

mass @ retention time	Simulated region Sample	Simulated transit time		48 hr				96 hr					
		Prox		Trans		Dist		Prox		Trans		Dist	
		1	3	1	3	1	3	1	3	1	3	1	3
	Formula	Log of normalized value											
p100.076@4.8	C43H83O13P	2,18	2,23	2,70	2,39	2,41	2,78	2,64	2,66	2,50	2,53	2,52	2,53
p120.08@4.7		2,63	2,62	3,06	2,66	2,54	2,89	3,10	3,00	2,61	2,52	1,33	1,03
p132.101@7.8	C5H8O3S	0,93	1,05	1,51	1,49	2,36	2,70	1,68	1,61	1,99	2,02	2,13	2,10
p144.08@5.7		1,96	1,93	2,17	2,02	1,75	2,18	2,27	2,19	1,72	1,78	1,65	1,60
p149.023@13.6		2,00	1,93	2,02	2,01	1,87	1,99	2,04	2,06	1,90	1,93	1,86	1,95
p166.087@4.7	C13H18O2	1,27	0,91	1,91	1,95	2,29	2,72	2,54	2,35	2,68	2,85	1,88	1,60
p166.087@8.2	C24H33FO6	2,47	2,46	2,71	2,51	2,42	2,60	2,78	2,69	2,45	2,39	1,35	1,17
p170.118@6.3		2,09	2,13	2,39	2,24	2,20	2,40	2,44	2,32	2,22	2,23	2,18	2,21
p181.123@12.1		1,40	1,43	1,71	1,60	1,68	1,69	1,53	1,73	1,66	1,70	1,48	1,40
p188.072@5.3	C18H39NO2	3,03	3,10	3,03	2,21	1,17	1,37	2,74	2,98	1,24	1,15	1,01	0,70
p197.13@5.7		1,80	1,73	2,11	1,91	1,91	2,23	2,03	2,01	1,98	1,91	2,07	2,04
p198.15@7.7		2,05	1,96	2,27	2,21	2,20	2,48	2,17	2,03	2,18	2,39	2,23	2,23
p203.178@12.1		1,75	1,71	1,93	1,79	1,91	1,98	1,88	1,93	1,88	1,91	1,75	1,74
p205.099@5.3		2,36	2,44	2,31	1,56	0,00	0,01	1,98	2,28	0,48	0,85	0,00	0,00
p207.14@12.1		1,74	1,75	1,96	1,83	1,92	2,01	1,87	1,92	1,88	2,00	1,72	1,68
p208.171@9.6		2,12	2,24	2,11	1,95	1,80	1,97	1,90	1,53	1,49	1,52	0,96	0,31
p209.138@10.3	C24H34O4	1,71	1,77	1,63	1,40	1,42	1,64	2,07	2,00	1,81	1,78	1,63	1,65
p211.145@6.6		2,14	2,12	2,38	2,15	2,22	2,35	2,39	2,20	2,29	2,40	2,35	2,31
p213.166@10.3		2,05	2,03	1,97	1,80	1,84	1,94	2,38	2,31	2,11	2,10	1,93	1,91
p215.181@12.1		2,20	2,19	2,40	2,31	2,33	2,47	2,31	2,39	2,36	2,42	2,21	2,19
p221.155@12.1		2,21	2,25	2,45	2,34	2,40	2,51	2,36	2,39	2,37	2,44	2,27	2,25
p226.181@9		1,86	1,77	1,92	1,85	1,80	2,07	1,95	2,00	1,87	1,89	1,83	1,89
p227.14@5.8	C21H26O2	2,11	2,04	1,97	1,83	1,85	2,01	2,37	2,30	2,13	2,16	1,89	1,93
p227.162@10.3		2,12	2,16	2,64	2,45	2,53	2,65	2,56	2,49	2,63	2,65	2,64	2,68
p228.233@13.8		2,05	2,30	2,42	2,39	2,24	2,63	2,32	2,38	2,45	2,57	2,22	2,45
p229.192@12.1		1,95	1,97	2,19	2,07	2,19	2,20	2,05	2,18	2,09	2,18	2,01	2,00
p232.228@8.8		1,99	2,08	1,95	1,85	1,83	1,85	1,86	1,54	1,39	1,56	1,43	1,42
p235.17@12.1		1,83	1,83	2,08	1,98	2,02	2,13	1,95	2,04	1,99	2,09	1,89	1,79
p236.128@8.2		0,70	0,85	1,40	1,48	1,82	2,20	2,00	1,77	2,18	2,38	1,51	1,14
p239.149@7.2	C27H44NO7P	2,53	2,57	2,77	2,66	2,69	2,94	2,74	2,69	2,79	2,77	2,73	2,76
p241.195@10.3		1,99	1,96	1,97	1,69	1,75	1,87	2,27	2,25	2,03	2,07	1,87	1,85
p243.209@12.1		2,11	2,13	2,36	2,22	2,33	2,42	2,25	2,34	2,29	2,37	2,21	2,13
p245.131@6.9		2,39	2,34	2,30	2,13	2,20	2,29	2,67	2,63	2,45	2,47	2,21	2,27
p245.154@9.6		1,96	2,27	2,22	2,00	1,93	2,25	2,28	2,28	1,97	2,04	1,98	1,93
p245.155@10.3		2,47	2,45	2,60	2,32	2,14	2,27	2,21	2,13	2,35	2,54	2,57	2,49
p247.171@12.1		2,08	2,20	2,37	2,26	2,32	2,40	2,30	2,34	2,29	2,36	2,17	2,14
p249.185@12.1		1,53	1,60	1,74	1,65	1,77	1,82	1,69	1,69	1,78	1,73	1,57	1,47

p251.048@14.8		1,93	1,86	1,96	1,91	1,92	2,00	2,02	1,90	1,95	2,04	2,04	1,91
p251.15@4.5		1,69	1,67	2,01	1,78	0,55	1,45	2,19	2,14	1,79	1,68	0,93	0,96
p253.161@9.6		2,23	2,16	2,36	2,16	1,85	1,99	1,93	1,90	2,13	2,34	2,34	2,29
p255.205@10.3		1,73	1,71	1,71	1,33	1,54	1,58	2,04	2,02	1,78	1,81	1,50	1,61
p256.264@15.2	C18H37NO2	3,06	3,23	3,44	3,45	3,93	3,43	3,33	3,26	3,58	3,52	3,30	3,45
p257.267@15.2		2,34	2,53	2,72	2,71	3,22	2,74	2,61	2,53	2,82	2,79	2,58	2,74
p258.271@15.2	C24H38O3	1,39	1,59	1,68	1,77	2,23	1,75	1,59	1,60	1,84	1,84	1,62	1,73
p259.171@10.3	C13H14N2O8	1,93	1,94	1,87	1,70	1,79	1,92	2,26	2,22	2,05	2,06	1,77	1,87
p260.259@9.9	C10H16N2O2	1,65	1,75	2,05	2,03	2,15	2,22	2,28	2,22	2,23	2,26	2,06	2,04
p261.126@6.2		1,94	1,99	2,31	2,13	2,12	2,26	2,21	2,01	2,18	2,21	2,18	2,19
p261.185@12.1		1,90	1,99	2,19	2,11	2,14	2,28	2,10	2,18	2,10	2,18	1,97	1,90
p265.253@14	C18H20O4	1,62	1,97	2,47	2,38	2,06	2,56	2,04	2,26	2,58	2,64	2,41	2,55
p270.279@14.3		2,58	2,55	2,54	2,55	2,52	2,60	2,49	2,55	2,55	2,49	2,53	2,54
p271.17@9.6		3,01	3,00	3,16	2,93	2,69	2,79	2,75	2,72	2,93	3,11	3,16	3,09
p272.174@9.6		2,35	2,32	2,51	2,21	1,98	2,13	2,05	1,99	2,26	2,40	2,45	2,42
p274.274@10.5		1,15	1,17	1,85	1,91	2,38	2,10	2,11	1,99	1,98	2,14	1,88	2,07
p275.201@12.1		2,14	2,18	2,42	2,25	2,36	2,46	2,29	2,35	2,33	2,39	2,20	2,17
p282.278@15.4		1,71	1,77	1,76	1,77	1,75	1,99	1,81	1,86	1,82	1,98	1,92	2,10
p283.264@14		1,44	1,64	2,08	1,94	1,65	2,15	1,70	1,81	2,21	2,26	1,96	2,17
p284.295@11.6	C16H20O2	1,75	1,82	2,39	2,38	2,94	2,39	2,30	2,13	2,46	2,50	2,29	2,59
p286.221@15.2		1,82	1,77	1,77	1,68	1,92	1,77	1,71	1,71	1,87	1,82	1,81	1,63
p288.289@11	C25H32O10	2,35	2,48	3,19	3,24	3,74	3,14	2,94	2,91	3,13	3,19	2,88	3,05
p289.293@11		1,67	1,78	2,52	2,56	3,05	2,41	2,23	2,19	2,44	2,49	2,18	2,35
p297.187@9.6		1,96	1,90	2,07	1,83	1,56	1,81	1,73	1,57	1,89	2,09	2,06	2,02
p300.29@9.9	C5H9NO	0,00	0,00	0,00	0,00	2,92	2,90	0,00	0,00	2,88	2,93	3,20	3,03
p301.141@13.6	C24H38O4	1,99	2,01	1,99	2,01	2,03	2,04	2,01	2,05	2,02	2,03	2,05	2,06
p302.305@11.6	C16H22O2	2,30	2,45	2,97	2,97	3,50	2,96	2,85	2,71	3,04	3,07	2,87	3,13
p303.309@11.6	C18H34O2	1,65	1,76	2,28	2,31	2,83	2,30	2,19	2,00	2,36	2,39	2,18	2,43
p305.154@6.8		1,89	2,06	2,06	1,83	1,88	1,95	2,04	2,12	1,90	1,92	2,02	1,99
p311.201@9.6		2,36	2,50	2,27	2,32	2,43	2,38	2,33	2,35	2,37	2,54	2,51	2,45
p311.255@15.3		2,02	1,97	2,11	1,80	1,56	1,79	1,73	1,60	1,85	2,02	2,07	2,04
p312.261@15.3		1,61	1,68	1,64	1,63	1,68	1,59	1,61	1,73	1,66	1,79	1,76	1,75
p314.305@12.3		0,93	1,43	1,98	1,75	2,12	1,56	2,32	2,12	2,05	2,02	1,25	1,70
p316.32@12		1,96	2,19	2,67	2,52	3,01	2,40	2,51	2,42	2,59	2,69	2,38	2,79
p317.227@9.6		2,55	2,60	2,72	2,43	2,26	2,37	2,29	2,27	2,45	2,67	2,69	2,65
p318.23@9.6		2,04	1,99	2,19	1,92	1,61	1,79	1,72	1,50	1,86	2,11	2,16	2,05
p319.242@10.3		2,48	2,42	2,40	2,24	2,32	2,41	2,79	2,74	2,55	2,56	2,33	2,35
p320.247@10.3		1,96	1,90	1,88	1,64	1,70	1,85	2,27	2,13	1,94	2,01	1,79	1,83
p321.257@12.1		1,95	1,97	2,01	1,95	2,00	2,00	1,99	2,00	1,99	1,94	1,98	2,02
p321.315@18.1		2,33	2,39	2,59	2,52	2,56	2,64	2,49	2,56	2,55	2,59	2,41	2,35
p322.262@12.1	C43H79O13P	1,79	1,80	2,02	1,94	1,98	2,05	1,99	1,90	1,96	2,02	1,78	1,84
p323.233@8.2		1,81	1,72	1,95	1,82	1,87	2,07	1,97	1,88	1,79	2,06	1,92	1,82

p326.377@13		2,05	2,05	2,17	2,18	2,03	2,12	2,13	2,15	1,99	2,04	2,03	2,07
p327.078@12.7		1,91	1,98	2,09	1,96	1,91	2,17	2,11	2,13	1,86	1,99	1,91	2,01
p328.266@15.2		1,73	1,77	1,73	1,56	1,85	1,69	1,70	1,48	1,78	1,60	1,85	1,75
p332.331@12.7		1,69	1,71	1,90	1,80	1,78	1,93	1,91	1,94	1,72	1,82	1,77	1,77
p333.3@15.3		1,87	1,93	1,86	1,89	1,84	1,85	1,85	1,88	1,82	1,89	1,98	1,91
p335.236@9.6		3,25	3,23	3,37	3,13	2,88	3,03	2,99	2,94	3,12	3,33	3,38	3,30
p336.241@9.6		2,68	2,66	2,78	2,56	2,35	2,44	2,38	2,35	2,57	2,71	2,80	2,71
p337.252@10.3		2,82	2,80	2,77	2,55	2,60	2,75	3,12	3,09	2,90	2,92	2,67	2,70
p337.252@8.9		2,17	2,02	2,74	2,96	3,02	3,19	2,12	2,05	2,53	2,53	2,21	2,23
p338.341@18.1		2,81	2,82	2,86	2,84	2,89	2,86	2,86	2,87	2,83	2,79	2,82	2,85
p339.268@12.1	C44H69N5O10	2,94	2,96	3,20	3,10	3,17	3,23	3,10	3,16	3,14	3,18	2,99	2,97
p340.272@12.1		2,35	2,41	2,64	2,57	2,59	2,67	2,51	2,60	2,54	2,64	2,40	2,37
p341.242@8.2		1,78	1,76	1,83	1,88	1,93	1,96	1,89	1,90	1,89	1,82	1,90	1,79
p341.265@14.6		2,73	2,75	2,89	2,76	2,79	3,06	2,79	2,80	2,78	2,95	2,86	2,78
p342.245@8.2		2,13	2,04	2,21	2,11	2,14	2,41	2,17	2,15	2,08	2,30	2,20	2,07
p353.246@9.6	C43H82O16P2	3,82	3,80	3,93	3,71	3,49	3,62	3,59	3,55	3,72	3,91	3,95	3,89
p354.251@9.6		3,27	3,23	3,37	3,14	2,94	3,04	3,02	2,99	3,16	3,36	3,41	3,34
p355.261@10.3		4,04	4,01	3,98	3,78	3,84	3,95	4,29	4,26	4,11	4,12	3,89	3,92
p355.262@8.9		3,45	3,17	3,91	4,08	4,16	4,27	3,27	3,24	3,70	3,69	3,44	3,45
p356.266@10.3	C24H38O4	3,48	3,47	3,44	3,23	3,29	3,40	3,77	3,75	3,57	3,58	3,35	3,36
p356.266@8.9		2,91	2,62	3,35	3,54	3,64	3,76	2,70	2,66	3,14	3,14	2,87	2,89
p356.389@12.8		1,86	1,74	1,95	1,82	1,74	1,94	1,96	2,00	1,73	1,83	1,76	1,86
p357.277@12.1		3,88	3,91	4,12	4,02	4,08	4,13	4,02	4,08	4,06	4,11	3,93	3,90
p358.282@12.1		3,32	3,36	3,59	3,48	3,55	3,60	3,47	3,54	3,51	3,57	3,38	3,36
p359.286@12.1		2,51	2,55	2,74	2,65	2,72	2,76	2,64	2,74	2,72	2,78	2,57	2,57
p360.291@12.1		1,57	1,77	1,89	1,79	1,90	1,91	1,84	1,87	1,83	1,93	1,66	1,62
p362.219@6.8		1,73	1,57	2,04	1,83	1,61	1,77	1,87	1,88	1,56	1,44	1,59	1,25
p363.306@14.6		1,73	1,52	1,66	1,62	1,69	1,76	1,70	1,75	1,68	1,75	1,69	1,64
p369.264@8.9		2,11	2,01	2,18	2,09	2,20	2,28	2,21	2,11	2,14	2,21	2,25	2,18
p371.227@7.3		2,73	2,76	2,96	2,89	2,90	3,13	2,91	2,84	2,95	2,95	2,98	2,95
p371.257@9.6	C43H84O16P2	3,51	3,48	3,63	3,39	3,18	3,30	3,29	3,23	3,41	3,60	3,65	3,57
p372.262@9.6		2,94	2,92	3,08	2,84	2,55	2,73	2,69	2,66	2,86	3,04	3,08	3,00
p373.272@10.3		3,76	3,73	3,68	3,47	3,55	3,65	4,04	3,99	3,84	3,86	3,60	3,64
p373.272@8.9		3,02	2,67	3,48	3,68	3,78	3,92	2,81	2,78	3,26	3,27	2,99	3,01
p374.277@10.3		3,19	3,18	3,13	2,92	2,98	3,09	3,49	3,44	3,27	3,31	3,03	3,09
p374.278@8.9	C21H37CIN	2,46	2,15	2,91	3,13	3,22	3,36	2,26	2,21	2,69	2,70	2,42	2,44
p375.281@10.3	C24H34O2	2,41	2,41	2,34	2,15	2,20	2,33	2,72	2,70	2,50	2,50	2,27	2,27
p375.289@12.1		2,36	2,39	2,62	2,51	2,57	2,62	2,51	2,58	2,54	2,60	2,43	2,35
p376.294@12.1	C22H43N5O13	1,74	1,82	2,02	1,94	2,02	2,09	1,93	2,03	2,00	2,08	1,80	1,85
p377.325@15.3	C27H40O11	2,16	2,16	2,12	2,17	2,16	2,11	2,11	2,15	2,16	2,21	2,21	2,17
p378.339@15.3		1,75	1,83	1,78	1,78	1,87	1,79	1,80	1,77	1,68	1,76	1,93	1,74
p384.232@6.9		1,82	2,23	2,06	1,82	1,81	2,07	1,99	1,94	1,81	1,71	1,86	1,73

p385.292@14.6		1,82	1,72	1,84	1,77	1,79	1,89	1,93	1,85	1,83	1,82	1,79	1,71
p387.252@9.1	C45H70NO8P	1,77	1,80	2,13	1,87	1,50	1,65	1,48	0,91	1,74	2,11	2,71	2,36
p389.268@9.6		3,48	3,48	3,60	3,35	3,15	3,26	3,23	3,20	3,38	3,59	3,63	3,55
p390.272@9.6	C44H80NO10P	2,90	2,91	3,02	2,77	2,60	2,70	2,68	2,64	2,84	3,03	3,08	2,99
p391.283@8.9	C21H33FO	2,31	2,27	2,23	2,09	2,12	2,22	2,62	2,57	2,40	2,39	2,14	2,16
p391.284@10.3	C18H22O2	2,14	1,79	2,56	2,69	2,84	3,01	1,87	1,86	2,36	2,38	2,15	2,09
p393.209@5.7	C18H35NO	1,88	1,92	2,19	2,13	2,06	2,29	2,07	2,09	2,03	2,05	2,12	2,07
p396.209@14		0,98	1,36	1,90	1,83	1,64	2,02	1,39	1,74	1,91	2,00	2,10	1,97
p398.218@14		1,24	1,62	2,08	1,99	1,81	2,17	1,73	1,88	2,10	2,17	2,06	2,13
p399.307@15.3	C41H68O13	2,44	2,54	2,47	2,51	2,46	2,48	2,45	2,49	2,43	2,52	2,52	2,48
p400.313@15.3		1,89	1,95	1,85	1,88	1,90	1,86	1,91	1,91	1,90	1,96	1,99	1,88
p400.413@14.5		1,91	1,89	1,87	1,92	1,89	1,92	1,86	1,94	1,90	1,94	1,88	1,87
p402.357@12.5		1,92	1,82	2,04	2,01	1,90	2,04	2,04	2,02	1,86	1,95	1,92	1,87
p406.245@6.9	C11H18N4O2	2,15	2,53	2,30	2,27	2,14	2,33	2,38	2,36	2,19	2,17	2,12	2,11
p407.28@9.6		2,40	2,35	2,29	2,02	2,03	2,14	2,52	2,42	2,59	2,77	2,89	2,75
p408.282@9.6	C26H45N2O	1,80	1,70	1,79	1,34	1,48	1,67	1,96	1,92	2,01	2,17	2,34	2,20
p409.184@5.7		1,61	1,63	2,03	1,87	1,81	2,06	1,88	1,90	1,81	1,87	1,94	1,87
p412.282@9.2		2,66	2,52	0,93	0,91	0,00	0,00	2,91	2,64	0,00	0,70	0,00	0,00
p413.266@17.1		2,12	2,14	2,09	2,14	2,16	2,14	2,22	2,14	2,07	2,24	2,18	2,18
p414.43@14.9		2,42	2,39	2,43	2,40	2,43	2,41	2,43	2,42	2,42	2,42	2,42	2,39
p415.252@7.3		2,73	2,64	2,99	2,90	2,91	3,11	2,93	2,90	2,96	2,95	2,78	2,13
p415.253@5.9		2,45	2,48	2,76	2,62	2,63	2,75	2,68	2,71	2,58	2,62	2,51	2,56
p421.352@15.3		2,10	2,10	2,10	2,07	2,04	1,94	2,00	2,03	2,12	2,13	2,13	2,06
p422.375@15.3		2,01	2,03	1,96	1,97	1,96	1,92	1,93	2,02	1,88	1,99	2,02	1,89
p426.242@6.9	C20H31NO7	2,59	3,01	2,78	2,66	2,57	2,64	2,82	2,77	2,59	2,59	2,60	2,51
p427.247@6.9	C22H31NO2	1,74	2,15	1,98	1,88	1,69	1,83	1,98	1,92	1,75	1,80	1,75	1,68
p428.259@7		2,27	2,69	2,40	2,31	2,32	2,32	2,41	2,34	2,34	2,31	2,33	2,23
p429.262@9.6		2,14	2,19	2,16	1,84	1,83	1,82	2,23	2,17	2,38	2,52	2,69	2,57
p429.319@14.6		1,76	1,82	1,87	1,87	1,84	1,93	1,92	1,96	1,90	1,93	1,93	1,94
p430.294@9.2		2,45	2,30	1,44	0,66	0,78	0,00	2,69	2,43	1,84	1,99	2,14	2,09
p430.39@13.3		1,62	1,57	1,73	1,81	1,64	1,86	1,75	1,75	1,70	1,70	1,64	1,72
p431.278@10.3	C18H26O2	2,05	2,07	1,96	1,79	1,75	1,87	2,33	2,32	2,18	2,18	1,83	1,95
p432.281@5.9		1,62	1,64	2,18	1,98	2,04	2,15	2,03	1,98	2,07	2,04	2,02	2,05
p437.235@5.9		2,17	2,19	2,52	2,37	2,33	2,51	2,46	2,48	2,30	2,28	2,42	2,37
p438.378@15.3		1,56	1,68	1,64	1,63	1,50	1,39	1,62	1,61	1,59	1,66	1,64	1,60
p443.334@15.3		2,48	2,53	2,46	2,48	2,52	2,46	2,45	2,49	2,44	2,51	2,51	2,48
p444.338@15.3		1,92	1,94	1,97	1,93	1,93	1,90	1,86	1,96	1,89	2,01	1,93	1,92
p447.254@10.3		1,89	1,91	1,79	1,60	1,68	1,83	2,13	2,13	1,99	2,07	1,75	1,90
p448.257@7	C34H40N4O4	2,63	2,96	2,82	2,67	2,62	2,79	2,73	2,68	2,68	2,65	2,71	2,60
p449.259@7	C49H80NO8P	1,87	2,15	1,92	1,82	1,83	2,00	1,99	1,75	1,93	1,83	1,80	1,75
p450.272@7.1		2,21	2,54	2,32	2,26	2,20	2,48	2,29	2,13	2,22	2,27	2,24	2,16
p453.211@5.9		1,98	2,04	2,26	2,15	2,14	2,30	2,21	2,33	2,14	2,19	2,21	2,20

p454.336@10.3		1,75	1,72	1,80	1,60	1,45	1,48	2,12	2,00	1,84	1,89	1,24	1,01
p455.245@5.8		2,26	2,30	2,60	2,51	2,48	2,65	2,53	2,51	2,50	2,41	2,41	2,45
p456.348@11.9		2,25	2,24	2,31	2,16	2,25	2,33	2,02	1,93	1,78	1,75	1,45	1,34
p459.279@6.1		2,67	2,71	2,93	2,82	2,91	3,09	2,88	2,83	2,95	2,91	2,96	2,93
p459.281@7.4		2,60	2,52	2,84	2,64	2,65	2,88	2,85	2,83	2,66	2,73	2,74	2,42
p465.377@15.3		2,03	1,99	1,90	1,95	1,93	1,94	1,89	1,84	1,99	1,92	2,03	1,94
p466.404@15.3		2,01	2,00	1,92	1,94	1,98	1,88	1,95	1,92	1,92	1,86	1,95	1,88
p468.348@10.7	C25H36O10	1,96	1,89	2,02	1,79	1,38	1,62	2,36	2,24	1,77	1,71	1,28	1,33
p470.27@7	C13H21NO	2,68	2,58	2,62	2,51	2,68	2,62	2,32	2,39	2,05	2,08	1,96	1,92
p470.363@12.4		2,48	2,85	2,67	2,59	2,54	2,88	2,79	2,71	2,58	2,52	2,55	2,49
p471.27@7	C14H20O2	2,19	2,11	2,18	2,07	2,21	2,11	1,91	1,85	1,56	1,64	1,14	1,56
p471.367@12.4		1,70	2,07	1,95	1,84	1,85	2,09	2,06	1,97	1,73	1,67	1,81	1,68
p472.285@7.1		1,75	2,04	1,99	1,84	1,83	2,24	2,12	1,97	1,84	1,80	1,82	1,72
p472.33@10.3		2,02	1,91	1,97	1,71	1,76	1,84	2,16	2,06	1,87	1,88	1,42	1,31
p473.344@14.5		1,77	1,67	1,84	1,84	1,82	1,78	1,75	1,78	1,72	1,80	1,83	1,74
p476.307@6.1	C41H76N2O15	2,00	2,05	2,44	2,24	2,23	2,50	2,36	2,29	2,32	2,32	2,37	2,38
p477.232@5.8	C14H16N2O3	2,04	2,04	2,47	2,36	2,26	2,42	2,34	2,27	2,19	2,17	2,27	2,21
p478.353@10.8	C15H22	2,27	2,33	1,86	1,87	1,21	1,03	1,97	1,98	1,60	1,54	0,00	0,00
p480.341@8.8	C24H34O2	1,59	1,51	1,62	1,60	1,63	1,74	1,72	1,68	1,64	1,65	1,62	1,63
p481.262@6.1		2,12	2,29	2,22	2,19	2,22	2,48	2,22	2,19	2,28	2,25	2,23	2,19
p481.276@7.2		2,38	2,33	2,62	2,42	2,35	2,63	2,62	2,58	2,30	2,34	2,41	2,37
p482.265@6.1	C13H17NO3	1,94	1,95	1,92	1,94	1,96	1,94	1,94	1,91	1,99	2,01	2,01	1,95
p482.406@15.3		1,73	1,65	1,97	1,75	1,69	2,01	1,94	1,93	1,54	1,61	1,70	1,76
p486.358@10.7		1,80	2,09	1,83	1,67	1,24	1,55	2,21	2,11	1,66	1,68	1,43	1,24
p487.361@15.3		2,39	2,43	2,40	2,35	2,41	2,37	2,35	2,38	2,35	2,42	2,44	2,33
p488.335@9.6	C11H16O2	2,35	2,28	2,30	2,26	2,34	2,30	2,04	1,97	1,79	1,74	1,66	1,62
p488.363@15.3		1,44	1,74	1,91	2,03	1,98	2,06	1,57	1,34	1,62	1,32	1,70	1,69
p488.374@12.4		1,80	1,89	1,87	1,83	1,89	1,82	1,83	1,88	1,82	1,84	1,90	1,83
p490.247@12.1		1,80	1,81	1,94	1,87	1,87	2,00	1,97	1,98	1,87	1,94	1,84	1,83
p492.283@7.1		2,68	2,92	2,80	2,71	2,72	2,80	2,78	2,72	2,71	2,73	2,71	2,63
p493.205@5.8		1,93	2,18	2,11	1,94	1,98	2,11	2,07	2,06	2,01	1,97	1,99	1,92
p493.287@7.1		1,67	1,72	2,07	1,92	1,91	2,02	2,11	2,07	1,92	1,90	1,74	1,81
p494.298@7.2		2,03	2,20	2,05	2,01	2,01	2,06	2,06	2,02	2,06	1,97	2,03	1,99
p494.36@9		1,91	2,08	2,08	2,03	2,05	2,09	2,07	2,07	2,01	2,05	2,01	2,01
p496.289@7.2		2,19	2,41	2,33	2,28	2,31	2,43	2,43	2,32	2,35	2,33	2,36	2,32
p497.237@6.1		2,13	2,08	2,34	2,23	2,11	2,40	2,41	2,37	2,12	2,17	2,15	2,13
p499.275@6		2,73	2,76	3,03	2,94	2,87	2,92	2,97	2,95	2,91	2,89	2,92	2,89
p500.28@6		2,15	2,17	2,43	2,31	2,32	2,36	2,37	2,33	2,28	2,31	2,31	2,27
p501.288@6.7	C15H22O2	1,65	1,49	2,03	1,90	1,76	2,03	2,11	2,05	1,56	1,59	1,60	1,58
p502.333@10.9	C9H15NO2	1,67	1,83	2,06	2,09	2,11	2,04	1,47	1,39	1,70	1,68	1,73	1,73
p502.353@10.1		2,16	2,18	2,04	1,71	1,53	1,43	2,42	2,39	2,11	1,94	1,26	1,40
p503.307@6.2		3,10	3,10	3,32	3,16	3,17	3,18	3,32	3,20	3,18	3,20	3,20	3,18

p504.311@6.2		2,79	2,70	2,66	2,60	2,66	2,61	2,47	2,54	2,30	2,34	1,85	1,75
p504.35@12.5		2,53	2,53	2,71	2,61	2,55	2,56	2,73	2,61	2,62	2,59	2,59	2,52
p505.311@6.2	C24H36O3	2,31	2,27	2,27	2,11	2,28	2,15	2,12	2,06	1,82	1,98	1,39	1,03
p505.353@12.5		1,90	1,85	2,09	1,97	1,91	1,97	2,09	1,99	1,95	1,98	1,95	1,91
p506.244@10.3		1,87	1,80	1,98	1,88	1,94	2,01	2,05	1,99	1,82	1,93	1,85	1,83
p509.406@15.2		1,81	1,84	1,70	1,77	1,64	1,76	1,85	1,82	1,79	1,91	1,82	1,79
p510.433@15.3		2,32	2,52	2,52	2,44	2,47	2,76	2,58	2,53	2,49	2,40	2,42	2,42
p510.63@7.3		1,86	1,86	1,82	1,83	1,85	1,86	1,88	1,86	1,82	1,84	1,95	1,73
p511.299@7.3		1,87	2,02	2,13	2,02	2,08	2,37	2,16	2,10	2,04	2,06	2,05	2,02
p514.296@7.1		2,50	2,69	2,66	2,55	2,55	2,82	2,58	2,54	2,58	2,58	2,61	2,50
p515.299@7.1		1,84	2,02	1,89	1,83	1,82	2,11	1,90	1,77	1,87	1,79	1,94	1,82
p516.301@6		1,89	1,93	2,29	2,21	2,10	2,36	2,17	2,16	2,32	2,25	2,17	2,23
p517.37@14.5	C41H64O13	1,47	1,49	1,63	1,50	1,51	1,67	1,73	1,41	1,45	1,60	1,51	1,36
p520.333@6.2		2,54	2,52	2,82	2,67	2,66	2,78	2,79	2,66	2,80	2,71	2,70	2,73
p521.258@6	C30H48O10	2,42	2,46	2,75	2,56	2,54	2,64	2,61	2,63	2,55	2,56	2,64	2,64
p521.397@8.9	C11H18N2O3	2,36	2,33	2,21	2,21	1,85	1,88	2,43	2,30	1,94	2,01	1,78	1,72
p522.26@6	C12H24N2O4	2,56	2,49	2,44	2,34	2,50	2,44	2,23	2,30	2,11	2,18	1,60	1,54
p522.359@12.5		1,81	1,91	2,07	1,99	1,86	2,05	2,11	2,07	2,01	1,98	2,05	2,04
p523.299@6.8	C21H36O5	2,14	2,20	2,51	2,31	2,19	2,21	2,56	2,46	2,14	2,15	2,26	2,07
p525.289@6.2	C32H53NO11S	2,62	2,64	2,84	2,67	2,71	2,73	2,83	2,70	2,63	2,74	2,63	2,63
p525.305@7.3		2,63	2,71	2,76	2,68	2,72	2,97	2,80	2,74	2,75	2,74	2,78	2,69
p526.293@6.2	C31H45NO8	2,09	2,21	2,08	2,13	2,08	2,10	2,17	2,17	2,12	2,22	2,12	2,18
p526.432@15.2		2,02	2,04	2,27	2,09	2,15	2,13	2,27	2,08	2,04	2,12	1,99	2,07
p528.366@8.2		1,83	1,81	1,84	1,87	1,78	2,13	1,77	1,76	1,78	2,04	1,90	1,84
p530.3@7.1		2,96	3,12	1,53	1,54	0,96	1,05	3,15	3,06	0,85	1,31	0,61	0,48
p531.274@12.1		2,28	2,22	2,45	2,33	2,40	2,47	2,42	2,39	2,31	2,32	2,32	2,32
p531.388@15.2	C24H50NO6P	2,22	2,31	2,25	2,28	2,27	2,37	2,32	2,24	2,29	2,33	2,26	2,23
p532.277@12.1		1,66	1,82	1,69	1,79	1,75	1,68	1,83	1,75	1,74	1,81	1,60	1,77
p532.392@15.2		1,77	1,77	1,94	1,87	1,94	1,97	2,00	1,95	1,91	1,85	1,80	1,83
p533.272@12.1		1,94	1,92	2,10	1,97	1,99	2,06	2,08	2,13	1,95	2,04	1,99	1,96
p536.309@7.2		2,44	2,58	2,55	2,23	2,54	2,68	2,62	2,53	2,49	2,49	2,49	2,48
p537.232@6		2,13	2,15	2,37	2,25	2,12	2,33	2,35	2,30	2,18	2,19	2,23	2,21
p540.314@7.3	C9H11NO2	2,24	2,18	2,14	2,12	2,12	2,11	1,93	1,92	1,74	1,77	1,22	0,96
p540.369@12.5		2,59	2,65	2,74	2,72	2,74	2,87	2,73	2,69	2,72	2,71	2,75	2,72
p540.985@7.4		1,90	1,97	2,06	2,00	2,05	2,27	2,02	2,01	2,09	1,99	2,11	2,06
p541.264@6.2		2,44	2,42	2,61	2,43	2,48	2,50	2,65	2,50	2,40	2,57	2,44	2,36
p542.267@6.2		1,80	1,89	2,02	1,83	1,90	1,87	2,06	1,90	1,83	2,03	1,90	1,83
p543.3@6.2	C44H84NO8P	2,86	2,82	3,09	2,90	2,92	3,16	3,13	3,08	2,94	2,99	3,04	2,91
p544.303@6.2		2,32	2,29	2,54	2,35	2,37	2,62	2,52	2,55	2,36	2,42	2,48	2,38
p545.314@6.9		2,44	2,77	2,73	2,60	2,46	2,66	2,71	2,64	2,51	2,48	2,60	2,49
p546.316@6.9	C17H22O2	1,69	2,02	2,05	1,96	1,83	1,98	2,02	2,01	1,76	1,81	1,96	1,88
p546.354@8	C14H16N2O2	1,83	1,96	1,77	1,73	1,42	1,44	2,25	2,22	2,05	2,18	0,96	0,00

p547.332@6.3		3,25	3,30	3,49	3,36	3,32	3,47	3,48	3,43	3,35	3,33	3,22	3,30
p548.337@6.3		2,66	2,75	2,93	2,80	2,81	2,93	2,91	2,89	2,80	2,76	2,63	2,74
p549.34@6.3		2,10	2,06	2,32	2,19	2,20	2,26	2,33	2,26	2,19	2,16	2,08	2,05
p550.347@8.2		2,30	2,32	2,34	2,30	2,32	2,55	2,36	2,36	2,32	2,47	2,27	2,19
p554.461@15.2		1,76	1,79	1,71	1,89	1,65	1,79	1,84	1,80	1,73	1,72	1,79	1,72
p555.325@7.4		2,23	2,22	2,45	2,34	2,40	2,70	2,33	2,29	2,37	2,39	2,42	2,37
p560.326@6.1		2,08	2,19	2,50	2,38	2,36	2,63	2,49	2,45	2,50	2,32	2,38	2,35
p561.323@6.1		1,52	1,75	1,98	1,72	1,81	2,13	1,99	1,94	1,92	1,75	1,87	1,66
p564.36@6.3		2,63	2,62	2,95	2,78	2,80	2,98	2,94	2,88	2,91	2,78	2,77	2,81
p565.299@6.1	C24H39N5O6	2,47	2,47	2,61	2,44	2,35	2,68	2,72	2,70	2,43	2,35	2,41	2,34
p567.327@6.9	C26H45NO7S	2,84	3,10	3,12	2,99	2,89	3,07	3,07	3,04	2,97	2,98	3,06	2,96
p568.331@6.9		2,20	2,47	2,47	2,37	2,26	2,36	2,42	2,39	2,30	2,30	2,39	2,30
p569.316@6.3		2,69	2,73	2,86	2,85	2,86	3,03	2,86	2,84	2,86	2,85	2,93	2,84
p569.33@7.4		2,74	2,72	2,92	2,74	2,80	2,93	3,00	2,94	2,74	2,76	2,68	2,77
p570.32@6.3		2,18	2,23	2,39	2,20	2,24	2,38	2,46	2,37	2,15	2,23	2,13	2,16
p570.336@7.4		2,00	2,02	2,22	2,16	2,21	2,33	2,13	2,15	2,15	2,21	2,23	2,12
p570.458@15.2	C48H69NO12	2,27	2,22	2,20	2,25	2,24	2,14	2,18	2,23	2,21	2,25	2,24	2,20
p571.318@5.7		2,78	2,68	2,37	2,35	2,19	2,44	2,31	2,28	2,15	2,11	2,03	1,97
p571.462@15.2	C25H30N6O2	1,74	1,83	1,72	1,77	1,78	1,67	1,61	1,76	1,85	1,78	1,75	1,73
p575.338@7.4		2,28	2,29	2,29	2,24	2,26	2,25	2,17	2,25	2,26	2,27	2,26	2,26
p575.414@15.2		1,50	1,62	1,79	1,79	1,70	1,99	1,76	1,69	1,79	1,75	1,87	1,81
p576.417@15.2		1,70	1,79	1,78	1,84	1,84	1,85	1,74	1,84	1,77	1,79	1,79	1,79
p578.378@8.9	C13H8F2O3	2,39	2,18	2,68	2,72	2,82	2,89	2,25	2,24	2,60	2,61	2,44	2,48
p579.382@8.9	C24H34O3	1,91	1,57	2,26	2,26	2,33	2,44	1,78	1,83	2,14	1,99	1,93	2,00
p581.258@6.1		2,19	2,23	2,35	2,22	2,04	2,37	2,43	2,42	2,07	1,99	2,05	1,99
p582.323@4.8		2,38	2,39	1,49	1,14	0,00	0,00	2,35	2,28	0,00	0,00	0,00	0,00
p584.34@7.5		2,61	2,56	2,78	2,77	2,79	2,93	2,71	2,72	2,73	2,76	2,84	2,78
p585.291@6.3		2,54	2,55	2,73	2,54	2,55	2,71	2,81	2,75	2,53	2,60	2,46	2,56
p586.293@6.3		1,99	2,03	2,19	2,09	2,09	2,19	2,26	2,23	1,92	2,01	1,99	1,99
p587.327@6.3		3,34	3,37	3,54	3,43	3,40	3,47	3,53	3,49	3,46	3,43	3,44	3,39
p588.333@6.3		2,84	2,84	3,02	2,88	2,88	2,96	3,02	2,95	2,96	2,92	2,89	2,86
p589.339@7		3,08	3,31	3,34	3,21	3,18	3,34	3,26	3,16	3,21	3,23	3,29	3,20
p590.345@7		2,44	2,70	2,72	2,60	2,58	2,74	2,63	2,57	2,60	2,58	2,65	2,56
p591.36@6.5		3,18	3,13	3,46	3,23	3,22	3,43	3,33	3,30	3,20	3,29	3,32	3,21
p592.364@6.5		2,65	2,64	2,92	2,69	2,68	2,90	2,78	2,80	2,68	2,74	2,80	2,66
p593.365@6.5		2,09	2,08	2,38	2,10	2,01	2,28	2,21	2,17	2,10	2,15	2,17	2,07
p598.355@7		1,56	1,77	1,86	1,71	1,72	1,85	1,78	1,71	1,91	1,87	1,83	1,87
p598.487@15.2	C18H36N6O5S	1,72	1,70	1,63	1,70	1,70	1,68	1,75	1,70	1,61	1,61	1,73	1,65
p599.35@7.5		2,07	2,10	2,40	2,34	2,36	2,62	2,27	2,17	2,24	2,34	2,35	2,35
p600.329@7		1,68	1,94	1,91	1,74	1,69	1,95	1,83	1,69	1,76	1,77	1,80	1,69
p604.297@5.7		2,56	2,54	2,85	2,75	2,69	2,90	2,78	2,77	2,89	2,80	2,80	2,77
p604.355@6.3	C6H10CIN5	2,41	2,42	1,40	1,20	0,31	1,05	2,67	2,64	0,00	0,00	0,00	0,00

p605.303@5.7		2,01	2,09	2,36	2,28	2,23	2,41	2,27	2,23	2,38	2,25	2,25	2,27
p605.357@6.3		2,05	1,99	0,00	0,75	0,00	0,00	2,18	2,18	0,00	0,00	0,00	0,00
p608.387@6.5		2,71	2,71	3,00	2,81	2,79	3,03	2,85	2,81	2,92	2,91	2,91	2,84
p609.31@6.3		2,18	2,12	2,52	2,32	2,35	2,55	2,43	2,33	2,41	2,40	2,40	2,39
p609.386@6.5	C33H48O9	2,73	2,73	2,89	2,76	2,75	2,88	2,91	2,83	2,77	2,74	2,70	2,75
p610.314@6.3		2,11	2,19	2,35	2,24	2,21	2,38	2,40	2,37	2,27	2,14	2,24	2,23
p611.352@7		3,31	3,56	3,55	3,45	3,44	3,61	3,49	3,42	3,48	3,49	3,52	3,45
p612.357@7		2,70	2,99	2,98	2,86	2,85	3,04	2,90	2,83	2,88	2,88	2,90	2,88
p613.342@6.5		2,62	2,62	2,85	2,67	2,67	2,86	2,81	2,77	2,61	2,63	2,67	2,60
p613.355@7.5		2,49	2,48	2,77	2,67	2,69	2,89	2,58	2,63	2,67	2,70	2,71	2,69
p614.346@6.5		2,14	2,20	2,17	2,12	2,16	2,24	2,23	2,24	2,16	2,29	2,19	2,17
p614.359@7.5	C16H35NO2	2,10	2,10	2,34	2,21	2,14	2,38	2,30	2,22	2,04	2,04	2,19	2,16
p614.485@15.2		1,87	1,85	2,20	2,02	2,06	2,32	1,99	2,03	1,99	2,11	2,23	2,06
p615.283@5.1	C16H33NO	2,15	1,86	0,98	0,61	0,00	0,00	2,13	2,21	0,00	0,00	0,00	0,00
p615.488@15.2		1,71	1,85	1,66	1,74	1,73	1,75	1,81	1,76	1,66	1,80	1,76	1,67
p617.332@6.6		1,93	1,99	1,84	1,42	0,00	1,82	2,06	1,92	0,00	0,00	0,00	0,78
p619.44@15.2		2,15	2,15	2,18	2,24	2,18	2,22	2,24	2,22	2,10	2,23	2,21	2,14
p620.367@7		1,89	2,12	2,07	2,04	2,02	2,13	2,03	1,97	2,10	2,11	2,00	2,02
p622.344@7		1,99	2,15	2,11	1,91	1,96	2,12	1,97	1,93	1,96	1,89	2,01	1,98
p625.286@6.3		2,46	2,44	2,60	2,48	2,39	2,53	2,61	2,60	2,47	2,45	2,41	2,44
p626.286@6.3		1,94	1,92	2,06	1,95	1,90	2,01	2,08	2,06	1,89	1,91	1,78	1,89
p628.366@7.5		2,40	2,34	2,67	2,54	2,58	2,65	2,45	2,50	2,51	2,63	2,59	2,55
p629.316@6.5		2,46	2,45	2,61	2,47	2,40	2,62	2,61	2,61	2,39	2,39	2,46	2,33
p630.325@5.6		2,56	2,52	1,84	1,80	0,48	0,48	2,73	2,68	0,00	0,00	0,00	0,00
p631.354@6.4	C27H36O11	3,47	3,50	3,66	3,55	3,51	3,56	3,64	3,62	3,52	3,56	3,56	3,46
p632.358@6.4		2,94	3,01	3,15	3,06	3,01	3,05	3,15	3,15	3,05	3,05	3,06	2,97
p633.365@7.1	C46H78NO10P	3,45	3,66	3,69	3,58	3,59	3,82	3,58	3,51	3,61	3,64	3,68	3,59
p634.37@7.1		2,85	3,11	3,13	2,99	2,99	3,26	3,03	2,89	3,05	3,05	3,09	3,03
p635.385@6.6		3,33	3,26	3,51	3,34	3,34	3,49	3,40	3,32	3,36	3,39	3,45	3,29
p636.389@6.6		2,84	2,73	3,01	2,85	2,82	2,97	2,87	2,82	2,80	2,90	2,95	2,78
p637.392@6.6		2,28	2,17	2,44	2,29	2,22	2,40	2,36	2,25	2,27	2,28	2,38	2,18
p638.323@7		1,57	1,99	1,81	1,70	1,51	1,80	1,92	1,73	1,54	1,63	1,66	1,57
p642.382@7		1,97	2,18	2,21	2,10	2,12	2,34	2,10	2,12	2,22	2,28	2,28	2,33
p642.708@7.6		2,14	2,08	2,38	2,31	2,34	2,60	2,26	2,33	2,32	2,33	2,38	2,29
p643.376@7.6		1,94	1,89	2,22	2,09	2,14	2,39	2,09	2,12	2,11	2,15	2,15	2,07
p644.356@7		1,92	2,15	2,08	2,09	1,95	2,29	2,09	2,01	2,03	1,91	2,05	1,96
p648.381@6.4		2,68	2,69	2,97	2,89	2,83	2,93	2,92	2,92	2,98	2,93	2,88	2,83
p649.384@6.4		2,23	2,26	2,53	2,37	2,37	2,41	2,45	2,43	2,47	2,39	2,40	2,31
p650.383@6.4		1,66	1,64	1,92	1,73	1,70	1,89	1,93	1,87	1,90	1,80	1,75	1,78
p652.413@6.6		2,82	2,80	3,08	2,95	2,93	3,12	2,97	2,90	3,06	2,97	3,03	2,92
p653.338@6.4		2,79	2,81	2,94	2,84	2,79	2,87	2,98	2,89	2,80	2,80	2,82	2,73
p654.342@6.4		2,34	2,33	2,43	2,38	2,31	2,33	2,50	2,47	2,32	2,30	2,25	2,26



p655.379@7.1		3,54	3,73	3,76	3,68	3,67	3,87	3,69	3,64	3,74	3,71	3,74	3,69
p656.382@7.1		2,97	3,19	3,24	3,12	3,14	3,33	3,16	3,10	3,16	3,13	3,18	3,14
p657.369@6.6		2,80	2,78	2,92	2,78	2,74	2,88	2,88	2,82	2,68	2,78	2,82	2,71
p658.37@6.6		2,25	2,22	2,21	2,23	2,25	2,19	2,22	2,21	2,27	2,30	2,25	2,25
p658.511@15.1	C25H46NO7P	2,34	2,23	2,47	2,30	2,24	2,42	2,42	2,33	2,22	2,30	2,31	2,21
p659.34@6.3	C9H11NO2	1,86	1,97	2,01	1,82	1,78	1,96	2,38	2,45	0,00	0,00	1,78	0,00
p659.515@15.1		1,89	1,85	1,79	1,84	1,89	1,79	1,75	1,79	1,84	1,90	1,84	1,84
p660.345@6.5		1,18	1,77	1,70	0,31	0,78	1,72	1,97	2,13	0,00	1,72	0,00	0,00
p663.465@15.1		2,26	2,23	2,31	2,21	2,31	2,23	2,21	2,24	2,25	2,26	2,23	2,20
p664.395@7.1		2,06	2,27	2,29	2,22	2,25	2,51	2,27	2,21	2,39	2,40	2,30	2,45
p666.371@7.1	C33H52O9	1,92	2,17	2,26	2,10	2,11	2,34	2,16	2,10	2,12	2,08	2,08	2,06
p667.372@7.1	C29H31NO2	1,54	1,73	1,71	1,73	1,48	1,81	1,80	1,59	1,60	1,68	1,47	1,63
p669.316@6.4	C24H36O2	2,70	2,75	2,66	2,55	2,45	2,42	2,71	2,69	2,44	2,47	2,43	2,39
p670.319@6.4		2,19	2,25	2,16	2,01	1,88	1,88	2,21	2,19	1,90	1,97	2,03	1,93
p672.394@7.6		1,89	1,97	2,24	2,13	2,17	2,31	2,22	2,12	2,07	2,22	2,20	2,04
p673.341@6.6		2,56	2,63	2,66	2,60	2,45	2,63	2,68	2,59	2,47	2,47	2,54	2,44
p674.345@6.6		2,12	2,11	2,26	2,00	1,98	2,18	2,21	2,12	2,08	2,03	2,02	1,94
p675.379@6.5		3,52	3,53	3,66	3,56	3,58	3,61	3,64	3,57	3,57	3,60	3,55	3,52
p676.385@6.5		3,03	3,05	3,19	3,02	3,09	3,13	3,17	3,11	3,10	3,12	3,11	3,00
p677.392@7.1		3,58	3,71	3,79	3,70	3,72	3,92	3,68	3,63	3,72	3,74	3,77	3,71
p678.395@7.1		3,05	3,20	3,26	3,16	3,19	3,42	3,17	3,11	3,22	3,24	3,27	3,17
p679.405@7.1		2,27	2,37	2,40	2,39	2,39	2,67	2,32	2,28	2,27	2,43	2,53	2,39
p679.412@6.7		3,29	3,24	3,39	3,30	3,29	3,42	3,34	3,33	3,27	3,29	3,39	3,18
p680.416@6.7		2,79	2,75	2,91	2,84	2,83	2,95	2,89	2,86	2,78	2,85	2,92	2,79
p681.418@6.7		2,20	2,22	2,35	2,22	2,21	2,36	2,32	2,29	2,23	2,28	2,35	2,21
p686.733@7.6	C29H40O9	1,70	1,59	2,13	1,89	1,98	2,07	1,95	1,83	1,75	1,93	1,99	1,77
p688.383@7.1		2,06	2,16	2,21	2,11	2,04	2,37	2,19	2,01	2,08	2,09	2,13	2,08
p689.385@7.1		1,61	1,72	1,81	1,58	1,57	1,82	1,60	1,56	1,61	1,63	1,72	1,58
p691.37@7.7		1,98	1,95	2,43	2,34	2,18	2,36	2,18	1,99	2,10	2,12	1,75	1,75
p692.408@6.5		2,80	2,81	3,00	2,91	2,90	3,01	2,96	2,87	3,05	2,94	2,93	2,92
p693.411@6.5		2,34	2,33	2,57	2,46	2,49	2,56	2,50	2,43	2,60	2,43	2,45	2,46
p696.439@6.7	C27H50O6	2,86	2,88	2,98	2,91	2,92	3,10	2,97	2,97	3,06	2,99	2,97	2,91
p697.384@6.5	C44H80NO8P	2,79	2,77	2,83	2,81	2,85	2,82	2,90	2,88	2,81	2,83	2,79	2,74
p698.368@6.5		2,33	2,31	2,46	2,28	2,31	2,36	2,46	2,36	2,31	2,38	2,32	2,18
p699.404@7.2		3,61	3,71	3,84	3,73	3,76	3,91	3,78	3,71	3,76	3,76	3,82	3,77
p70.211@7.4		2,08	2,05	2,35	2,23	2,34	2,37	2,15	2,26	2,29	2,41	2,47	2,33
p700.408@7.2		3,12	3,21	3,34	3,23	3,29	3,43	3,29	3,22	3,28	3,27	3,34	3,28
p701.393@6.7		2,34	2,40	2,60	2,47	2,42	2,52	2,55	2,55	2,54	2,50	2,49	2,53
p701.412@7.2		2,78	2,77	2,83	2,74	2,75	2,86	2,86	2,90	2,68	2,72	2,77	2,66
p702.397@6.7	C21H36	2,35	2,30	2,40	2,34	2,27	2,42	2,42	2,41	2,25	2,27	2,34	2,17
p702.533@15.1		2,16	2,15	2,21	2,15	2,20	2,25	2,19	2,23	2,17	2,20	2,12	2,15
p703.395@6.7		1,81	1,65	1,83	1,78	1,75	1,90	1,80	1,89	1,63	1,79	1,83	1,73

p704.358@7.1		1,66	1,78	1,79	1,53	1,62	1,90	1,74	1,83	1,47	1,66	1,73	1,56
p705.377@7.1		1,87	1,98	1,84	1,66	1,62	1,97	1,73	1,80	1,60	1,59	1,58	1,45
p707.493@15.1		2,11	2,11	2,23	2,18	2,16	2,24	2,18	2,20	2,08	2,14	2,12	2,08
p708.493@15.1	C16H2002	1,79	1,78	1,82	1,81	1,77	1,89	1,90	1,88	1,77	1,78	1,65	1,76
p710.398@7.2		2,06	2,15	2,28	2,14	2,15	2,34	2,19	2,15	2,18	2,13	2,23	2,12
p713.337@6.5	C25H42NO7P	2,50	2,51	2,55	2,47	2,49	2,49	2,61	2,55	2,41	2,47	2,41	2,40
p714.341@6.5		2,07	1,99	1,83	2,07	1,88	2,04	2,18	2,15	1,90	1,98	2,04	1,97
p717.367@6.7	C24H38O5	2,54	2,57	2,60	2,54	2,54	2,58	2,62	2,66	2,46	2,51	2,52	2,44
p718.372@6.7	C19H27NO	2,11	2,09	2,18	2,08	2,07	2,14	2,13	2,28	1,94	1,95	2,08	1,77
p719.407@6.6		3,48	3,51	3,63	3,54	3,54	3,62	3,62	3,55	3,52	3,58	3,53	3,42
p720.41@6.6		3,08	3,04	3,18	3,09	3,06	3,17	3,19	3,10	3,10	3,16	3,11	3,01
p721.417@7.2		3,53	3,61	3,71	3,65	3,66	3,87	3,60	3,57	3,68	3,74	3,73	3,67
p722.422@7.2		3,02	3,13	3,23	3,17	3,19	3,38	3,10	3,09	3,18	3,27	3,25	3,17
p723.43@7.2	C39H63N5O12	2,19	2,47	2,50	2,37	2,45	2,61	2,33	2,28	2,36	2,46	2,47	2,27
p723.438@6.8		1,65	1,61	1,86	1,82	1,54	1,78	1,78	1,88	1,71	1,56	1,59	1,61
p723.472@15.1	C34H47NO10	3,08	3,03	3,25	3,12	3,06	3,23	3,13	3,09	3,07	3,17	3,22	3,06
p724.443@6.8		2,65	2,56	2,84	2,70	2,67	2,74	2,68	2,65	2,63	2,70	2,76	2,58
p725.445@6.8		2,05	1,95	2,24	2,09	2,15	2,28	2,18	2,10	2,05	2,18	2,23	2,00
p726.37@7.2	C29H33CIN2O2	1,72	1,71	1,81	1,67	1,58	1,85	1,85	1,71	1,63	1,63	1,68	1,72
p730.433@7.2		2,07	2,31	2,38	2,34	2,36	2,63	2,25	2,31	2,41	2,37	2,41	2,42
p732.409@7.2		2,02	2,11	2,11	2,02	2,07	2,31	2,06	2,01	2,05	2,12	2,03	2,09
p735.422@7.4	C29H44O12	1,63	1,57	1,78	1,67	1,78	1,97	1,75	1,62	1,82	1,76	1,86	1,78
p736.433@6.6		2,81	2,84	3,01	2,89	2,90	3,03	2,99	2,91	3,03	2,93	2,93	2,89
p737.437@6.6		2,42	2,40	2,56	2,48	2,52	2,63	2,53	2,53	2,59	2,56	2,53	2,41
p738.441@6.6		1,87	1,79	2,11	1,91	1,79	2,09	2,07	1,94	2,01	1,99	1,88	1,77
p740.465@6.8		2,72	2,71	2,97	2,84	2,83	2,94	2,78	2,78	2,88	2,91	2,92	2,85
p741.405@6.6	C26H52NO7P	2,78	2,75	2,92	2,78	2,75	2,87	2,96	2,89	2,79	2,71	2,78	2,69
p742.393@6.6		2,35	2,37	2,46	2,36	2,24	2,36	2,51	2,41	2,27	2,37	2,37	2,26
p743.43@7.2		3,55	3,65	3,73	3,68	3,70	3,78	3,70	3,64	3,73	3,73	3,76	3,70
p744.434@7.2	C28H38O6	3,10	3,18	3,29	3,22	3,24	3,32	3,25	3,18	3,30	3,31	3,32	3,25
p745.419@6.8		2,31	2,46	2,48	2,43	2,44	2,49	2,47	2,38	2,46	2,43	2,46	2,48
p745.437@7.2		2,68	2,66	2,85	2,66	2,62	2,76	2,78	2,71	2,63	2,69	2,75	2,62
p746.423@6.8		2,25	2,07	2,36	2,21	2,23	2,32	2,32	2,31	2,21	2,30	2,32	2,21
p746.563@15		1,99	1,90	1,80	1,91	1,87	1,89	1,88	1,94	1,88	1,91	1,86	1,88
p747.566@15		1,68	1,51	1,63	1,31	1,64	1,52	1,26	1,48	1,62	1,55	1,37	1,65
p749.395@7.9		1,84	1,81	1,83	1,75	1,76	1,73	1,98	1,91	1,74	1,78	1,77	1,65
p751.368@6.9		1,97	1,99	1,99	2,04	1,88	1,97	1,91	1,98	1,87	1,97	1,85	1,89
p751.513@15		2,20	2,36	0,61	0,00	0,00	0,48	2,40	2,38	0,00	0,00	0,00	0,00
p752.445@7.2		2,04	2,38	2,39	2,47	2,52	2,54	2,26	2,35	2,57	2,37	2,50	2,47
p753.453@7.2	C30H44O10	1,48	1,61	1,59	1,72	1,70	1,60	1,78	1,71	1,78	1,69	1,75	1,69
p754.425@7.2	C17H35N5O5	2,10	2,15	2,13	2,14	2,12	2,22	2,19	2,15	2,15	2,18	2,11	2,13
p755.394@6.3	C10H9N	2,66	2,74	1,83	1,73	0,00	0,00	2,51	2,57	0,00	0,00	0,00	0,00

p757.366@6.6		2,47	2,52	2,59	2,42	2,39	2,45	2,59	2,51	2,36	2,44	2,40	2,32
p758.371@6.6	C19H34O3	1,95	2,24	2,09	2,04	2,00	2,07	2,24	2,15	1,94	1,98	1,97	1,86
p759.406@6.9		1,68	1,76	2,01	0,00	0,00	1,79	1,92	1,84	0,00	0,00	1,79	0,00
p761.397@6.8		2,48	2,39	2,52	2,41	2,39	2,48	2,58	2,49	2,48	2,38	2,46	2,35
p762.403@6.8		2,05	2,02	2,12	2,03	1,96	2,07	2,14	2,07	2,06	1,89	2,10	1,96
p763.432@6.7		3,41	3,39	3,46	3,45	3,45	3,46	3,50	3,50	3,45	3,49	3,48	3,38
p764.437@6.7	C43H75NO16	3,01	2,96	3,06	3,01	3,04	3,01	3,08	3,06	3,04	3,03	3,06	2,98
p765.443@7.3		3,30	3,44	3,52	3,49	3,55	3,75	3,57	3,48	3,57	3,52	3,54	3,55
p766.447@7.3		2,91	2,99	3,10	3,06	3,12	3,32	3,14	3,12	3,16	3,03	3,06	3,11
p767.455@7.3		2,16	2,12	2,31	2,27	2,33	2,47	2,35	2,28	2,27	2,32	2,39	2,27
p767.465@6.9		2,11	2,18	2,34	2,19	2,34	2,38	2,23	2,29	2,34	2,41	2,21	2,19
p767.584@12.1		2,75	2,90	2,98	2,78	2,76	3,01	3,01	2,87	2,78	2,83	2,89	2,66
p768.47@6.9	C28H52NO7P	2,27	2,47	2,54	2,42	2,40	2,64	2,60	2,47	2,43	2,40	2,47	2,26
p768.585@12.1		1,84	1,94	2,10	2,03	2,09	2,12	1,98	2,05	2,04	2,18	1,97	1,89
p769.471@6.9	C33H50N4O6S	1,67	1,97	2,03	1,85	1,78	2,12	2,02	1,83	1,82	1,91	1,94	1,64
p776.438@7.3	C41H66O13	1,92	2,04	2,02	1,97	1,95	2,12	2,02	1,99	2,00	1,97	1,92	1,93
p777.529@9.6		1,82	1,80	1,94	1,62	1,37	1,49	1,48	1,24	1,70	1,89	1,89	1,78
p779.449@7.4		1,44	1,35	1,77	1,63	1,76	1,86	1,70	1,57	1,74	1,74	1,87	1,79
p780.459@6.7		2,81	2,76	2,91	2,87	2,86	2,93	2,93	2,92	2,99	2,93	2,92	2,87
p781.461@6.7	C17H35NO	2,68	2,64	2,55	2,39	2,41	2,50	2,99	2,94	2,76	2,82	2,53	2,57
p781.565@10.3		2,34	2,36	2,53	2,50	2,47	2,50	2,54	2,57	2,63	2,51	2,52	2,44
p782.467@6.7		2,41	2,41	2,29	2,10	2,17	2,20	2,73	2,70	2,51	2,52	2,25	2,34
p782.568@10.3		1,96	1,76	2,04	2,07	1,98	2,04	2,05	2,06	2,08	2,05	1,96	1,89
p783.569@10.3		1,80	1,92	1,81	1,32	1,60	1,74	2,19	2,13	2,02	1,96	1,74	1,80
p784.492@6.9		2,46	2,66	2,78	2,64	2,51	2,83	2,75	2,62	2,69	2,61	2,62	2,51
p785.426@6.7		2,70	2,74	2,75	2,74	2,73	2,76	2,86	2,85	2,75	2,73	2,75	2,62
p785.593@12.1		2,93	3,00	3,17	3,06	3,14	3,20	3,06	3,15	3,10	3,22	3,01	2,94
p786.421@6.7		2,36	2,25	2,40	2,28	2,34	2,37	2,47	2,40	2,35	2,38	2,38	2,27
p786.597@12.1		2,70	2,71	2,87	2,80	2,90	2,89	2,79	2,89	2,88	2,95	2,70	2,71
p787.456@7.3		3,34	3,38	3,57	3,54	3,56	3,72	3,48	3,44	3,58	3,57	3,62	3,56
p787.6@12.1	C19H37N5O6	2,20	2,18	2,35	2,27	2,38	2,41	2,26	2,38	2,37	2,42	2,21	2,22
p788.461@7.3		2,96	2,96	3,18	3,12	3,17	3,32	3,09	3,02	3,18	3,17	3,21	3,12
p789.447@6.9		2,51	2,61	2,69	2,52	2,51	2,74	2,68	2,54	2,56	2,53	2,52	2,33
p789.465@7.3		2,19	2,21	2,36	2,46	2,33	2,49	2,29	2,21	2,39	2,38	2,42	2,30
p790.451@6.9		2,08	2,15	2,27	2,14	2,15	2,35	2,34	2,21	2,15	2,11	2,09	2,10
p794.46@7.5		1,44	1,07	1,81	1,69	1,69	1,97	1,61	1,62	1,77	1,72	1,88	1,83
p795.542@9.6	C45H72O2O	2,62	2,59	2,74	2,48	2,18	2,40	2,25	2,24	2,51	2,70	2,79	2,69
p796.549@9.6		2,38	2,25	2,52	2,20	1,94	2,08	1,98	1,85	2,24	2,46	2,55	2,44
p797.552@9.6		1,87	1,88	1,96	1,70	1,50	1,63	1,45	1,35	1,60	1,94	1,95	1,94
p798.45@7.3	C30H42O7	1,99	1,91	2,17	2,08	2,04	2,22	2,06	2,05	2,08	2,04	2,08	2,09
p799.572@10.3		3,33	3,29	3,19	2,97	3,07	3,12	3,60	3,56	3,40	3,44	3,12	3,19
p800.577@10.3		3,03	3,00	2,93	2,69	2,78	2,88	3,32	3,28	3,13	3,16	2,87	2,91

p801.391@6.7		2,52	2,49	2,42	2,20	2,31	2,39	2,78	2,74	2,67	2,65	2,36	2,43
p801.581@10.3		2,39	2,44	2,47	2,36	2,37	2,40	2,57	2,50	2,35	2,44	2,42	2,31
p802.395@6.7	C20H24O2	1,87	1,80	1,69	1,53	1,54	1,75	2,16	2,14	1,89	1,99	1,63	1,74
p802.585@10.3		1,97	2,04	2,02	2,00	1,93	1,75	2,20	2,20	1,98	1,86	1,75	1,89
p804.481@7.3		1,60	1,63	1,85	1,62	1,80	1,89	1,68	1,77	1,83	1,78	1,84	1,94
p805.421@6.9		2,36	2,40	2,38	2,28	2,24	2,44	2,53	2,42	2,26	2,30	2,28	2,39
p807.458@6.8		3,29	3,27	3,42	3,32	3,32	3,22	3,40	3,32	3,32	3,32	3,37	3,26
p807.577@12.1		1,74	1,81	1,94	1,82	1,93	1,92	1,89	1,86	1,90	1,92	1,83	1,82
p808.463@6.8		2,89	2,85	3,05	2,93	2,90	2,81	3,01	2,89	2,91	2,96	2,97	2,90
p809.469@7.3		3,27	3,24	3,50	3,43	3,47	3,59	3,40	3,33	3,49	3,49	3,49	3,47
p810.474@7.3		2,87	2,84	3,12	3,03	3,07	3,22	3,00	2,96	3,09	3,12	3,14	3,07
p811.481@7.3		2,07	2,01	2,29	2,25	2,37	2,36	2,18	2,18	2,30	2,37	2,36	2,29
p811.492@6.9		2,78	2,97	2,94	2,90	2,90	2,91	2,96	2,93	2,89	2,94	2,88	2,79
p812.497@6.9		2,51	2,62	2,53	2,45	2,50	2,59	2,52	2,54	2,51	2,53	2,49	2,48
p813.435@5.8	C11H12N2O2	2,32	2,38	1,45	1,18	0,00	0,85	2,59	2,58	0,00	0,00	0,31	0,00
p813.552@9.6		3,31	3,32	3,43	3,12	2,93	3,09	2,96	2,92	3,19	3,44	3,44	3,34
p814.556@9.6		3,01	3,05	3,14	2,86	2,67	2,81	2,67	2,70	2,92	3,17	3,17	3,04
p815.558@9.6		2,49	2,48	2,62	2,40	2,21	2,34	2,17	2,17	2,42	2,60	2,65	2,58
p816.562@9.6	C39H62O12	1,92	1,95	1,98	1,39	1,61	1,25	1,21	1,15	1,78	1,91	1,96	1,95
p817.581@10.3		3,71	3,67	3,62	3,40	3,51	3,63	3,97	3,92	3,78	3,85	3,55	3,62
p817.984@7.3		2,26	2,23	2,47	2,39	2,44	2,60	2,41	2,37	2,58	2,40	2,48	2,44
p818.587@10.3		3,44	3,42	3,34	3,14	3,24	3,35	3,71	3,67	3,51	3,59	3,28	3,34
p819.591@10.3		2,92	2,87	2,82	2,63	2,72	2,85	3,22	3,16	2,98	3,04	2,73	2,86
p820.463@7.3		2,27	2,32	2,25	2,01	2,12	2,16	2,56	2,55	2,43	2,50	2,17	2,19
p820.595@10.3		2,02	1,94	2,08	2,02	2,02	2,20	1,99	1,99	2,09	2,00	2,13	2,10
p821.444@7.1		1,72	1,57	1,40	1,21	1,54	1,54	1,92	1,89	1,77	1,70	1,32	1,48
p821.596@10.3		2,12	2,26	1,89	1,75	1,76	1,88	1,85	1,78	1,80	0,00	1,77	1,83
p823.543@12.1		1,61	1,58	1,71	1,69	1,62	1,74	1,71	1,68	1,75	1,79	1,68	1,62
p824.486@6.8		2,75	2,74	2,93	2,81	2,84	2,72	2,88	2,84	2,93	2,86	2,85	2,79
p825.486@6.8		2,38	2,41	2,56	2,49	2,48	2,36	2,54	2,48	2,56	2,51	2,54	2,43
p826.489@6.8		1,90	1,89	2,12	2,01	1,91	1,86	2,03	1,99	2,05	2,01	2,02	1,96
p828.516@6.9		2,69	2,84	2,76	2,74	2,77	2,87	2,78	2,79	2,80	2,79	2,74	2,74
p829.458@6.8		2,64	2,64	2,78	2,64	2,65	2,61	2,80	2,79	2,63	2,69	2,72	2,60
p830.447@6.8		2,31	2,24	2,38	2,31	2,34	2,16	2,44	2,42	2,27	2,25	2,34	2,23
p831.482@7.4		2,92	2,85	3,19	3,12	3,19	3,47	3,06	3,06	3,15	3,24	3,28	3,17
p832.486@7.4		2,53	2,51	2,85	2,77	2,81	3,10	2,73	2,65	2,80	2,91	2,89	2,79
p833.474@6.9		2,60	2,74	2,71	2,64	2,70	2,75	2,81	2,81	2,68	2,69	2,59	2,59
p834.477@6.9		2,25	2,30	2,32	2,24	2,27	2,39	2,43	2,39	2,30	2,28	2,23	2,26
p835.534@9.6		2,69	2,60	2,77	2,50	2,35	2,43	2,30	2,25	2,52	2,75	2,78	2,76
p836.539@9.6	C47H76O16	2,36	2,36	2,55	2,25	2,07	2,17	1,96	1,95	2,27	2,51	2,51	2,46
p837.53@9.6		2,08	1,99	2,08	1,84	1,82	1,92	1,73	1,75	2,01	2,10	2,11	1,96
p839.512@12.1		3,18	3,15	3,02	2,85	2,87	2,98	3,40	3,38	3,25	3,30	2,96	3,04

p839.564@10.3		2,03	2,02	2,14	2,15	2,12	2,20	2,10	2,17	2,10	2,19	2,08	2,10
p840.57@10.3		2,90	2,87	2,75	2,53	2,63	2,73	3,12	3,13	2,94	3,01	2,70	2,74
p841.568@10.3		2,42	2,40	2,31	2,16	2,18	2,31	2,66	2,66	2,57	2,58	2,31	2,31
p842.568@10.3		1,85	1,78	1,77	1,57	1,51	1,80	2,10	2,02	1,94	1,94	1,68	1,75
p845.417@6.8		2,34	2,26	2,43	2,31	2,26	2,11	2,46	2,47	2,34	2,29	2,27	2,25
p846.421@6.8		1,93	1,99	2,05	1,89	1,90	1,80	2,21	2,11	1,85	1,93	1,93	1,78
p849.448@6.9	C21H28O8	2,41	2,54	2,42	2,43	2,36	2,48	2,57	2,54	2,40	2,36	2,26	2,37
p850.455@6.9		1,92	2,21	2,08	2,00	1,95	2,07	2,11	2,21	1,85	2,02	1,97	1,94
p851.485@6.9		3,10	3,28	3,23	3,18	3,18	3,19	3,24	3,22	3,15	3,21	3,21	3,08
p852.489@6.9	C30H52O7P2	2,70	2,92	2,90	2,81	2,85	2,83	2,90	2,87	2,76	2,83	2,86	2,72
p853.496@7.4		2,92	2,86	3,20	3,16	3,19	3,35	3,13	3,02	3,19	3,21	3,25	3,20
p854.5@7.4		2,57	2,56	2,86	2,83	2,84	2,99	2,74	2,76	2,84	2,86	2,88	2,83
p855.517@7		2,60	2,75	2,72	2,56	2,66	2,60	2,69	2,66	2,62	2,72	2,73	2,62
p856.524@7	C35H44O9	2,21	2,47	2,34	2,28	2,32	2,22	2,34	2,29	2,24	2,30	2,34	2,29
p857.524@7		1,70	1,98	1,87	1,80	1,79	1,68	1,87	1,78	1,68	1,84	1,86	1,66
p862.513@7.4		2,05	1,99	2,30	2,26	2,24	2,41	2,13	2,15	2,30	2,28	2,36	2,31
p864.487@7.4		1,77	1,61	1,93	1,94	1,92	2,02	1,89	1,86	1,92	1,95	1,94	1,85
p867.471@9.6	C41H56N8O9	2,24	2,14	2,32	2,16	2,07	2,22	2,16	2,11	2,21	2,33	2,33	2,26
p868.511@6.9		2,60	2,84	2,76	2,72	2,70	2,82	2,80	2,78	2,84	2,78	2,75	2,71
p869.509@6.9		2,38	2,57	2,55	2,40	2,38	2,53	2,53	2,48	2,57	2,50	2,50	2,45
p871.503@10.3	C32H47N5O6	2,17	2,14	2,27	2,19	2,33	2,36	2,38	2,33	2,24	2,35	2,27	2,24
p872.542@7		2,50	2,77	2,68	2,61	2,58	2,55	2,58	2,56	2,69	2,66	2,64	2,61
p873.485@6.9		2,59	2,71	2,71	2,63	2,61	2,66	2,75	2,74	2,59	2,65	2,62	2,61
p874.481@6.9		2,25	2,35	2,29	2,15	2,30	2,29	2,36	2,41	2,19	2,26	2,18	2,26
p875.509@7.4	C24H36O3	2,75	2,73	3,04	3,01	3,07	3,20	2,90	2,93	3,06	3,08	3,12	3,07
p876.513@7.4		2,45	2,44	2,76	2,64	2,81	2,89	2,65	2,60	2,72	2,77	2,81	2,73
p877.5@7		2,53	2,70	2,65	2,52	2,57	2,56	2,68	2,61	2,50	2,59	2,60	2,53
p878.502@7		2,15	2,34	2,26	2,19	2,21	2,23	2,24	2,19	2,17	2,18	2,20	2,16
p889.44@6.9		2,33	2,32	2,32	2,23	2,15	2,29	2,34	2,47	2,21	2,24	2,26	2,46
p890.584@9	C18H37NO	2,05	2,01	2,39	2,46	2,55	2,59	2,02	2,02	2,22	2,28	2,12	2,07
p891.586@9		1,73	1,64	2,14	2,19	2,27	2,34	1,62	1,74	1,86	1,95	1,86	1,83
p893.472@7		2,30	2,45	2,34	2,25	2,21	2,28	2,41	2,38	2,22	2,23	2,26	2,18
p894.475@7	C22H29FO5	1,96	2,20	1,99	1,88	1,67	1,96	2,07	2,04	1,83	1,76	1,84	1,84
p895.51@7		2,81	2,92	2,96	2,86	2,89	2,98	2,88	2,81	2,83	2,90	2,94	2,78
p896.517@7		2,54	2,64	2,61	2,51	2,50	2,48	2,56	2,50	2,49	2,55	2,44	2,24
p897.521@7.5		2,41	2,34	2,79	2,67	2,72	3,03	2,60	2,60	2,72	2,78	2,75	2,74
p898.526@7.5	C43H48N4O6	2,12	2,06	2,44	2,38	2,48	2,71	2,30	2,30	2,24	2,45	2,49	2,38
p899.544@7.1		2,29	2,44	2,46	2,33	2,37	2,56	2,27	2,32	2,35	2,44	2,46	2,18
p900.55@7		1,94	2,11	2,13	2,02	2,02	2,22	2,03	1,88	1,96	2,09	2,11	1,96
p912.538@7		2,35	2,54	2,57	2,45	2,46	2,64	2,52	2,45	2,58	2,44	2,55	2,39
p913.531@7		2,28	2,40	2,44	2,31	2,31	2,50	2,32	2,21	2,44	2,38	2,31	2,30
p916.57@7.1		2,28	2,48	2,46	2,37	2,26	2,61	2,27	2,12	2,47	2,47	2,39	2,37

p917.512@7		2,37	2,47	2,46	2,33	2,39	2,49	2,37	2,36	2,31	2,39	2,43	2,30
p918.506@7		2,05	2,19	2,15	1,97	2,03	2,11	2,11	2,05	1,99	2,03	1,97	1,95
p919.534@7.5		2,32	2,32	2,73	2,60	2,71	2,81	2,48	2,47	2,66	2,69	2,73	2,68
p920.538@7.5		2,11	1,97	2,48	2,34	2,40	2,58	2,23	2,20	2,41	2,45	2,47	2,43
p921.528@7.1		2,36	2,51	2,47	2,45	2,40	2,61	2,42	2,39	2,41	2,46	2,44	2,32
p922.531@7.1		2,01	2,23	2,15	2,01	2,07	2,18	2,11	2,02	1,96	2,10	2,05	1,93
p933.468@7		2,02	2,18	2,05	1,96	2,00	2,05	2,08	2,07	1,86	1,86	2,10	1,83
p937.5@7.1		2,15	2,26	2,18	2,10	2,05	2,28	2,19	2,17	2,08	2,12	2,15	2,08
p939.535@7		2,41	2,79	2,68	2,65	2,64	2,84	2,77	2,74	2,65	2,56	2,60	2,59
p941.545@7.5		2,16	2,13	2,49	2,39	2,47	2,58	2,34	2,26	2,45	2,55	2,56	2,48
p961.528@7	C21H41N5O7	2,16	2,39	2,29	2,25	2,21	2,41	2,43	2,37	2,24	2,16	2,04	2,17
p965.555@7.1		1,88	2,12	2,15	2,03	1,89	2,33	2,25	2,10	1,94	1,91	1,96	1,96
p983.566@7.1	C6H13NO2	2,44	2,63	2,58	2,51	2,52	2,68	2,57	2,55	0,00	0,00	0,00	0,00