ₉	2,16	256349534	0,88
Carbohydrate, TMS	49.854	201 ₂	-	144164348	0,45	-	-	-	-
Carbohydrate, TMS	50.331	202 ₈	-	976785285	3,02	-	-	-	-
β -D-Glucopyranose, penta-TMS	50.458	203 ₂	2032 _a	2002536827	6,20	30560146 ₄₂	11,26	1317948431	4,50
scyllo-Inositol, penta-TMS	50.697	204 ₀	2040 _a	495286942	1,53	43977854	0,16	93724828	0,32
Carbohydrate, TMS	50.887	204	-	508704950	1,57	37216902	1,37	-	-

		6				8			
Gluconic acid, hexa-TMS	50.945	204 ₈	2046 _a	421586516	1,30	25435823 ₅	0,94	64199877	0,22
Carbohydrate acid, TMS	51.248	205 ₈	-	52321310	0,16	78233601	0,29	-	-
Carbohydrate acid, TMS	51.371	206 ₂	-	76940225	0,24	-	-	-	-
scyllo-Inositol, hexa-TMS	51.696	207 ₂	2071 _a	32887220	0,10	15988370	0,06	-	-
Carbohydrate, TMS	51.818	207 ₆	-	35338523	0,11	-	-	-	-
Carbohydrate, TMS	52.003	208 ₂	-	33032392	0,10	-	-	-	-
Traumatic acid, di-TMS	52.070	208 ₄	2086 _a	-	-	12806295	0,05	-	-
Galactaric acid, hexa-TMS	52.218	208 ₉	2090 _a	11739138	0,04	10919424	0,04	5411040	0,02
NN	52.413	209 ₆	-	-	-	-	-	63677740	0,22
Carbohydrate acid, TMS	52.750	210 ₇	-	-	-	84920989	0,31	29622393	0,10
Carbohydrate, TMS	52.898	211 ₂	-	326539041	1,01	70733059 ₂	2,61	409869619	1,40
myo-Inositol, hexa-TMS	53.450	213 ₁	2129 _a	512302132	1,59	12068695 ₉₁	4,45	122480575	0,42
(E)-Caffeic acid, tri-TMS	54.111	215 ₃	2154 _a	16152173	0,05	69715249	0,26	-	-
Carbohydrate, TMS	54.349	216 ₁	-	89450964	0,28	-	-	-	-
Carbohydrate, TMS	56.637	224 ₁	-	-	-	-	-	58578273	0,20

Carbohydrate, TMS	58.585	231 1	-	-	-	37194233	0,14	-	-
2-O-Glycerol- α -D-galactopyranoside, hexa-TMS	60.284	237 3	2375 a	15992205	0,05	75443868	0,28	75257998	0,26
Glycerol glycoside, TMS	61.571	242 2	-	-	-	39357635	0,15	-	-
Glycerol glycoside, TMS	61.696	242 7	-	-	-	54494568	0,20	29831000	0,10
β -D-Glucopyranuronic acid, penta-TMS	61.878	243 4	2437 a	21572585	0,07	23244916 1	0,86	96852363	0,33
Uridine, tri-TMS	62.825	247 0	2469 a	12930106	0,04	4685321	0,02	-	-
Carbohydrate, TMS	65.552	257 8	-	-	-	46045508	0,17	-	-
Carbohydrate, TMS	66.003	259 6	-	651102172	2,01	-	-	1431052610	4,89
Carbohydrate, TMS	66.559	261 9	-	71551518	0,22	-	-	287553126	0,98
Carbohydrate, TMS	67.446	265 5	-	-	-	-	-	116640245	0,40
Carbohydrate, TMS	67.579	266 1	-	891584791	2,76	14986771	0,06	2138668333	7,31
Xylobiose, penta-TMS	68.209	268 7	2691 a	-	-	-	-	250027332	0,85
Carbohydrate, TMS	68.317	269 1	-	-	-	28886622	0,11	147928424	0,51
β -Lactulose, octa-TMS	68.754	271 0	2705 a	154390771	0,48	-	-	-	-
Sucrose, octa-TMS	68.870	271 5	2716 a	734132691	2,27	72239771	0,27	2178090248	7,44
Carbohydrate, TMS	69.069	272	-	428842425	1,33	20389007	0,75	244025473	0,83

		3				2			
Carbohydrate, TMS	69.457	274 0	-	-	-	29969441	0,11	-	-
Carbohydrate, TMS	69.761	275 3	-	-	-	48996101	0,18	517520034	1,77
α -Cellobiose, octa-TMS	69.971	276 2	2761 a	44644582	0,14	49553329	0,18	-	-
Carbohydrate, TMS	70.549	278 7	-	-	-	83612544	0,31	-	-
Carbohydrate, TMS	71.245	281 7	-	50261642	0,16	57520886	0,21	-	-
Carbohydrate, TMS	71.410	282 4	-	45059588	0,14	-	-	309137632	1,06
Carbohydrate, TMS	71.542	283 0	-	-	-	66020256	0,24	-	-
Carbohydrate, TMS	71.958	284 9	-	-	-	69068572	0,25	-	-
Carbohydrate, TMS	72.066	285 3	-	-	-	12914942 7	0,48	-	-
Carbohydrate, TMS	72.856	288 8	-	-	-	-	-	117421497	0,40
epi-Catechin, penta-TMS	73.246	290 6	2907 a	432335889	1,34	31038680	0,11	1011754787	3,46
Carbohydrate, TMS	73.498	291 7	-	-	-	-	-	338488127	1,16
Catechine, penta-TMS	73.829	293 2	2936 a	92258972	0,29	29775569	0,11	186010505	0,64
α -Isomaltose, octa-TMS	74.383	295 8	2953 a	42354557	0,13	72795292	0,27	-	-
Carbohydrate, TMS	74.502	296 3	-	-	-	-	-	149416726	0,51

Gentibiose, octa-TMS	74.901	298 1	2990 a	-	-	17586431 2	0,65	-	-
NN	74.947	298 3	-	-	-	-	-	249992132	0,85
NN	75.058	298 9	-	-	-	-	-	586378926	2,00
NN	75.285	299 9	-	-	-	-	-	1424799074	4,87
β -Isomaltose, octa-TMS	75.300	300 0	3005 a	-	-	18109531	0,07	168739979	0,58
Galactinol, nona-TMS	75.607	301 4	3012 a	-	-	-	-	93981078	0,32
Kaempferol, tetra-TMS	77.678	311 2	3114 a	-	-	22458157	0,08	8232058	0,03
Carbohydrate, TMS	78.913	317 2	-	48969273	0,15	-	-	-	-
Chlorogenic acid, hexa-TMS	79.073	318 0	3183 a	15076790	0,05	48057840	0,18	5771582	0,02
Quercetin, tetra-TMS	79.734	321 3	3213 a	8284743	0,03	29946846	0,11	37106949	0,13
Carbohydrate, TMS	80.046	322 8	-	-	-	26135054 8	0,96	-	-
Quercetin, penta-TMS	80.174	323 5	3239 a	9513015	0,03	52351917	0,19	27632044	0,09
Neochlorogenic acid, hexa-TMS	80.776	326 5	3268 a	13236590	0,04	5069309	0,02	-	-
Carbohydrate, TMS	81.210	328 7	-	-	-	28859775	0,11	-	-
Ellagic acid, tetra-TMS	82.060	333 0	3329 a	-	-	10326307 3	0,38	-	-
Carbohydrate, TMS	83.138	338	-	55765514	0,17	-	-	372396902	1,27

		5							
Carbohydrate, TMS	83.295	339 4	-	-	-	-	-	78088510	0,27
Carbohydrate, TMS	84.299	344 7	-	-	-	-	-	54994775	0,19
Carbohydrate, TMS	84.434	345 4	-	-	-	-	-	35636030	0,12
Raffinose, TMS	85.418	350 6	3504 _a	78316465	0,24	21522041	0,08	408009805	1,39
Epicatechin gallate, hepta-TMS	92.439	388 8	3892 _a	-	-	-	-	438954886	1,50
NN	93.756	390 0	-	-	-	-	-	1056527932	3,61
				100, 32314247025 00		27135515 048 100,00		2925575866 6	100,0 0

^a - Isidorov (2020)

^b - <https://webbook.nist.gov/>