



Figure S1:  $^1\text{H}$  NMR assignment of metabolites in beer wort.

Table S1: List of the metabolites identified by  $^1\text{H}$  NMR analysis in beer wort.

Compound	Assignment	$\delta$ $^1\text{H}$ ppm (multiplicity)
Leucine	$\delta$ -CH <sub>3</sub>	0.97 (d)
Isoleucine	$\delta$ -CH <sub>3</sub>	0.94 (t)
Valine	$\gamma$ -CH <sub>3</sub>	1.05 (d)
Lactic acid	CH <sub>3</sub>	1.33 (d)
Alanine + Isopentanol	CH <sub>3</sub>	1.48 (d)
Acetic acid	CH <sub>3</sub>	1.92 (s)
Proline	4- CH <sub>2</sub>	1.96-2.11 (m)
Pyruvic acid	CH <sub>3</sub>	2.35 (s)
GABA	$\alpha$ -CH	2.39 (t)
Malic + Citric acid	$\frac{1}{2}$ - CH <sub>2</sub>	2.56-2.70 (dd)
Choline	CH <sub>3</sub>	3.21 (s)
Glycine	CH <sub>2</sub>	3.56 (s)
Glucose	CH <sub>2</sub>	5.24 (d)
	CH <sub>2</sub>	4.66 (d)
Dextrins	-C1H	4.64 (d)
Maltose	C1H	5.41 (d)
Fumaric acid	CH	6.52 (s)
Histidine	4'-CH	7.09 (s)
Tyrosine	3',5'-CH	6.90 (d)
Phenylalanine	3',5'-CH	7.43 (t)
Formic acid	CH	8.36 (s)