

혈장 지질체의 상세한 분석을 위한 종합적이고 선별된 고처리량 분석법

저자

Kevin Huynh,
Natalie A. Mellett,
Thy Duong, Anh Nguyen,
Thomas G. Meikle, Corey Giles,
and Peter J. Meikle
Baker Heart and Diabetes
Institute
Melbourne, Australia

Mark Sartain
Agilent Technologies, Inc.

개요

집단 수준에서의 인간 지질체를 연구하기 위해 액체 크로마토그래피/탠덤 질량 분석법 (LC/MS/MS)과 같은 고급 지질학 기술을 사용함으로써 연구자들은 질병 상태와 지질 대사 사이의 관계를 조사할 수 있게 되었습니다. 이러한 연구를 위해서는 필연적으로 인구 집단으로부터 채취한 많은 수의 표본이 필요합니다. 지질체를 포괄적으로 이해하기 위해서는 수백 가지의 지질 종을 분석해야 하므로 적용 범위의 깊이와 시료 처리량 사이에서 균형점을 찾아야 합니다. 이 응용 자료에서는 10 μ L의 혈장을 사용하여 763 가지의 서로 다른 인간 지질 종의 측정을 위한 표적화된 LC/TQ 기반 분석법을 설명합니다. 총 분석 시간은 단일 컬럼 사용시 시료당 16분이었고 이중 컬럼 시스템에서 실행할 경우 13분으로 단축되었습니다. 이와 함께 시료 전처리와 지질 추출, 품질 관리 시료 전략, 내부 표준물질 조제, 기기 조건 및 데이터 처리에 대한 고려 사항을 설명합니다.

서론

지질은 다양한 특성과 기능을 가진 복잡한 생물학적 분자로, 세포막과 지방 조직을 이루는 주요 구성 요소이고 포유류에서 주요 에너지 저장 분자의 역할을 합니다. 이와 더불어 세포 신호 전달 경로에서 필수적인 역할을 합니다. 따라서 지질 생물학에 대한 이해도를 높이려는 노력은 농업부터 의학에 이르기까지 광범위한 과학 분야에서 큰 관심을 받고 있습니다.

지질체학은 세포, 조직 또는 혈장 부피와 같은 주어진 생물학적 시스템 내에서 지질의 총체인 지질체를 연구하는 학문입니다. 이 학문의 궁극적인 목표는 존재하는 지질 중, 이러한 지질의 대사 및 관련 생물학에 대한 전체적인 시야를 얻는 것입니다. 최근 지질학 기술의 발전으로 지질체 내에 존재하는 이성질체 및 동중원소 종을 포함하여 광범위한 지질을 맵핑할 수 있게 되었습니다. 특히, 탠덤 질량 분석법(LC/MS/MS) 및 다중 반응 모니터링(MRM)과 결합된 액체 크로마토그래피와 같은 기술을 통해 사용자들은 이제 짧은 시간 내에 높은 수준의 특이성으로 수백 가지의 서로 다른 지질 종을 측정할 수 있습니다. 최신 기기의 향상된 감도 덕분에 생물학적 물질 내에 미량 농도로 존재하는 이러한 화합물을 측정하는 일이 수월해졌습니다. 크로마토그래피 분리의 개선으로 지질체를 점차 더 세부적으로 맵핑하는 능력도 함께 개선되고 있습니다.

아마도 이러한 고급 지질학 기술의 가장 흥미로운 적용 분야는 지질 종, 대사 경로 및 질병 상태 사이의 연관성을 밝히는 집단 수준의 인간 지질체 연구일 것입니다. 이러한 연구는 지질 종이 대부분 지질단백질 입자 내에 존재하는 인간 혈장을 사용하여 수행되며(그림 1), 수천 명이 참여하는 대규모 집단 및 임상 연구에서 시료를 추출합니다.^{1,2} 이러한 많은 양의 시료를 처리할 때는 적용 범위의 깊이, 수집된 질량 분석 데이터의 분리능, 시료 처리량 사이에서 균형을 맞춰야 합니다.

이러한 고려 사항을 염두에 두고 이 응용 자료에서는 10 μ L 혈장 시료 또는 동등한 양의 세포 또는 조직 균질액 내 44가지 지질 분류에서 763개의 서로 다른 지질 종의 농도를 측정하는 방법을 자세히 설명합니다. 역상 액체 크로마토그래피로 분리한 후 탠덤

사중극자 질량 분석기(MS/MS)를 통해 분석을 수행합니다. 사용된 내부 표준물질과 함께 지질 종/분류의 이온화 및 조각화 세부 정보를 표 1에 상세히 수록했습니다. 총 분석 시간은 단일 컬럼 분석법의 경우 시료당 16분, 이중 컬럼 시스템의 경우 13분입니다. 이 분석법은 신속한 데이터 처리가 가능한 Agilent MassHunter 소프트웨어 패키지와 통합된 Agilent LC/MS/MS를 사용합니다.

보고된 분석법은 주로 고처리량의 대규모 코호트 연구 혈장 시료 분석을 위해 개발되었지만 다양한 생물학적 매트릭스에 맞게 이 프로토콜을 쉽게 조정할 수 있습니다. 필요한 구조적 분리능 수준에 맞게 LC 분리 및 MS/MS 파라미터를 조정할 수 있으며, 처리량 요구 사항에 따라 분리 프로토콜을 수정할 수도 있습니다.

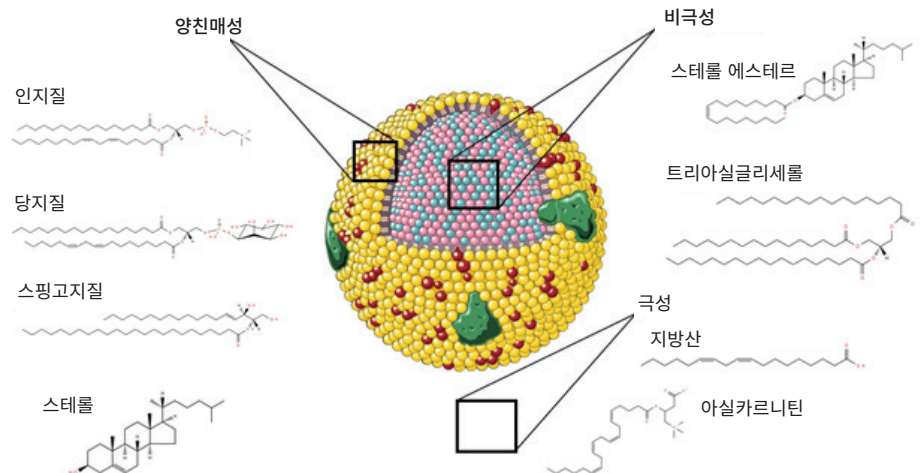


그림 1. 인간 혈장에서 흔히 볼 수 있는 지질 분류를 보여주는 다이어그램. 지질은 여러 분류와 하위 분류를 포함하는 작은 양친매성 분자입니다. 인간 혈장에서 이러한 지질의 대부분은 말초를 순환하는 지질단백질 입자에서 발견됩니다.

표 1. 지질 분류의 이온화 및 조각화 세부 정보.

지질 분류/하위 분류	모이온	조각화 ¹	지질 종의 수	내부 표준물질	내부 표준물질 (pmol)/시료
Sphingosine (Sph)	[M + H] ⁺	NL, 18.0Da	2	Sph(d17:1)	20
Sphingosine-1-phosphate (S1P)	[M + H] ⁺	Sphingoid 기반별	4	S1P(18:1) d7	40
Dihydroceramide (dhCer)	[M + H] ⁺	Sphingoid 기반별	6	dhCer(d18:0/8:0)	50
Ceramide (Cer(d))	[M + H] ⁺	Sphingoid 기반별	41	Cer(d18:1-d7/18:0)	50
Deoxyceramide (Cer(m))	[M + H] ⁺	Sphingoid 기반별	11	Cer(d18:1-d7/18:0)	50
Ceramide-1-phosphate (C1P)	[M + H] ⁺	Sphingoid 기반별	1	Cer(d18:1-d7/18:0)	50
Monohexosylceramide (HexCer)	[M + H] ⁺	Sphingoid 기반별	13	HexCer(d18:1/15:0) d7	50
Dihexosylceramide (Hex2Cer)	[M + H] ⁺	Sphingoid 기반별	9	Hex2Cer(d18:1/15:0) d7	50
Trihexosylceramide (Hex3Cer)	[M + H] ⁺	Sphingoid 기반별	5	Hex3Cer(d18:1/17:0)	50
GM3 ganglioside (GM3)	[M + H] ⁺	Sphingoid 기반별	6	Hex3Cer(d18:1/17:0)	50
Sulfatide (SHexCer)	[M + H] ⁺	PI, m/z 264.3	5	SHexCer(d18:1/12:0)	10
Sphingomyelin (SM)	[M + H] ⁺	PI, m/z 184.1	45	SM(d18:1/15:0) d9	100
Phosphatidic acid (PA)	[M + H] ⁺	NL, 115.0Da	4	PA(15:0_18:1) d7	50
Phosphatidylcholine (PC)	[M + H] ⁺	PI, m/z 184.1	70	PC(15:0_18:1) d7	100
Alkylphosphatidylcholine (PC(O))	[M + H] ⁺	PI, m/z 184.1	23	PC(15:0_18:1) d7	100
Alkenylphosphatidylcholine (plasmalogen) (PC(P))	[M + H] ⁺	PI, m/z 184.1	28	PC(P-18:0/18:1) d9	100
Lysophosphatidylcholine (LPC)	[M + H] ⁺	PI, m/z 184.1 및 m/z 104.1	61	LPC(18:1) d7	100
Lysoalkylphosphatidylcholine (lysoplatelet activating factor) (LPC(O))	[M + H] ⁺	PI, m/z 104.1	10	LPC(18:1) d7	100
Lysoalkenylphosphatidylcholine (plasmalogen) (LPC(P))	[M + H] ⁺	PI, m/z 104.1	6	LPC(18:1) d7	100
Phosphatidylethanolamine (PE)	[M + H] ⁺	NL, 141.0 Da	32	PE(15:0_18:1) d7	100
Alkylphosphatidylethanolamine (PE(O))	[M + H] ⁺	NL, 141.0 Da	15	PE(15:0_18:1) d7	100
Alkenylphosphatidylethanolamine (plasmalogen) (PE(P))	[M + H] ⁺	Acyl 체인별	48	PE(P-18:0/18:1) d9	100
Lysophosphatidylethanolamine (LPE)	[M + H] ⁺	NL, 141.0 Da	12	LPE(18:1) d7	100
Lysoalkenylphosphatidylethanolamine (plasmalogen) (LPE(P))	[M + H] ⁺	NL, 171.9 Da	4	LPE(18:1) d7	100
Phosphatidylinositol (PI)	[M + NH ₄] ⁺	NL, 277.0 Da	25	PI(15:0_18:1) d7	50
Phosphatidylinositol monophosphate (PIP1)	[M + NH ₄] ⁺	NL, 357.0 Da	1	PI(15:0_18:1) d7	50
Lysophosphatidylinositol (LPI)	[M + NH ₄] ⁺	NL, 277.0 Da	7	LPI(13:0)	20
Phosphatidylserine (PS)	[M + H] ⁺	NL, 185.0 Da	4	PS(15:0_18:1) d7	50
Phosphatidylglycerol (PG)	[M + NH ₄] ⁺	NL, 189.0 Da	4	PG(15:0_18:1) d7	50
Cholesteryl ester (CE)	[M + NH ₄] ⁺	PI, m/z 369.3	27	CE(18:0) d6	1,000
Free cholesterol (COH)	[M + NH ₄] ⁺ Insource Fragment	PI, m/z 161.2	1	COH(d7)	10,000
Dehydrocholesterol ester (DE)	[M + NH ₄] ⁺	PI, m/z 367.4	4	CE(18:0) d6	1,000
Methyl-cholesteryl ester (methyl-CE)	[M + NH ₄] ⁺	PI, m/z 383.3	4	CE(18:0) d6	1,000
Methyl-dehydrocholesteryl ester (methyl-DE)	[M + NH ₄] ⁺	PI, m/z 381.4	2	CE(18:0) d6	1,000
Dimethyl-cholesteryl ester (dimethyl-CE)	[M + NH ₄] ⁺	PI, m/z 396.6	3	CE(18:0) d6	1,000
Free fatty acid (FFA)	[M - H] ⁻	SIM	16	FFA(18:1) d9	200
Acylcarnitine (AC)	[M + H] ⁺	PI, m/z 85.1	28	AC(16:0) d3	10
Hydroxylated acylcarnitine (AC-OH)	[M + H] ⁺	PI, m/z 85.1	8	AC(16:0) d3	10
Bile acid (BA)	[M + NH ₄] ⁺	종에 따라 다름	2	Cholic acid d4	50
Diacylglycerol (DG)	[M + NH ₄] ⁺	NL, 지방산	24	DG(15:0_18:1) d7	200
Triacylglycerol (중성 손실, 연관성 목적) (TG [NL])	[M + NH ₄] ⁺	NL, 지방산	77	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	100
Alkylidiacylglycerol (중성 손실, 연관성 목적) (TG(O) [NL])	[M + NH ₄] ⁺	NL, 지방산	19	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	100
Ubiquinone	[M + NH ₄] ⁺	PI, m/z 197.0	1	Hex3Cer(d18:1/17:0)	50
Oxidised lipids (OxSpecies)	종에 따라 다름 [+O]	종에 따라 다름	6	종에 따라 다름	-

¹ NL = 중성 손실, PI = 전구 이온

실험

화학물질

포름산 암모늄은 Sigma-Aldrich(St. Louis, MO, USA)에서 구입했습니다. 메탄올(LC), 1-butanol(LC), 물(LC/MS 등급), acetonitrile 및 2-propanol(LC/MS용 하이퍼그레이드, LiChrosolv)은 Supelco(Bellefonte, PA, USA)에서 구입했습니다. NIST1950 QC 재료는 National Institute of Standards and Technology(Los Angeles, CA, USA)에서 구입했습니다. acylcarnitine 16:0 d3(Larodan AB, Solna, Sweden),

cholesteryl ester 18:0 d6(CDN Isotopes, Quebec, Canada), C18:1 d9 지방산(Sigma-Aldrich, St. Louis, MI, USA) 및 trihexosylceramide 17:0(Matreya LLC, State College, PA, USA)을 제외하고 모든 내부 표준물질은 Avanti Polar Lipids(Alabaster, AL, USA)에서 구입했습니다.

내부 표준 혼합물질의 제조

분석 대상인 각 지질 종의 상대적 농도를 측정하기 위해 안정 동위원소 표지 및 비생리학적 종으로 구성된 내부 표준물질을 각 시료에 추가했습니다. 내부 표준

혼합물질은 시중에서 구할 수 있는 물질을 이용해 자체적으로 준비했지만(표 2) SPLASH LIPIDOMIX 질량 분석 표준물질(Avanti)과 같은 사전 제조된 혼합물로 적합합니다. 대체 내부 표준물질 제조를 사용하는 경우, 각 추가 표준 화합물의 머무름 시간을 생성하고 그에 따라 기기와 데이터 처리 분석법 파일을 모두 업데이트해야 합니다.

개별 내부 표준물질은 모두 공급업체로부터 받은 그대로 -80°C에서 보관했습니다. 혼합물을 준비하기 위해 표준물질을 실온으로 녹인 다음 표 2의 3열에 나열된 지정된 스톡 용액 농도를 만들기

표 2. 내부 표준물질 정보.

품명	분자량	스톡 용액 (μM)	표준 혼합물 농도 (μM)	pmol/시료 (10μL)	용매	공급업체	카탈로그 번호	Avanti SPLASH LIPIDOMIX에 존재 ^{1,2,3}
AC(16:0) d3	439.09	100	1	10	CHCl ₃ :MeOH (1:1)	Larodan	71-1746-5	아니요
CE(18:0) d6	659.16	2,000	100	1,000	CHCl ₃ :MeOH (1:1)	CDN 동위원소	D-5823	아니요
Cer(d18:1-d7/18:0)	572.99	200	5	50	CHCl ₃ :MeOH (1:1)	Avanti	860677P	아니요
Cholic acid d4	412.61	200	5	50	CHCl ₃ :MeOH (1:1)	Cayman	20849	아니요
COH(d7)	393.69	20,000	1,000	10,000	CHCl ₃ :MeOH (1:1)	Avanti	700041P	예
DG(15:0_18:1) d7	587.97	800	20	200	CHCl ₃ :MeOH (1:1)	Avanti	791647	예
dhCer(d18:0/8:0)	427.71	200	5	50	CHCl ₃ :MeOH (1:1)	Avanti	860626P	아니요
FFA(18:1) d9	291.52	3,000	20	200	CHCl ₃ :MeOH (1:1)	Avanti	861809	아니요
Hex2Cer(d18:1/15:0) d7	855.21	400	5	50	CHCl ₃ :MeOH:H ₂ O (1:1:0.2)	Avanti	330727	아니요
Hex3Cer(d18:1/17:0)	1038.35	100	5	50	CHCl ₃ :MeOH:H ₂ O (1:1:0.2)	Matreya LLC	1523	아니요
HexCer(d18:1/15:0) d7	693.06	400	5	50	CHCl ₃ :MeOH (1:1)	Avanti	330729	아니요
LPC(18:1) d7	528.71	400	10	100	CHCl ₃ :MeOH (1:1)	Avanti	791643	예
LPE(18:1) d7	486.63	400	10	100	CHCl ₃ :MeOH (1:1)	Avanti	791644	예
LPI(13:0)	547.57	200	2	20	CHCl ₃ :MeOH (1:1)	Avanti	850101	아니요
PA(15:0_18:1) d7	689.93	400	5	50	CHCl ₃ :MeOH (1:1)	Avanti	791642	예
PC(15:0_18:1) d7	753.09	400	10	100	CHCl ₃ :MeOH (1:1)	Avanti	791637	예
PC(P-18:0/18:1) d9	781.19	400	10	100	CHCl ₃ :MeOH (1:1)	Avanti	852475	예
PE(15:0_18:1) d7	711.01	400	10	100	CHCl ₃ :MeOH (1:1)	Avanti	791638	예
PE(P-18:0/18:1) d9	739.11	400	10	100	CHCl ₃ :MeOH (1:1)	Avanti	852474	예
PG(15:0_18:1) d7	764.01	400	5	50	CHCl ₃ :MeOH (1:1)	Avanti	791640	예
PI(15:0_18:1) d7	847.12	400	5	50	CHCl ₃ :MeOH (1:1)	Avanti	791641	예
PS(15:0_18:1) d7	777.00	400	5	50	CHCl ₃ :MeOH:H ₂ O (1:1:0.2)	Avanti	791639	예
STP(18:1) d7	386.52	400	4	40	CHCl ₃ :MeOH:H ₂ O (1:1:0.2)	Avanti	860659	아니요
SHexCer(d18:1/12:0)	741.03	200	1	10	CHCl ₃ :MeOH (1:1)	Avanti	860573P	아니요
SM(d18:1/15:0) d9	698.06	800	10	100	CHCl ₃ :MeOH (1:1)	Avanti	860686	아니요
Sph(d17:1)	285.47	400	2	20	CHCl ₃ :MeOH (1:1)	Avanti	860640P	아니요
TG(15:0_18:1-d7_15:0)	812.35	400	10	100	CHCl ₃ :MeOH (1:1)	Avanti	791648	예

¹ 여기에 나열된 특정 CE 및 SM 표준물질은 Avanti SPLASH LIPIDOMIX에 없지만 동등한 표준물질이 있습니다.

² Plasmalogen 표준물질은 SPLASH II Lipidomix 혼합물에서만 사용할 수 있습니다. Plasmalogen 표준물질은 SPLASH I LIPIDOMIX에서만 사용할 수 있습니다.

³ SPLASH LIPIDOMIX에서 사용 가능한 모든 표준물질이 3열에 표시된 동일한 농도로 포함되어 있는 것은 아닙니다.

위해 클로로포름:메탄올을 1:1 비율로 제조했습니다. 그런 다음 이렇게 만들어진 스톱 용액을 합하여 표 2의 4열에 나열된 최종 농도로 모든 내부 표준물질의 단일 혼합물을 만들었습니다. 이 내부 표준 혼합물을 15분 동안 초음파 수조에서 초음파 처리하여 완전히 혼합한 다음 단일 사용량으로 분취하여 -80°C에 보관했습니다.

추출 용매의 제조

혈장 시료에서 지질을 추출하는 데 사용할 용매를 준비하기 위해 미리 준비된 내부 표준 혼합물질 분취액을 실온으로 녹이고(1시간) 15분 동안 수조에서 초음파 처리한 다음 불텍싱했습니다. 그런 다음 필요한 양의 내부 표준 혼합물질(추출할 시료당 10μL)을 진공 하에 건조시키고 10mM 포름산 암모늄을 포함하는 10배량의 부탄올:메탄올(1:1)로 제조하여 15분 동안 다시 수조에서 초음파 처리했습니다. 예를 들어, 시료 100개를 추출해야 하는 경우 내부 표준 혼합물질 1mL를 건조시키고 10mM 포름산 암모늄을 포함한 부탄올:메탄올(1:1) 10mL로 제조합니다.

시료 작업 목록, 무작위화 및 품질 관리 시료 포함

시료를 추출하거나 분석하기 전에 대상 및 대조군 시료가 처리되는 순서를 지정하는 시료 작업 목록을 작성했습니다. 시료를 먼저 추출한 다음, 분석을 위한 LC/MS/MS로 도입되는 이 순서로 유지합니다. 이를 달성하기 위해, 데이터 세트 전체에서 편향적 추출의 영향을 최소화하려는 목적으로 모든 대상 시료를 처음에 무작위화했습니다. 통계적 관련성이 있는 시료 그룹 또는 시점의 경우에는 쌍이 유지되도록 하는 한편, 수집 순서와 같은 요소는 무작위로 지정했습니다.

그 후, 다양한 품질 관리 시료를 작업목록에 도입했습니다. 대상 시료와 함께 PQC, NIST1950 QC 및 바탕 시료를 동일한 절차를 이용해 추출했으며, TQC는 이전에 추출 및 풀링한 혈장에서 추출했습니다. 이러한 시료는 결과 데이터를 정렬하고 기기 드리프트와 변동(배치 내 및 여러 배치 간)을 보정하며 데이터 내의 더 심각한 오류도 검출해야 합니다. 각 품질 관리 시료 유형의 구성과 역할을 아래에 요약했으며, 시료 작업 목록 내에서 이를 배분하는 절차도 함께 나와 있습니다.

혈장 품질 관리(PQC)

PQC 시료는 건강한 자원자(n=8~20)로부터 채취한 혈장으로 구성되며 이를 하나로 취합하여 1회 사용분으로 분취한 다음, -80°C에서 보관했습니다. 추출 과정에서 도입될 수 있는 변화를 테스트하기 위해 15개 시료마다 PQC 시료를 포함시켰습니다(배치당 최소 10개의 PQC 시료 포함). 이러한 시료의 %CV를 통해 피펫팅 및 취급 과정에서 도입된 오류를 모니터링할 수 있었고, 많은 수의 시료로 인해 여러 추출 배치가 필요한 경우에 배치 정렬도 가능했습니다.

기술적 품질 관리(TQC)

TQC 시료는 PQC에 사용된 동일한 혈장을 추출하여 별도로 준비한 다음, 추출 변동성을 제거하기 위해 추출물을 모았습니다. 추출 변동성이 제거되었기 때문에 이러한 TQC 시료를 이용해 기기 변동성 및 성능(분리능, 머무름 시간 드리프트 등)을 구체적으로 모니터링할 수 있습니다. 이러한 시료는 15개의 생물학적 시료마다, 그리고 배치당 최소 10개 이상 포함시켰습니다.

NIST1950 품질 관리(NIST1950 QC)

NIST1950은 상업적으로 이용 가능하고 표준화된 혈장 원료입니다. NIST1950 품질 관리 시료를 추가하면 실험실 내의 다양한 시료 세트를 정확하게 정렬할 수 있을 뿐만 아니라 NIST1950 QC를 사용하는 다른 실험실의 다른 시료 세트도 정확하게 정렬할 수 있습니다. 여러 차례의 냉동/해동을 반복하지 않기 위해 NIST1950 QC 시료를 해동하고 단일 프로세스로 Eppendorf 추출 튜브에 분취했습니다(10μL). NIST1950 QC 시료는 30개 시료마다 하나씩, 모든 배치에서 최소 8개 이상을 포함시켰습니다.

바탕 시료

백그라운드 신호를 모니터링하기 위해 10μL의 milliQ 물로 구성된 바탕 시료를 포함시켰으며, 생물학적 시료 및 PQC와 동시에 추출했습니다. 이러한 시료는 30개 시료마다 하나씩, 모든 배치에서 최소 5개 바탕 시료 이상을 포함시켰습니다.

인간 혈장의 지질 추출

고농도의 염 및 단백질로 인한 기기 오염을 방지하기 위해 모든 혈장 시료를 용매로 추출하는 과정에서 관심 화합물은 용액으로 옮겨지고 염 및 단백질은 펠릿화하여 폐기할 수 있도록 했습니다.³

폴리프로필렌 positive displacement 피펫을 사용하여 1.5mL 마이크로 원심분리 튜브에서 지질을 추출했습니다. 10mM 포름산 암모늄을 포함한 부탄올:메탄올(1:1) 용액 및 재구성된 내부 표준 혼합물질로 제조된 100μL의 추출 용매를 10μL의 혈장과 혼합했습니다(표 2). 그런 다음 각 시료를 5초 동안 불텍싱한 후 온도를 21~25°C로 유지하면서 1시간 동안

수조에서 초음파 처리했습니다. 그런 다음 시료를 원심분리(13,000xg, 10분, 20°C) 하고 상층액을 200µL 유리 인서트(5183-2085)가 있는 1.5mL 유리 시료 바이알(5190-9062)로 옮겼습니다. PTFE/S 캡(5185-5820)을 사용하여 시료를 막아야 합니다. 시료는 분석 직전까지 -80°C에서 보관한 후 실온으로 해동하고(1시간) 15분 동안 수조에서 초음파 처리 후 잠시 불특정한 다음, 기기의 자동 시료 주입기에 로드했습니다.

고처리량 분석이 필요한 경우, 응용 자료 5991-5724에 따라 Bravo 플랫폼에서 96웰 플레이트를 이용해 시료를 추출할 수 있습니다.⁴

기기 및 LC/MS/MS 분석법

다음은 포함한 Agilent 1290 Infinity/Infinity II LC 시스템을 사용하여 추출된 혈장 시료를 분리했습니다.

- Agilent 1290 Infinity 자동 시료 주입기 (G4226A) **참고:** 또는, 1290 Infinity II Multisampler(G7167B)를 머무름 시간에 미치는 영향을 최소화하면서 사용할 수 있습니다
- Agilent 1290 Infinity II 고속(바이너리) 펌프(G7120A, 이중 컬럼 설정에 두 개의 펌프가 사용됨)
- Agilent 1290 Infinity II Multicolumn Thermostat(G7116B), Agilent InfinityLab Quick Change 2-위치/10-포트 밸브 헤드 장착(이중 컬럼 설정에 사용, 부품 번호 5067-4240)

단일 및 이중 컬럼 설정에 대한 배관 요구 사항을 그림 2와 표 5에 나타내었습니다.

LC 시스템은 Agilent Jet Stream 기술 이온화원을 탑재한 Agilent 6495C QQQ LC/MS에 연결되었습니다.

지질 추출물(1µL, 0.1µL 혈장에 해당)을 주입하고 16분 그레디언트를 사용하여 분리했습니다. 해당 조건을 표 3에 자세히 나타내었으며 처음 0.8분은 폐기 라인으로 연결했습니다. 또는, 이중 컬럼 설정을

표 3. 단일 컬럼 구성에 대한 크로마토그래피 조건.

파라미터	Agilent 1290 Infinity/Infinity II LC																						
분석 컬럼	Agilent ZORBAX Eclipse Plus C18, 100 × 2.1mm, 1.8µm(품번 959758-902)																						
인라인 필터	Agilent 1290 Infinity II 인라인 필터, 0.3µm(품번 5067-6189)																						
컬럼 온도	45°C																						
주입량	1µL(0.1µL 혈장에 해당)																						
자동 시료 주입기 온도	20°C																						
니들 세척	세척 바이알, 3초, 부탄올:메탄올(1:1) *또는 플러시 포트, 10초, 1:1 이동상 A/B를 사용할 수 있습니다.																						
이동상	A) 5:3:2 water:acetonitrile:2-propanol 중 10mM 포름산 암모늄, 5µM 애질런트 비활성화 첨가제 (품번 5191-3940) B) 1:9:90 water:acetonitrile:2-propanol 중 10mM 포름산 암모늄 *이동상 B에 비활성화 첨가제를 첨가하지 마십시오.																						
유속	0.4mL/분																						
그레디언트 프로그램	<table border="1"> <thead> <tr> <th>시간</th> <th>%B</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>0</td><td>15</td></tr> <tr><td>2.5</td><td>50</td></tr> <tr><td>2.6</td><td>57</td></tr> <tr><td>9</td><td>70</td></tr> <tr><td>9.1</td><td>93</td></tr> <tr><td>11</td><td>96</td></tr> <tr><td>11.1</td><td>100</td></tr> <tr><td>12</td><td>100</td></tr> <tr><td>12.2</td><td>15</td></tr> <tr><td>16</td><td>15</td></tr> </tbody> </table>	시간	%B	0	15	2.5	50	2.6	57	9	70	9.1	93	11	96	11.1	100	12	100	12.2	15	16	15
시간	%B																						
0	15																						
2.5	50																						
2.6	57																						
9	70																						
9.1	93																						
11	96																						
11.1	100																						
12	100																						
12.2	15																						
16	15																						
중지 시간	16분																						
사후 시간	없음																						

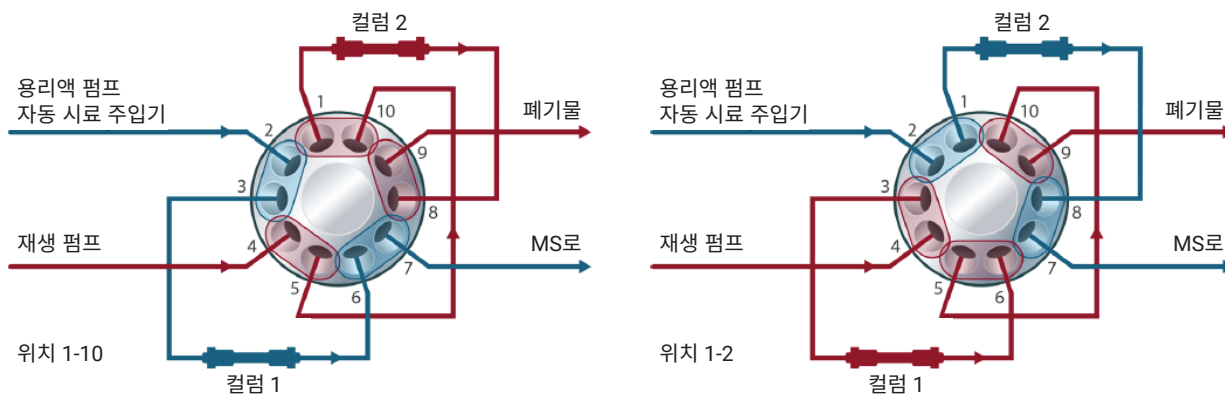


그림 2. 이중 컬럼 구성. 대체 컬럼 생성을 위한 스위칭 밸브 배관의 예.

사용하여 표 4에 자세히 설명된 13분
그레디언트 프로그램으로 분석 시간을
줄일 수 있습니다. LC/MS/MS 분석은
dMRM(dynamic multiple reaction
monitoring)을 통해 수행되었습니다.
MS 기기 파라미터 및 소스 조건을 표 6에
나타냈습니다. 이 분석법의 개발과 자세한
내용은 이전에 게시된 글에서 확인할 수
있습니다.¹

표 4. 이중 컬럼 구성에 대한 크로마토그래피 조건.

파라미터	Agilent 1290 Infinity/Infinity II LC	
분석 컬럼	Agilent ZORBAX Eclipse Plus C18, 100 × 2.1mm, 1.8µm(품번 959758-902) 2개	
인라인 필터	Agilent 1290 Infinity II 인라인 필터, 0.3µm(품번 5067-6189) 2개	
컬럼 온도	45°C	
주입량	1µL(0.1µL 혈장에 해당)	
자동 시료 주입기 온도	20°C	
니들 세척	세척 바이알, 3초, 부탄올:메탄올(1:1) *또는 플러시 포트, 10초, 1:1 이동상 A/B를 사용할 수 있습니다.	
이동상	A) 5:3:2 water:acetonitrile:2-propanol 중 10mM 포름산 암모늄, 5µM 애질런트 비활성화 첨가제 (품번 5191-3940) B) 1:9:90 water:acetonitrile:2-propanol 중 10mM 포름산 암모늄 *이동상 B에 비활성화 첨가제를 첨가하지 마십시오.	
유속	0.4mL/분	
그레디언트 프로그램	펌프 A(G7120A)	펌프 B(G7120A)
	시간 %B	시간 %B
	0 15	0 15
	2.5 50	1 15
	2.6 57	2 100
	9 70	6 100
	9.1 93	7 15
	11 96	12.9 15
	11.1 100	
	12 100	
	12.2 15	
	12.9 15	
중지 시간	13분	
사후 시간	없음	
MCT 밸브 위치	전류 사용, 실행 후 밸브 위치 증가	

표 5. 단일 컬럼 구성에 대한 LC 튜브 세부 정보.

위치	부품 설명	부품 번호 ¹
바이너리 펌프 믹서	V35 Jet Weaver 믹서	G7120-68135
펌프에서 자동 시료 주입기까지의 튜빙	캐필러리, 스테인리스 스틸, 0.17mm 내경, 600mm	G1312-67305
니들	니들 어셈블리, 0.12mm	G4226-87201
니들 시트	니들 시트, 0.12mm 내경	G4226-87012
미터링 캐필러리	캐필러리 스테인리스 스틸 0.17 × 160mm S/SL ps/ps	G4226-60301
시료 루프 어셈블리	20µL 루프 어셈블리	G4226-60310
자동 시료 주입기에서 MCT까지의 연결	캐필러리 SST 0.12 × 500mm 긴 소켓	5500~1157
열교환기	표준 유속 열교환기, 1.6µL	G7116-60015
인라인 필터에 연결	Quick Connect 어셈블리 ST 0.12 × 105mm	5067~5957
열교환기 입/출구용 피팅	Quick Turn LC 피팅	5067~5966
MS 연결용 PEEK 튜브	PEEK 튜브, 0.13mm 내경, 700mm	0890~1915

¹ 부품 번호는 여기에 설명된 LC 구성에 특정합니다. Agilent 1290 Infinity II Multisampler를 사용하는 경우 일부 부품 번호가 다를 수 있습니다.

dMRM(dynamic multiple reaction monitoring) 설정

이 분석법의 가장 중요한 측면은 질량 분석기 내에서 dMRM(dynamic multiple reaction monitoring)을 사용한다는 것입니다. 확장된 지질체에서 많은 수의 지질 종을 기기가 측정하려면 각 화합물이 용출되는 특정 머무름 시간 창을 지정해 줘야 합니다. 그러면 기기가 총 시료 실행 시간 동안 특정 지점에서 주어진 지질 종만 스캔할 수 있습니다. 이 머무름 시간 창은 MRM마다 다르며 피크 폭의 차이에 크게 좌우됩니다. 이 접근 방식은 기기 듀티 사이클을 개선하고 화합물당 평균 체류 시간을 연장합니다 (그림 3).

Agilent Masshunter Acquisition 소프트웨어를 사용하여 dMRM 분석법을 준비했으며, 여기서 각 관심 화합물에 대한 MRM 스캔이 해당 화합물의 알려진 머무름 시간과 대략적으로 일치했습니다. 머무름 시간을 표 A1에 나타내었습니다(부록 참조). 최대의 감응을 제공하기 위해 각 지질 분류에 대한 대표적인 표준물질로 충돌 에너지 및 MRM 전이를 최적화했습니다. AJS 소스 파라미터는 Agilent Source Optimizer 소프트웨어를 사용하여

표 6. MS 기기 파라미터.

파라미터	Agilent 6495C QQQ LC/MS
이온화원	Agilent Jet Stream
극성	양이온 및 음이온 전환
가스 온도	150°C
건조 가스(질소)	17L/분
Nebulizer 가스	20psi
Sheath 가스	200°C
Sheath 가스 유속	10L/분
캐필러리 전압	3,500V (+), -3,000V (-)
노즐 전압	1,000V (+), -1,500V (-)
iFunnel 고/저 압력 RF	200/110V (+), 150/60V (-)
스캔 유형	Dynamic MRM (dMRM)
Q1/Q2 분해능	단위질량(0.7amu)
델타 EMV	100V (+), 0V (-)
셀 가속 전압	4~5V
주기 시간	650ms
시간 필터 너비	0.07분
총 MRM 수	665(양: 646, 음: 19)

최적화되어 모든 분류에서 감도의 균형을 맞췄습니다. 전체 피크에 걸쳐 적절한 수의 포인트를 유지하여 정량의 신뢰성을 높이기 위해 650ms의 주기 시간을 선택했습니다. 이 연구에서는 665개의 전이를 이용해 763개의 인간 지질 종과 이성질체를

모니터링했습니다. 665개의 전이에서 가장 밀집된 섹션에는 평균 체류 시간(dwell time)이 5ms 미만인 115개의 전이가 있습니다. 6495C LC/TQ는 이러한 짧은 체류 시간에도 화합물 전반에 걸쳐 뛰어난 정밀성을 유지할 수 있었습니다(결과 및 토의 참조).

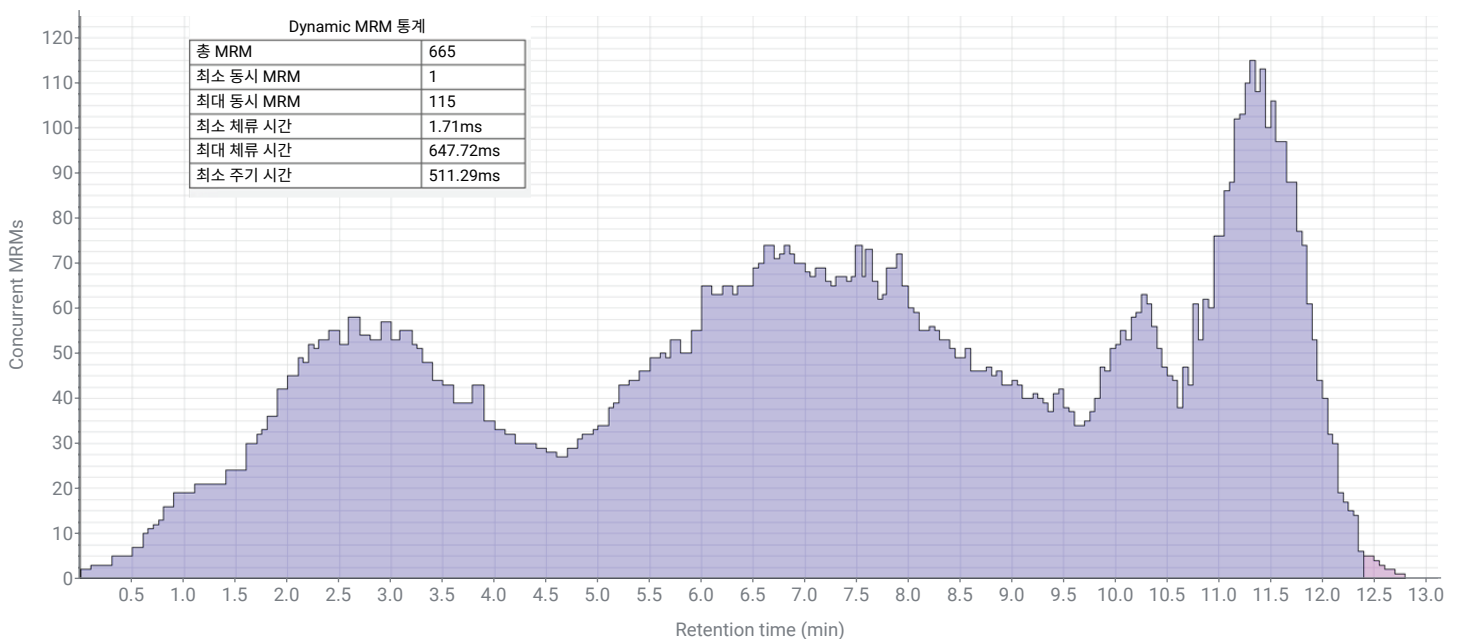


그림 3. 동시 MRM vs. 머무름 시간. 각 머무름 시간에 동시 MRM을 보여주는 dMRM 요약 플롯과 체류 시간 및 동시 MRM 세부 정보를 보여주는 dMRM 통계입니다.

지질 명명법 및 혈장 내 구조 해석

이 문서 전체에서 사용되는 지질 명명 규칙은 Lipid Maps Consortium에서 수립한 지침과 이후 Liebisch 등이 발표한 약식 표기법을 따릅니다.⁵⁻⁷ 인지질은 일반적으로 두 개의 지방산 사슬을 포함하며 자세한 특성 규명이 없는 경우 탄소 원자와 이중 결합의 총 조성물로 표현됩니다(즉, PC(38:4)).

그러나 acyl 사슬 조성이 결정된 위치에서는 명명 규칙이 이를 나타냅니다(즉, PC(38:4)가 PC(18:0_20:4)로 변경됨). 이것은 또한 다른 지질 분류 및 하위 분류까지 확장됩니다. 글리세롤 백본에서 지방산의 위치가 알려진 경우에는 sn-1 위치에 18:0이 있고 sn-2 위치에 20:4가 있는 PC(18:0/20:4)가 됩니다. 크로마토그래피로 분리되는 되었지만 불완전하게 특징지어지지 않은 종들은 (a) 또는 (b)로 표시했습니다(예: PC(P-17:0/20:4)(a) 및 PC(P-17:0/20:4)(b), 여기서 (a)와 (b)는 용출 순서를 나타냄).

이 분석법에 대한 질량, 조각화 및 크로마토그래피를 기반으로 한 지질 종의 구조적 주석(structural annotation)은 이전에 보고되었습니다.¹ 일반적으로 단일, 경우에 따라 다중 MRM 전이까지도 주어진 지질 중, 특히 glycerophospholipid에 대한 충분한 구조적 정보를 제공하지 않는 경우가 많습니다. 이를 처리하기 위한 여러 접근 방식이 있으며 각각의 한계를 가지고 있습니다. 이 분석법은 오프라인 실험을 활용하여 특정 머무름 시간에서 지질 구조를 추가적으로 식별하며, 코호트 연구의 각 개별 시료가 아닌 대표적인 풀링된 혈장 시료로 수행됩니다. 이러한 실험에 대한 자세한 정보는 참고문헌 1에 보고되어 있으며 다음과 같은 몇 가지 예가 제공됩니다.

인지질 특성 규명: 전이 786.6 및 184.1에 의해 측정된 PC(36:2)는 머무름 시간에 따라 PC(36:2) (a) 및 (b)로 표시된 두 개의 피크로 용출됩니다. 포름산염 첨가이온으로 음성 모드 또는 나트륨 첨가이온으로 양성 모드를 모니터링하여 PC 분류에 대한 직교 전이를 사용하는 추가 실험으로부터 지방산에 특이적인 생성이온을 얻습니다. 여기서 (a) 피크는 주로 PC(18:1/18:1)인 반면, 두 번째로 큰 (b) 피크는 PC(18:0_18:2)입니다. 이는 모든 glycerophospholipid 및 sphingomyelin 종에 대해 수행할 수 있습니다.

합성 표준물질: 여러 지질 이성질체는 이중 결합의 위치에 따라 구분됩니다(예: 22:5 지방산을 포함하는 인지질은 혈장에 omega-3 또는 omega-6 동형체로 존재함). 다양한 조각화 조건을 사용하여 이들을 식별하는 데 많은 접근 방식을 이용할 수 있지만, 본 연구에서는 크로마토그래피를 이용해 식별되는 두 개의 동형체로 표준물질을 합성하기로 결정했습니다. 이와 유사하게, heptadecanoic acid와 이성질체 관계인 monomethyl-branched 지질(즉, methylhexadecanoic acid)은 CID 대신 EID와 같은 기술을 사용하거나 용리 시간을 기반으로 식별할 수 있습니다. 표준물질의 합성은 혈장 시료와 함께 분석할 때 분지형 및 직선형 acyl 사슬 동형체 사이의 머무름 시간 차이를 특성화하는 데 도움을 줍니다.

Plasmalogen: PC(O) 및 PC(P) 종은 이성질체이므로, plasmalogen 종을 신속하게 확인하는 간단한 분석법은 vinyl-ether 결합(plasmalogen)을 가진 종을 선택적으로 가수분해하는 HCl 증기로 지질 추출물을 처리하는 것입니다. 한 개는 가수분해가 된 두 개의 연속 시료를 분석하면 이러한 종의 정체가 확인됩니다.

동위원소 오버레이: 탄소는 약 1.1%의 자연 존재비로 ¹³C 형태로 존재하기 때문에 관찰된 크로마토그래피 피크의 많은 부분은 동위원소 종에서 발생할 수 있습니다(즉, 일반적으로 머무름 시간은 다르지만 PC(36:2)의 +2 동위원소는 PC(36:1) 전이에서 관찰될 수 있음). 이는 phosphatidylcholine 및 sphingomyelin 종에서 특히 문제가 되는데, 그 이유는 이러한 종의 동적 범위가 넓기 때문입니다. 위의 예에서 788.6 및 184.1과 788.6 및 185.1의 전이를 중첩시켜 이러한 종을 쉽게 식별하고 제외시킬 수 있습니다. 동위원소 질량 증가는 전구 이온이 동위원소인 경우에 생성 이온에서만 가능합니다. 그러면 두 전이(동위원소)에 존재하는 LC 피크를 제외시킬 수 있습니다.

이와 함께 이러한 접근 방식은 이 분석법에서 구조 주석 및 식별의 기초를 형성합니다. 이러한 실험은 풀링된 혈장 시료로 수행되었습니다(그러나 NIST1950 혈장과 같은 보다 일반적인 기준 혈장도 적합함). 이러한 주석은 혈장 시료를 분석할 때 사용됩니다. 새로운 매트릭스가 사용되는 경우(예: 뇌 조직)에는 다른 이성질체 조성, 상대적 존재비 및 혈장에서 볼 수 없는 새로운 종/분류로 인해 이 프로세스를 반복해야 합니다. 또한 여기에 제시된 분석법은 혈장에 중점을 둡니다. 다른 조직(예: 뇌)에 특정한 프로파일의 추가적인 개발은 이러한 연구를 더욱 진전시킬 것으로 생각됩니다.

시료 처리 및 시스템 구성에 대한 고려 사항

최종 구성 및 프로세스는 사용자에게 따라 달라지지만 다음과 같은 사항을 고려하여 보다 확실한 플랫폼을 구축할 수 있습니다.

자동 시료 주입기의 시료 냉동/해동 및 온도: 다른 온도에서의 지질 용해도는 적절하게 제어되지 않을 경우 분석 변동성을 높일 수 있습니다. 지질 추출로 인해 혈장 지질이 부탄올:메탄올:물(1:1:0.2) 혼합물로 1:10 희석됩니다. -80°C에 보관된 시료를 해동할 때, 시료를 실온에서 1시간 이상 해동하고, 15분 동안 수조에서 초음파 처리 후 볼텍싱한 다음, 주입 전에 2시간 동안 실온에서 그대로 두었습니다. 그러면 주입 전에 지질이 평형에 도달하게 됩니다. 부적절하게 해동하면 특히 극성이 낮은 화합물(triglyceride 및 cholesteryl ester)의 경우에 시간이 지남에 따라 지질 농도가 변할 수 있습니다.

밸브 전환: 감도 손실 없이 대량의 시료를 분석하기 위한 중요한 측면 중 하나는 잔류 및 극성 화합물을 포함한 분석의 처음 0.8분을 질량 분석기가 아닌 폐기물 라인으로 전환하는 것입니다. 이는 LC 구성의 컬럼 부피에 따라 다르며 필요에 따라 조정해야 합니다.

인라인 프리트: 컬럼 수명을 유지하고 막힘을 방지하기 위해 0.3µm 프리트(부품 번호 5067-6189)이 장착된 인라인 필터를 사용하여 시스템에 침전물이 축적되는 것을 방지할 수 있습니다.

단일/이중 컬럼 구성: 일반적으로 양이 적은 시료의 경우 단일 컬럼으로 충분하고 시료당 약 16분의 분석 시간이 소요됩니다. 그러나 처리량을 높여야 하는 경우, 이중 컬럼 구성을 통해 두 번째 컬럼에서 시료를 분석하는 동안 다른 컬럼이 다시 평형에 도달할 수 있으므로 시료당 분석 시간이 13분으로 줄어듭니다. 이중 컬럼 구성도를 그림 2에 나타내고, 두 컬럼에 대한 크로마토그래피 조건을 표 4에 나타냈습니다.

피크 적분 및 데이터 처리

여기에 설명된 실험에 사용된 데이터 처리 프로토콜을 간략하게 소개합니다. 이 분석법에 대한 자세한 단계별 설명을 보려면 애질런트에 지원 문서를 요청하세요.

우선 크로마토그래피 데이터를 Agilent MassHunter Quantitative Analysis (QQQ용) 10.0 이상 버전으로 가져온 다음, 처리할 각 시료를 포함하는 새 Batch File을 생성합니다. 그러면 **New method from acquired MRM data** 기능을 사용해 모든 관련 MRM 전이를 포함하는 분석법 파일이 생성되고 ISTD로 플래그가 지정된 각 전이에 대한 농도가 입력됩니다(표 4).

기본적으로, 피크 선택은 Agile2 적분기에 의해 수행되지만 적분 창 내에 여러 피크가 있는 경우 사용자가 직접 적분 범위를 선택할 수 있는 Spectrum Summation이 사용되었습니다. 웹사이트(<https://metabolomics.baker.edu.au/method/lipids>)에서 모든 지질 종에 대해 주석이 달린 크로마토그램을 찾을 수 있으며, 이성질체/동중원소가 서로 가깝게 용리되는 경우 적분할 적절한 피크를 결정하기 위한 가이드라인으로 삼을 수 있습니다. 이 주석의 예가 그림 4에 나와 있습니다. 단일 MRM 전이에 적분할 여러 피크가 있는 경우, 개별 적분을 위해 분석법 편집기에서 전이를 복제하고 이름을 바꿀 수 있습니다.

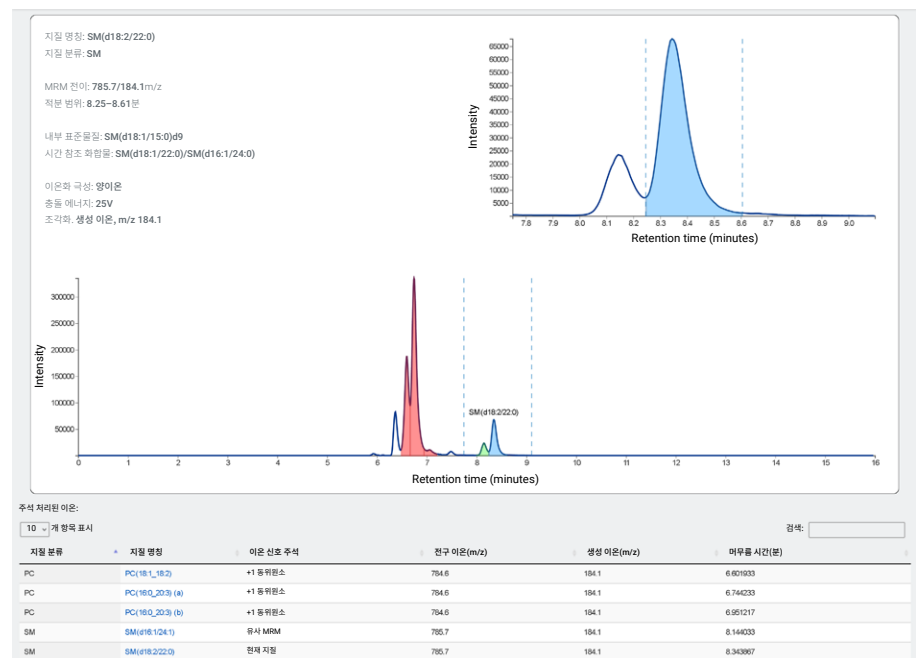


그림 4. 인간 혈장에서 적분할 적절한 피크의 내부 라이브러리에 대한 검색 서비스를 제공하는 웹사이트의 예.

Method File을 Batch File에 적용한 후, **Compounds-at-a-Glance** 기능을 사용하여 선택한 시료를 시각적으로 검사하고 올바른 적분 범위가 선택되었는지 확인할 수 있습니다. 컬럼 성능이나 용매 차이로 인해 머무름 시간이 바뀔 수 있는 대규모 배치의 경우, 적분 범위가 고정되어 있으므로 Spectrum Summation에 오류가 발생합니다. 이 문제의 예로 그림 5를

참조하세요. 이 문제는 지정된 기준 피크에 따라 Spectrum Summation이 각 MRM에 대해 정의된 적분 범위를 자동으로 이동하는 Time Referencing 기능을 사용해 극복할 수 있습니다(그림 5). Time Referencing 사용에 대한 자세한 지침과 대규모 코호트를 위한 배치 정렬 가이드를 보려면 애질런트에 지원 문서를 요청하세요.

MassHunter Quantitative Analysis 내에서 농도를 계산하기 위해(Time Referencing을 사용하지 않는 시료 세트에서) 각 전이에 대해 ISTD 화합물이 정의됩니다(표 A2). 분석법이 적용되고 배치 파일이 분석되면 최종 농도 값이 모든 시료에 대해 자동으로 생성됩니다.

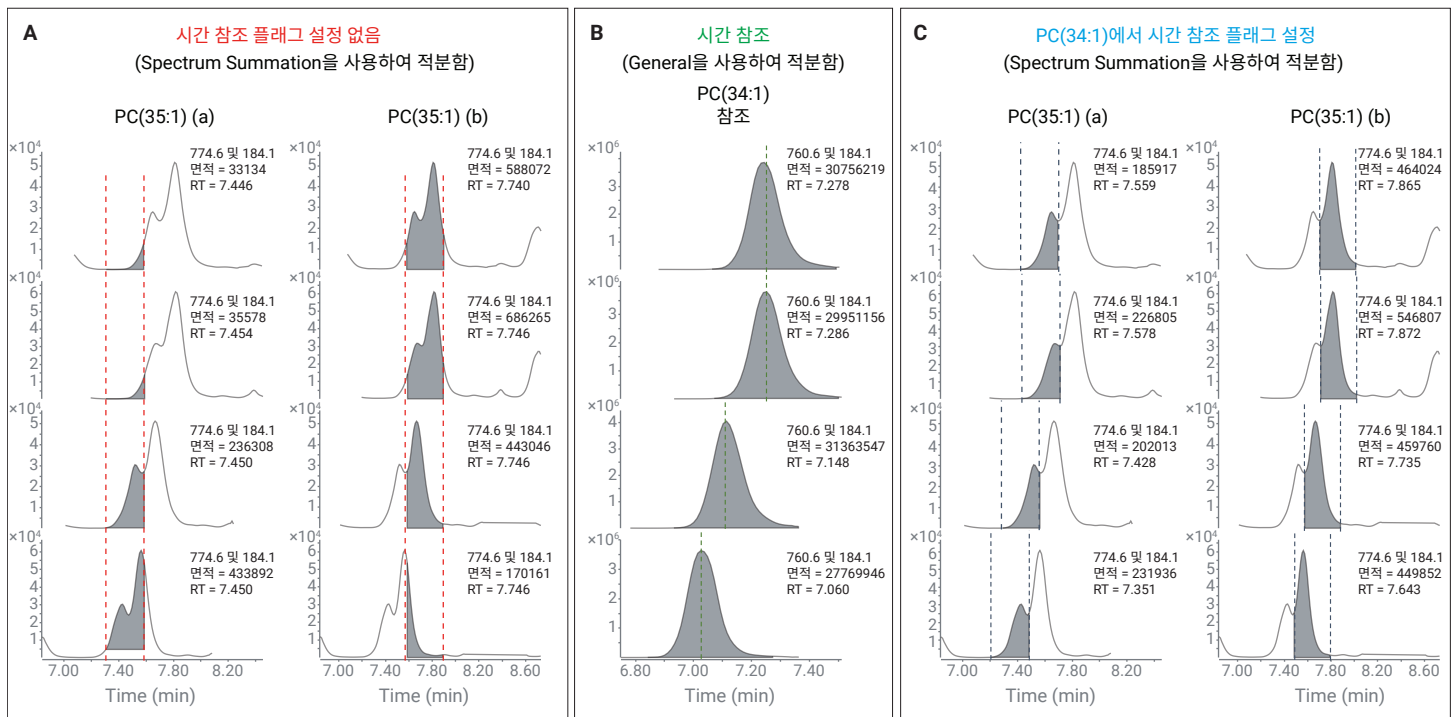


그림 5. 적분하기 어려운 피크를 정렬하기 위한 시간 참조 화합물의 이용. (A) PC(35:1)의 두 이성질체가 별도로 적분되지만 머무름 시간 편이로 인해 Spectrum Summation을 사용한 적분이 제대로 이루어지지 않습니다. (B) PC(34:1)는 피크가 풍부하고 깨끗하며 대칭적이어서 좋은 참조 화합물입니다. (C) 시간 참조를 활성화하고 PC(34:1)를 머무름 시간 편이를 보정하기 위한 참조 화합물로 사용한 PC(35:1) 적분입니다.

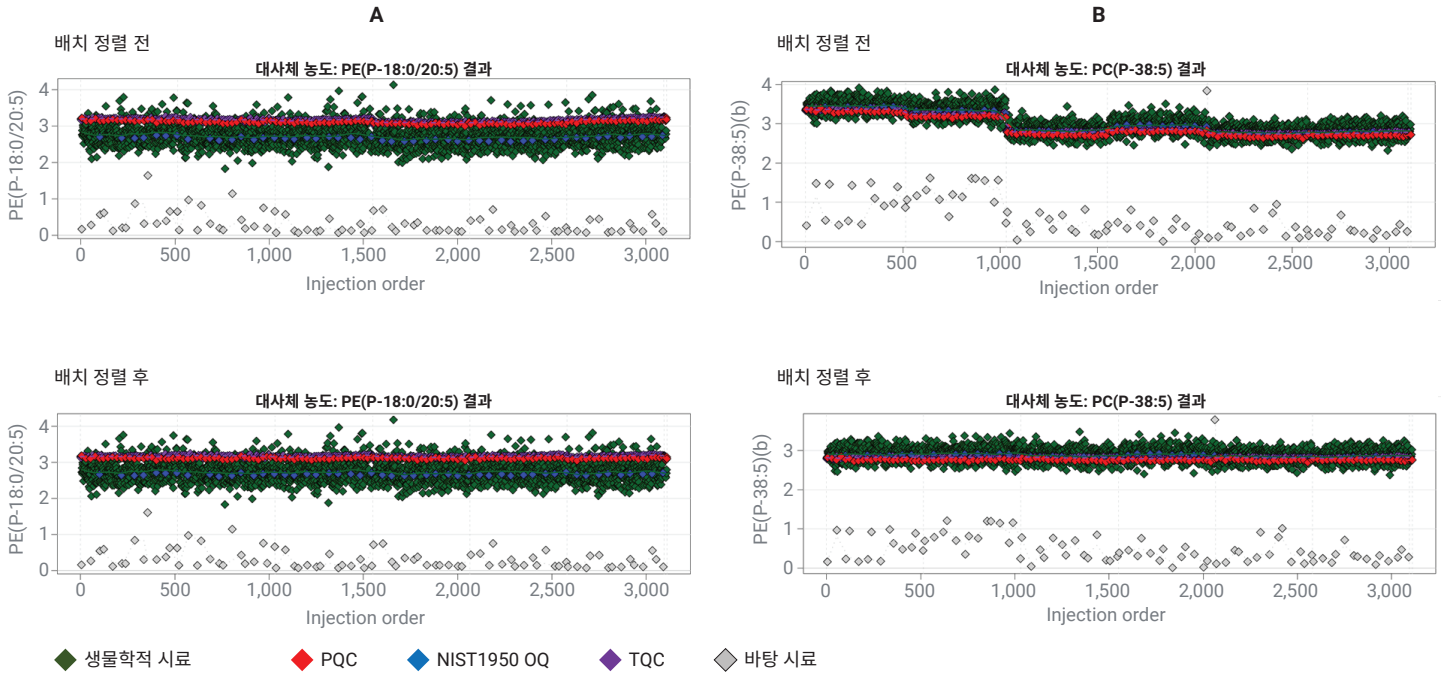


그림 6. 여러 배치에서 PQC 샘플을 사용하여 수행된 배치 정렬의 예. (A) 정렬 후 변동성의 증가나 변경 없이 배치 간의 변동성을 매우 적게 유지하는 지질의 예. (B) 서로 다른 배치에 걸쳐 상당한 변동성을 가지고 있고 정렬 후 개선이 이루어진 지질의 예. 모든 패널은 총 2,500개의 생물학적 시료(X축)와 log2 스케일(Y축)에 지질 존재비가 있는 6개의 배치를 보여줍니다.

결과 및 토의

분석법의 재현성을 측정하기 위해 50개의 TQC를 순차적으로 주입하고(크로마토그램의 예는 그림 7 참조) 피크 면적과 지질 농도 모두의 %CV를 계산했습니다. 원시 피크 면적에 대한 평균 및 중앙값 %CV는 763개 개별 중에서 각각 5.1% 및 4.1%였습니다. 각 지질 농도를 계산할 때 평균 및 중앙값 %CV는 각각 5.6% 및 4.0%였습니다. 각 개별 지질 중에 대한 개별 %CV를 표 A2에 나열했습니다. 추출 및 LC 분석 중에 도입된 용매 및 가소제로 인해 종종 유발되는 백그라운드를 이러한 지질에 대해 고려해야 합니다. 표 A2는 NIST1950 QC 시료에 존재하는 신호의 백분율로 각 지질 종의 백그라운드 수준을 보여줍니다. 28개 종만 20.0% 이상의 백그라운드를 나타내고 585개 종에 대한 백그라운드는 1.0% 미만입니다. 포화 지방산 사슬과 일부 매우 낮은 존재비의 지질 종을 가진 유리 지방산과 diacylglycerol에 특별한 주의를 기울여야 합니다.

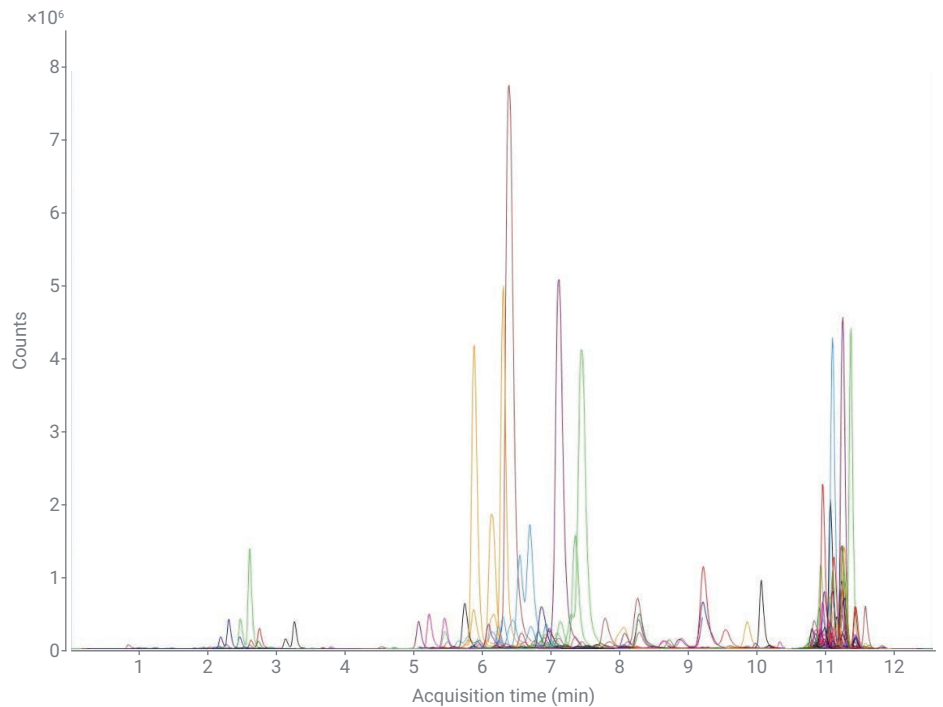


그림 7. 이 분석법으로 측정한 지질의 MRM 크로마토그램 오버레이.

이 분석법의 완전성은 2,500개의 혈장 시료 코호트를 실행하여 추가적으로 입증되었습니다. 이 실행은 각각 417개의 시료, 9개의 NIST1950 QC, 23개의 PQC, 14개의 바탕시료 및 25개의 TQC를 포함하는 6개 배치에 걸쳐 수행되었습니다. 대표적인 단일 배치 및 정렬된 모든 배치에서 지질 농도의 %CV를 표 7에 요약했습니다. 각 품질 관리 시료에 대한 히스토그램 CV% 플롯을 그림 8에 나타내고 CV 임계값 내에 속하는 지질의 수를 강조 표시했습니다. 약 600개의 지질은 품질 관리 시료에서 CV가 10% 미만이었습니다. 그런 다음 품질 관리 시료와 상대적인 지질의 생물학적 변화를 강조하기 위해 모든 QC 및 시료 (그림 9)에 대해 주성분 분석을 수행했습니다.

이 응용 자료는 혈장 시료 또는 이에 상응하는 물질 내에서 750개 이상의 다양한 지질 종을 측정하기 위한 강력하고 고도로 선별된 LC/MS/MS 기반 프로토콜에 대해 상세히 서술하고 있습니다. 짧은 분석 시간, 높은 데이터 재현성, 여러 배치 또는 여러 실험실 사이에서도 데이터를 정렬할 수 있다는 사실을 통해 대규모 지질학 데이터 세트를 결합할 수 있습니다. 이러한 데이터는 지질 종과 질병 결과 사이의 연관성을 정의하여 질병의 원인을 보다 잘 이해하려고 할 때 중요합니다.

표 7. 개별 배치 내에서뿐만 아니라 여러 배치에서 각 QC 유형의 %CV.

	NIST 1950 QC		PQC		TQC	
	평균	중앙값	평균	중앙값	평균	중앙값
단일 배치 (417 시료)	9.7	7.7	7.9	6.6	7.0	5.6
모든 배치 (2,500 시료)	9.7	7.7	8.9	7.4	8.6	7.0

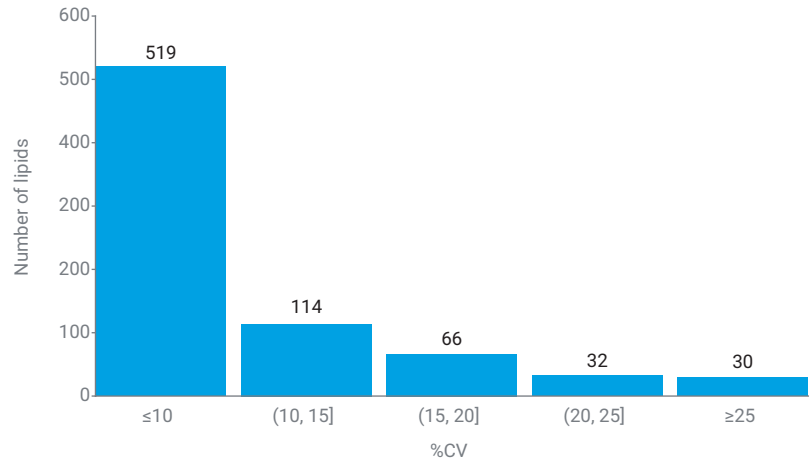


그림 8. 단일 배치에 대해 측정된 다양한 QC 시료의 지질 변동 계수 히스토그램.

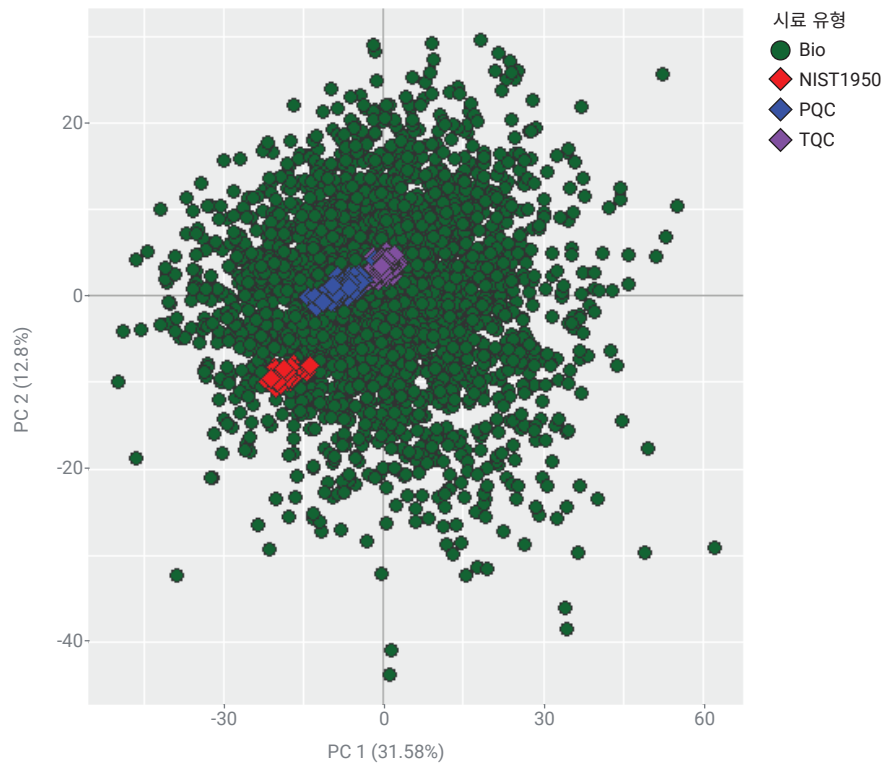


그림 9. 2,500개의 생물학적 시료 배치 및 모든 관련 QC 시료에서 얻은 지질 결과의 PCA.

이 분석법의 한 가지 한계는 일부 이성질체 종이 불완전하게 분리된다는 것인데, 런타임 제약 조건 때문에 어쩔 수 없이 생기는 결과입니다. 그러나 이러한 한계는 직교 실험, 다양한 첨가이온 또는 이온화 모드의 사용 또는 크로마토그래피 실행 확장을 통해 해결할 수 있습니다. 그 대신 사용자는 분석 시간과 특이성을 절충해야 합니다.

정량적 지질체학 데이터 수집에서 LC/MS/MS의 효과성은 이 분야에서 논쟁의 여지가 있는 주제로 남아 있습니다. 실제로 여러 요인, 특히 매트릭스 효과, 차등적인 억제 및 다양한 지질 종의 다양한 이온화 효율과 같은 요인들이 데이터의 정량적 정확성에 영향을 미칩니다. 절대적인 정량을 위해서는 표준물질과 관심 분석물질 간의 동위원소 분포 차이도 보정해야 합니다. 이러한 이유로 이 분석법을 상대적 정량이라고 하며, 이 경우에는 획득한 값으로 시료를 서로 비교할 수 있지만 반드시 시료의 절대 농도라고 할 수는 없습니다. 대부분의 경우 연구의 목표는 연관성을 식별하거나 (즉, 연령에 따라 변하는 지질 대사 산물) 그룹 간의 차이를 규명(건강한 사람과 당뇨병 환자)하는 것이므로 상대적 정량으로도 이 목표는 충족이 됩니다. 즉, 이러한 유형의 분석에서는 절대 정량으로 얻을 수 있는 추가적인 이점이 없습니다. 연구들 간에 정렬이 필요한 경우(절대 정량의 이점이 있음) NIST SRM 1950과 같이 여기에 설명된 참조 물질을 사용하여 정렬하면 이 문제를 극복할 수 있습니다.

이 프로토콜은 광범위한 지질 대사체들을 포함하고 있으며 각 화합물에 대해 내부 표준물질을 제공하는 것은 불가능합니다. 따라서 대부분의 지질 분류에 대해 하나의 내부 표준물질이 사용되었습니다. 이러한 제한에도 불구하고 이 분석법은 각 지질 화합물의 상대적 정량과 관련하여 우수한

재현성과 정밀성을 달성했습니다. 실제로, 대부분의 연구에서 목표는 시료 간에 지질 농도의 상대적 차이를 측정하거나 지질 종과 모집단 연구의 참가자 특성 또는 임상 결과 간의 연관성을 확인하는 것입니다. 이러한 경우 지질 종의 절대 정량은 서로 다른 플랫폼 간에 결과를 정렬하는 것 외에 별다른 이점이 없습니다.

연구 또는 실험실 간에 데이터 정렬이 필요한 경우 애질런트는 일반적으로 모든 실험에 포함되는 NIST SRM 1950 혈장 QC 시료를 사용합니다. 이 시료는 여러 공급업체로부터 쉽게 얻을 수 있으며 측정된 모든 지질에 대한 공통된 기준점을 마련해줄 수 있습니다. 따라서 지질 측정이 기기의 선형 측정 범위 내에 있는 한 NIST QC 시료를 사용하여 표준화와 정렬 목적을 달성할 수 있습니다.

이 프로토콜은 다른 생물학적 시료에 맞게 쉽게 조정할 수 있습니다. 그러나 조직 지질체 간의 잠재적인 차이를 감안할 때 위에서 설명한 접근 방식에 따라 새로운 조직 유형에 대해 조직 특이적인 주석 지정을 수행하는 것이 좋습니다. 조직별 주석이 없는 경우 다른 매트릭스를 검사할 때 주석을 합산 조성 수준(예: PC(36:2) (a) 및 (b))으로 되돌리는 것이 좋습니다. 조직 특이적 주석은 미토콘드리아에서만 발견되고 혈장이나 규정된 분석법에는 존재하지 않는 지질인 Cardiolipin과 같은 조직 특이적 지질을 통합할 수 있습니다. 특히 높은 처리량이 필요하지 않은 소규모 연구의 경우 크로마토그래피를 추가로 조정할 수도 있습니다. 더 길고 낮은 그레디언트로 지질 분리(이성질체 및 동중원소 종 포함)를 더욱 개선하여 잠재적으로 더 많은 지질 이성질체를 분리하고 동시 용리 종으로부터 신호 억제를 줄이며 전이별 체류 시간을 추가로 개선할 수 있기 때문입니다.

참고 문헌

1. Huynh, K. *et al.* High-Throughput Plasma Lipidomics: Detailed Mapping of the Associations with Cardiometabolic Risk Factors. *Cell Chem. Biol.* **2019**, 26(1), 71–84.e4.
2. Beyene, H. B. *et al.* High-Coverage Plasma Lipidomics Reveals Novel Sex-Specific Lipidomic Fingerprints of Age and BMI: Evidence from Two Large Population Cohort Studies. *PLoS Biol.* **2020**, 18(9), e3000870.
3. Alshehry, Z. H. *et al.* An Efficient Single Phase Method for the Extraction of Plasma Lipids. *Metabolites* **2015**, 5(2), 389–403.
4. Muniandy, M. *et al.* A Semi-Automated Lipid Extraction Protocol Using the Agilent Bravo Automated Liquid Handling Platform. *Agilent Technologies application note*, publication number 5991-5724EN, **2015**.
5. Liebisch, G. *et al.* Shorthand Notation for Lipid Structures Derived from Mass Spectrometry. *J. Lipid Res.* **2013**, 54(6), 1523–1530.
6. Fahy, E. *et al.* A Comprehensive Classification System for Lipids. *J. Lipid Res.* **2005**, 46(5), 839-861.
7. Fahy, E. *et al.* Update of the LIPID MAPS Comprehensive Classification System for Lipids. *J. Lipid Res.* **2009**, 50, S9–14.

부록

표 A1. 모든 dMRM 전이에 대한 Agilent MassHunter Acquisition 세부 정보.¹

화합물 번호	화합물 그룹	화합물 명칭	ISTD?	전구 이온	MS1 Res	생성 이온	MS2 Res	머무름 시간(분)	Delta RT	Frag.	충돌 에너지	셀 가속기 전압	극성
1	AcylCarn	AC(10:0)	FALSE	316.3	Unit	85.1	Unit	0.9	0.6	166	30	5	Positive
2	AcylCarn	AC(12:0)	FALSE	344.3	Unit	85.1	Unit	1.2	0.6	166	30	5	Positive
3	AcylCarn	AC(12:1)	FALSE	342.3	Unit	85.1	Unit	1.0	0.6	166	30	5	Positive
4	AcylCarn	AC(13:0)	FALSE	358.3	Unit	85.1	Unit	1.4	0.6	166	30	5	Positive
5	AcylCarn	AC(14:0)	FALSE	372.3	Unit	85.1	Unit	1.8	0.6	166	30	5	Positive
6	AcylCarn	AC(14:0)-OH	FALSE	388.3	Unit	85.1	Unit	1.4	0.6	166	30	5	Positive
7	AcylCarn	AC(14:1)	FALSE	370.3	Unit	85.1	Unit	1.5	0.6	166	30	5	Positive
8	AcylCarn	AC(14:1)-OH	FALSE	386.3	Unit	85.1	Unit	1.1	0.6	166	30	5	Positive
9	AcylCarn	AC(14:2)	FALSE	368.3	Unit	85.1	Unit	1.2	0.6	166	30	5	Positive
10	AcylCarn	AC(15:0) (a\b)	FALSE	386.3	Unit	85.1	Unit	2.1	1	166	30	5	Positive
11	AcylCarn	AC(16:0)	FALSE	400.4	Unit	85.1	Unit	2.5	0.6	166	30	5	Positive
12	AcylCarn	AC(16:0)-OH	FALSE	416.4	Unit	85.1	Unit	2.0	0.6	166	30	5	Positive
13	AcylCarn	Acylcarnitine 16:0 d3 (IS)	TRUE	403.4	Unit	85.1	Unit	2.5	0.6	166	30	5	Positive
14	AcylCarn	AC(16:1)	FALSE	398.3	Unit	85.1	Unit	2.0	0.6	166	30	5	Positive
15	AcylCarn	AC(16:1)-OH	FALSE	414.3	Unit	85.1	Unit	1.6	0.6	166	30	5	Positive
16	AcylCarn	AC(17:0) (a\b)	FALSE	414.4	Unit	85.1	Unit	2.8	0.6	166	30	5	Positive
17	AcylCarn	AC(18:0)	FALSE	428.4	Unit	85.1	Unit	3.2	0.6	166	30	5	Positive
18	AcylCarn	AC(18:0)-OH	FALSE	444.4	Unit	85.1	Unit	2.7	0.6	166	30	5	Positive
19	AcylCarn	AC(18:1)	FALSE	426.4	Unit	85.1	Unit	2.7	0.6	166	30	5	Positive
20	AcylCarn	AC(18:1)-OH	FALSE	442.4	Unit	85.1	Unit	2.2	0.6	166	30	5	Positive
21	AcylCarn	AC(18:2)	FALSE	424.3	Unit	85.1	Unit	2.2	0.6	166	30	5	Positive
22	AcylCarn	AC(18:3)	FALSE	422.3	Unit	85.1	Unit	1.9	0.6	166	30	5	Positive
23	AcylCarn	AC(20:3) (a\b)	FALSE	450.3	Unit	85.1	Unit	2.5	0.6	166	30	5	Positive
24	AcylCarn	AC(20:3)-OH	FALSE	466.3	Unit	85.1	Unit	2.1	0.6	166	30	5	Positive
25	AcylCarn	AC(20:4)	FALSE	448.3	Unit	85.1	Unit	2.2	0.6	166	30	5	Positive
26	AcylCarn	AC(20:5)	FALSE	446.3	Unit	85.1	Unit	1.8	0.6	166	30	5	Positive
27	AcylCarn	AC(22:5)	FALSE	474.3	Unit	85.1	Unit	2.3	0.6	166	30	5	Positive
28	AcylCarn	AC(22:5)-OH	FALSE	490.3	Unit	85.1	Unit	2.0	0.6	166	30	5	Positive
29	AcylCarn	AC(22:6)	FALSE	472.3	Unit	85.1	Unit	2.2	0.6	166	30	5	Positive
30	AcylCarn	AC(24:0)	FALSE	512.3	Unit	85.1	Unit	5.0	0.6	166	30	5	Positive
31	AcylCarn	AC(24:1) (a\b)	FALSE	510.3	Unit	85.1	Unit	4.4	0.6	166	30	5	Positive
32	AcylCarn	AC(26:0)	FALSE	540.3	Unit	85.1	Unit	5.9	0.6	166	30	5	Positive
33	AcylCarn	AC(26:1)	FALSE	538.3	Unit	85.1	Unit	5.0	0.6	166	30	5	Positive
34	CE	CE(14:0)	FALSE	614.6	Unit	369.3	Unit	11.6	0.4	166	10	5	Positive
35	CE	CE(15:0)	FALSE	628.6	Unit	369.3	Unit	11.7	0.4	166	10	5	Positive
36	CE	CE(16:0)	FALSE	642.6	Unit	369.3	Unit	11.8	0.4	166	10	5	Positive
37	CE	CE(16:1)	FALSE	640.6	Unit	369.3	Unit	11.6	0.4	166	10	5	Positive
38	CE	CE(16:2)	FALSE	638.6	Unit	369.3	Unit	11.4	0.4	166	10	5	Positive
39	CE	CE(17:0)	FALSE	656.6	Unit	369.3	Unit	11.9	0.4	166	10	5	Positive
40	CE	CE(17:1)	FALSE	654.6	Unit	369.3	Unit	11.7	0.4	166	10	5	Positive
41	CE	CE(18:0)	FALSE	670.7	Unit	369.3	Unit	12.1	0.4	166	10	5	Positive
42	CE	CE 18:0-d6 (IS)	TRUE	676.7	Unit	375.3	Unit	12.0	0.4	166	10	5	Positive

화합물 번호	화합물 그룹	화합물 명칭	ISTD?	전구 이온	MS1 Res	생성 이온	MS2 Res	머무름 시간(분)	Delta RT	Frag.	충돌 에너지	셀 가속기 전압	극성
43	CE	CE(18:1)	FALSE	668.6	Unit	369.3	Unit	11.8	0.4	166	10	5	Positive
44	CE	CE(18:2)	FALSE	666.6	Unit	369.3	Unit	11.6	0.4	166	10	5	Positive
45	oxLipid	CE(18:2) [+OH]	FALSE	682.6	Unit	369.3	Unit	10.9	0.6	166	10	5	Positive
46	CE	CE(18:3)	FALSE	664.6	Unit	369.3	Unit	11.4	0.4	166	10	5	Positive
47	CE	CE(20:0)	FALSE	698.7	Unit	369.3	Unit	12.2	0.6	166	10	5	Positive
48	CE	CE(20:1)	FALSE	696.7	Unit	369.3	Unit	12.0	0.4	166	10	5	Positive
49	CE	CE(20:2)	FALSE	694.7	Unit	369.3	Unit	11.8	0.4	166	10	5	Positive
50	CE	CE(20:3)	FALSE	692.6	Unit	369.3	Unit	11.7	0.4	166	10	5	Positive
51	CE	CE(20:4)	FALSE	690.6	Unit	369.3	Unit	11.5	0.4	166	10	5	Positive
52	oxLipid	CE(20:4) [+OH]	FALSE	706.6	Unit	369.3	Unit	10.9	0.6	166	10	5	Positive
53	CE	CE(20:5)	FALSE	688.6	Unit	369.3	Unit	11.3	0.4	166	10	5	Positive
54	CE	CE(22:0)	FALSE	726.7	Unit	369.3	Unit	12.4	0.6	166	10	5	Positive
55	CE	CE(22:1)	FALSE	724.7	Unit	369.3	Unit	12.2	0.4	166	10	5	Positive
56	CE	CE(22:4)	FALSE	718.7	Unit	369.3	Unit	11.7	0.4	166	10	5	Positive
57	CE	CE(22:5)	FALSE	716.6	Unit	369.3	Unit	11.5	1	166	10	5	Positive
58	CE	CE(22:6)	FALSE	714.6	Unit	369.3	Unit	11.4	0.4	166	10	5	Positive
59	CE	CE(24:0)	FALSE	754.7	Unit	369.3	Unit	12.6	0.4	166	10	5	Positive
60	CE	CE(24:1)	FALSE	752.7	Unit	369.3	Unit	12.4	0.4	166	10	5	Positive
61	CE	CE(24:4)	FALSE	746.7	Unit	369.3	Unit	11.9	0.4	166	10	5	Positive
62	CE	CE(24:5)	FALSE	744.7	Unit	369.3	Unit	11.7	0.4	166	10	5	Positive
63	CE	CE(24:6)	FALSE	742.7	Unit	369.3	Unit	11.5	0.4	166	10	5	Positive
64	Cer1P	Cer1P(d18:1/16:0)	FALSE	618.424	Unit	264.3	Unit	5.5	0.6	166	29	4	Positive
65	Cer	Cer(d16:1/16:0)	FALSE	510.6	Unit	236.3	Unit	6.7	0.5	166	25	5	Positive
66	Cer	Cer(d16:1/18:0)	FALSE	538.6	Unit	236.3	Unit	7.8	0.5	166	25	5	Positive
67	Cer	Cer(d16:1/20:0)	FALSE	566.6	Unit	236.3	Unit	9.1	0.5	166	25	5	Positive
68	Cer	Cer(d16:1/22:0)	FALSE	594.6	Unit	236.3	Unit	10.1	0.5	166	25	5	Positive
69	Cer	Cer(d16:1/23:0)	FALSE	608.6	Unit	236.3	Unit	10.2	0.5	166	25	5	Positive
70	Cer	Cer(d16:1/24:0)	FALSE	622.6	Unit	236.3	Unit	10.3	0.5	166	25	5	Positive
71	Cer	Cer(d16:1/24:1)	FALSE	620.6	Unit	236.3	Unit	10.1	0.5	166	25	5	Positive
72	Cer	Cer(d17:1/16:0)	FALSE	524.6	Unit	250.3	Unit	7.2	0.5	166	25	5	Positive
73	Cer	Cer(d17:1/18:0)	FALSE	552.6	Unit	250.3	Unit	8.4	0.5	166	25	5	Positive
74	Cer	Cer(d17:1/20:0)	FALSE	580.6	Unit	250.3	Unit	9.7	0.5	166	25	5	Positive
75	Cer	Cer(d17:1/22:0)	FALSE	608.6	Unit	250.3	Unit	10.2	0.5	166	25	5	Positive
76	Cer	Cer(d17:1/23:0)	FALSE	622.6	Unit	250.3	Unit	10.3	0.5	166	25	5	Positive
77	Cer	Cer(d17:1/24:0)	FALSE	636.6	Unit	250.3	Unit	10.4	0.5	166	25	5	Positive
78	Cer	Cer(d17:1/24:1)	FALSE	634.6	Unit	250.3	Unit	10.2	0.5	166	25	5	Positive
79	Cer	Cer(d18:1/16:0)	FALSE	538.5	Unit	264.3	Unit	7.8	0.7	166	25	5	Positive
80	Cer	Cer(d18:1/18:0)	FALSE	566.6	Unit	264.3	Unit	9.0	0.7	166	25	5	Positive
81	Cer	Cer(d18:1/20:0)	FALSE	594.6	Unit	264.3	Unit	10.1	0.7	166	25	5	Positive
82	Cer	Cer(d18:1/21:0)	FALSE	608.6	Unit	264.3	Unit	10.2	0.7	166	25	5	Positive
83	Cer	Cer(d18:1/22:0)	FALSE	622.6	Unit	264.3	Unit	10.3	0.7	166	25	5	Positive
84	Cer	Cer(d18:1/23:0)	FALSE	636.6	Unit	264.3	Unit	10.4	0.7	166	25	5	Positive
85	Cer	Cer(d18:1/24:0)	FALSE	650.6	Unit	264.3	Unit	10.5	0.7	166	25	5	Positive
86	Cer	Cer(d18:1/24:1)	FALSE	648.6	Unit	264.3	Unit	10.3	0.7	166	25	5	Positive
87	Cer	Cer(d18:1/26:0)	FALSE	678.6	Unit	264.3	Unit	10.7	0.7	166	25	5	Positive
88	Cer	Cer(d18:1-d7/18:0) (IS)	TRUE	573.6	Unit	271.4	Unit	9.0	1	166	25	5	Positive

화합물 번호	화합물 그룹	화합물 명칭	ISTD?	전구 이온	MS1 Res	생성 이온	MS2 Res	머무름 시간(분)	Delta RT	Frag.	충돌 에너지	셀 가속기 전압	극성
89	Cer	Cer(d18:2/16:0)	FALSE	536.5	Unit	262.3	Unit	6.9	0.7	166	25	5	Positive
90	Cer	Cer(d18:2/18:0)	FALSE	564.6	Unit	262.3	Unit	8.1	0.7	166	25	5	Positive
91	Cer	Cer(d18:2/20:0)	FALSE	592.6	Unit	262.3	Unit	9.3	0.5	166	25	5	Positive
92	Cer	Cer(d18:2/22:0)	FALSE	620.6	Unit	262.3	Unit	10.1	0.5	166	25	5	Positive
93	Cer	Cer(d18:2/23:0)	FALSE	634.6	Unit	262.3	Unit	10.2	0.5	166	25	5	Positive
94	Cer	Cer(d18:2/24:0)	FALSE	648.6	Unit	262.3	Unit	10.4	0.5	166	25	5	Positive
95	Cer	Cer(d18:2/24:1)	FALSE	646.6	Unit	262.3	Unit	10.1	0.5	166	25	5	Positive
96	Cer	Cer(d18:2/26:0)	FALSE	676.6	Unit	262.3	Unit	10.5	0.5	166	25	5	Positive
97	Cer	Cer(d19:1/18:0)	FALSE	580.6	Unit	278.3	Unit	9.4	0.5	166	25	5	Positive
98	Cer	Cer(d19:1/20:0)	FALSE	608.6	Unit	278.3	Unit	10.1	0.5	166	25	5	Positive
99	Cer	Cer(d19:1/22:0)	FALSE	636.6	Unit	278.3	Unit	10.4	0.5	166	25	5	Positive
100	Cer	Cer(d19:1/23:0)	FALSE	650.6	Unit	278.3	Unit	10.5	0.5	166	25	5	Positive
101	Cer	Cer(d19:1/24:0)	FALSE	664.6	Unit	278.3	Unit	10.5	0.5	166	25	5	Positive
102	Cer	Cer(d19:1/24:1)	FALSE	662.6	Unit	278.3	Unit	10.4	0.5	166	25	5	Positive
103	Cer	Cer(d20:1/22:0)	FALSE	650.6	Unit	292.3	Unit	10.5	0.5	166	25	5	Positive
104	Cer	Cer(d20:1/23:0)	FALSE	664.6	Unit	292.3	Unit	10.6	0.5	166	25	5	Positive
105	Cer	Cer(d20:1/24:0)	FALSE	678.6	Unit	292.3	Unit	10.7	0.5	166	25	5	Positive
106	Cer	Cer(d20:1/24:1)	FALSE	676.6	Unit	292.3	Unit	10.5	0.5	166	25	5	Positive
107	m18:0	Cer(m18:0/20:0)	FALSE	580.6	Unit	268.4	Unit	10.3	0.6	166	35	5	Positive
108	m18:0	Cer(m18:0/22:0)	FALSE	608.6	Unit	268.4	Unit	10.5	0.6	166	35	5	Positive
109	m18:0	Cer(m18:0/23:0)	FALSE	622.6	Unit	268.4	Unit	10.6	0.6	166	35	5	Positive
110	m18:0	Cer(m18:0/24:0)	FALSE	636.6	Unit	268.4	Unit	10.7	0.6	166	35	5	Positive
111	m18:0	Cer(m18:0/24:1)	FALSE	634.6	Unit	268.4	Unit	10.5	0.6	166	35	5	Positive
112	m18:1	Cer(m18:1/18:0)	FALSE	550.6	Unit	266.4	Unit	9.3	0.6	166	35	5	Positive
113	m18:1	Cer(m18:1/20:0)	FALSE	578.6	Unit	266.4	Unit	10.1	0.6	166	35	5	Positive
114	m18:1	Cer(m18:1/22:0)	FALSE	606.6	Unit	266.4	Unit	10.3	0.6	166	35	5	Positive
115	m18:1	Cer(m18:1/23:0)	FALSE	620.6	Unit	266.4	Unit	10.4	0.6	166	35	5	Positive
116	m18:1	Cer(m18:1/24:0)	FALSE	634.6	Unit	266.4	Unit	10.5	0.6	166	35	5	Positive
117	m18:1	Cer(m18:1/24:1)	FALSE	632.6	Unit	266.4	Unit	10.4	0.6	166	35	5	Positive
118	Bile Acids	CA	FALSE	426.3	Unit	355.3	Unit	1.0	2	166	19	4	Positive
119	Bile Acids	Cholic Acid d4 (IS)	TRUE	430.3	Unit	359.3	Unit	1.0	1	166	19	4	Positive
120	COH	COH	FALSE	369.4	Unit	161.2	Unit	6.4	0.6	166	19	5	Positive
121	COH	COH-d7 (IS)	TRUE	376.4	Unit	161.2	Unit	6.4	0.6	166	19	5	Positive
122	DE	DE(16:0)	FALSE	640.6	Unit	367.4	Unit	11.6	0.6	166	10	4	Positive
123	DE	DE(18:1)	FALSE	666.6	Unit	367.4	Unit	11.6	0.6	166	10	4	Positive
124	DE	DE(18:1) ester d6 (IS)	TRUE	672.6	Unit	373.4	Unit	11.6	0.6	166	10	4	Positive
125	DE	DE(18:2)	FALSE	664.6	Unit	367.4	Unit	11.4	0.6	166	10	4	Positive
126	DE	DE(20:4)	FALSE	688.6	Unit	367.4	Unit	11.3	0.6	166	10	4	Positive
127	Bile Acids	dxCA	FALSE	410.3	Unit	357.3	Unit	1.6	2	166	15	5	Positive
128	DG	DG(15:0 18:1) d7 (IS)	TRUE	605.5	Unit	299.5	Unit	9.6	1	166	25	4	Positive
129	DG	DG(14:0_16:0)	FALSE	558.5	Unit	313.3	Unit	8.8	1.4	166	25	5	Positive
130	DG	DG(16:0_16:0)	FALSE	586.5	Unit	313.2	Unit	10.1	1.4	166	25	5	Positive
131	DG	DG(16:0_16:1)	FALSE	584.5	Unit	313.2	Unit	9.1	1.4	166	25	5	Positive
132	DG	DG(14:0_18:2)	FALSE	582.5	Unit	285.2	Unit	8.1	1.4	166	25	5	Positive
133	DG	DG(16:0_18:1)	FALSE	612.6	Unit	313.3	Unit	10.0	1.4	166	25	5	Positive
134	DG	DG(16:1_18:1)	FALSE	610.5	Unit	339.2	Unit	9.3	1.4	166	25	5	Positive

화합물 번호	화합물 그룹	화합물 명칭	ISTD?	전구 이온	MS1 Res	생성 이온	MS2 Res	머무름 시간(분)	Delta RT	Frag.	충돌 에너지	셀 가속기 전압	극성
135	DG	DG(16:0_18:2)	FALSE	610.5	Unit	313.2	Unit	9.4	1.4	166	25	5	Positive
136	DG	DG(18:0_18:1)	FALSE	640.6	Unit	341.3	Unit	10.2	1.4	166	25	5	Positive
137	DG	DG(18:1_18:1)	FALSE	638.6	Unit	339.3	Unit	10.1	1.4	166	25	5	Positive
138	DG	DG(18:0_18:2)	FALSE	638.6	Unit	341.3	Unit	10.1	1.4	166	25	5	Positive
139	DG	DG(18:1_18:2)	FALSE	636.6	Unit	339.3	Unit	9.6	1.4	166	25	5	Positive
140	DG	DG(18:2_18:2)	FALSE	634.5	Unit	337.2	Unit	8.7	1.4	166	25	5	Positive
141	DG	DG(18:1_18:3)	FALSE	634.5	Unit	339.2	Unit	8.8	1.4	166	25	5	Positive
142	DG	DG(16:0_20:4)	FALSE	634.5	Unit	313.2	Unit	9.2	1.4	166	25	5	Positive
143	DG	DG(18:1_20:3)	FALSE	662.6	Unit	339.3	Unit	10.0	1.4	166	25	5	Positive
144	DG	DG(18:0_20:4)	FALSE	662.6	Unit	341.3	Unit	10.1	1.4	166	25	5	Positive
145	DG	DG(18:1_20:4)	FALSE	660.6	Unit	339.3	Unit	9.4	1.4	166	25	5	Positive
146	DG	DG(16:0_22:5)	FALSE	660.6	Unit	313.3	Unit	9.3	1.4	166	25	5	Positive
147	DG	DG(18:2_20:4)	FALSE	658.5	Unit	337.2	Unit	8.5	1.4	166	25	5	Positive
148	DG	DG(16:0_22:6)	FALSE	658.5	Unit	313.2	Unit	8.9	1.4	166	25	5	Positive
149	DG	DG(18:1_20:5)	FALSE	658.6	Unit	339.3	Unit	8.6	1.4	166	25	5	Positive
150	DG	DG(18:1_22:5)	FALSE	686.6	Unit	339.3	Unit	9.8	1.6	166	25	5	Positive
151	DG	DG(18:1_22:6)	FALSE	684.6	Unit	339.3	Unit	9.1	1.4	166	25	5	Positive
152	DG	DG(18:2_22:6)	FALSE	682.6	Unit	337.3	Unit	8.2	1.4	166	25	5	Positive
153	dhCer	dhCer(d18:0/16:0)	FALSE	540.5	Unit	284.3	Unit	8.3	0.6	166	27	4	Positive
154	dhCer	dhCer(d18:0/18:0)	FALSE	568.6	Unit	284.3	Unit	9.8	0.8	166	27	4	Positive
155	dhCer	dhCer(d18:0/20:0)	FALSE	596.6	Unit	284.3	Unit	10.2	0.8	166	27	4	Positive
156	dhCer	dhCer(d18:0/22:0)	FALSE	624.6	Unit	284.3	Unit	10.4	0.8	166	27	4	Positive
157	dhCer	dhCer(d18:0/24:0)	FALSE	652.7	Unit	284.3	Unit	10.6	0.8	166	27	4	Positive
158	dhCer	dhCer(d18:0/24:1)	FALSE	650.6	Unit	284.3	Unit	10.4	0.8	166	27	4	Positive
159	dhCer	dhCer 8:0 (IS)	TRUE	428.4	Unit	284.3	Unit	4.6	0.8	166	27	4	Positive
160	dimethyl-CE	dimethyl-CE(18:1)	FALSE	696.6	Unit	397.3	Unit	12.0	0.4	166	10	4	Positive
161	dimethyl-CE	dimethyl-CE(18:2)	FALSE	694.6	Unit	397.3	Unit	11.8	0.4	166	10	4	Positive
162	dimethyl-CE	dimethyl-CE(20:4)	FALSE	718.6	Unit	397.3	Unit	11.7	0.4	166	10	4	Positive
163	FFA	FA(14:0)	FALSE	227.2	Unit	227.2	Unit	3.1	2	166	0	4	Negative
164	FFA	FA(16:0)	FALSE	255.2	Unit	255.2	Unit	3.8	2	166	0	4	Negative
165	FFA	FA(16:1)	FALSE	253.2	Unit	253.2	Unit	3.3	2	166	0	4	Negative
166	FFA	FA(17:0)	FALSE	269.3	Unit	269.2	Unit	4.1	2	166	0	4	Negative
167	FFA	FA(17:1)	FALSE	267.2	Unit	267.2	Unit	3.6	2	166	0	4	Negative
168	FFA	FA(18:0)	FALSE	283.3	Unit	283.3	Unit	4.4	2	166	0	4	Negative
169	FFA	FA(18:1)	FALSE	281.3	Unit	281.2	Unit	3.9	2	166	0	4	Negative
170	FFA	FA(18:1) d9 (IS)	TRUE	290.3	Unit	290.2	Unit	3.9	2	166	0	4	Negative
171	FFA	FA(18:2)	FALSE	279.2	Unit	279.2	Unit	3.5	2	166	0	4	Negative
172	FFA	FA(18:3)	FALSE	277.2	Unit	277.2	Unit	3.1	2	166	0	4	Negative
173	FFA	FA(20:2)	FALSE	307.3	Unit	307.3	Unit	4.1	2	166	0	4	Negative
174	FFA	FA(20:3)	FALSE	305.3	Unit	305.2	Unit	3.8	2	166	0	4	Negative
175	FFA	FA(20:4)	FALSE	303.2	Unit	303.2	Unit	3.4	2	166	0	4	Negative
176	FFA	FA(20:4) d11 (IS)	TRUE	314.2	Unit	314.2	Unit	3.4	1	166	0	4	Negative
177	FFA	FA(20:5)	FALSE	301.2	Unit	301.2	Unit	3.0	2	166	0	4	Negative
178	FFA	FA(22:4)	FALSE	331.3	Unit	331.3	Unit	3.9	2	166	0	4	Negative
179	FFA	FA(22:5)	FALSE	329.3	Unit	329.2	Unit	3.6	2	166	0	4	Negative
180	FFA	FA(22:6) d5 (IS)	TRUE	332.2	Unit	332.2	Unit	3.2	1	166	0	4	Negative

화합물 번호	화합물 그룹	화합물 명칭	ISTD?	전구 이온	MS1 Res	생성 이온	MS2 Res	머무름 시간(분)	Delta RT	Frag.	충돌 에너지	셀 가속기 전압	극성
181	FFA	FA(22:6)	FALSE	327.2	Unit	327.2	Unit	3.3	2	166	0	4	Negative
182	GM3	GM3(d18:1/16:0)	FALSE	1153.7	Unit	264.3	Unit	4.9	1	166	61	5	Positive
183	GM3	GM3(d18:1/18:0)	FALSE	1181.8	Unit	264.3	Unit	5.6	1	166	61	5	Positive
184	GM3	GM3(d18:1/20:0)	FALSE	1209.8	Unit	264.3	Unit	6.5	1	166	61	5	Positive
185	GM3	GM3(d18:1/22:0)	FALSE	1237.8	Unit	264.3	Unit	7.5	1	166	61	5	Positive
186	GM3	GM3(d18:1/24:0)	FALSE	1265.8	Unit	264.3	Unit	8.5	1	166	61	5	Positive
187	GM3	GM3(d18:1/24:1)	FALSE	1263.8	Unit	264.3	Unit	7.5	1	166	61	5	Positive
188	HexCer	HexCer(d16:1/18:0)	FALSE	700.6	Unit	236.3	Unit	6.6	0.5	166	35	5	Positive
189	HexCer	HexCer(d16:1/20:0)	FALSE	728.6	Unit	236.3	Unit	7.7	0.5	166	35	5	Positive
190	HexCer	HexCer(d16:1/22:0)	FALSE	756.7	Unit	236.3	Unit	8.9	0.5	166	35	5	Positive
191	HexCer	HexCer(d16:1/24:0)	FALSE	784.7	Unit	236.3	Unit	10.0	0.5	166	35	5	Positive
192	HexCer	HexCer(d18:1/16:0)	FALSE	700.6	Unit	264.3	Unit	6.6	0.6	166	35	5	Positive
193	HexCer	HexCer(d18:1/18:0)	FALSE	728.6	Unit	264.3	Unit	7.6	0.6	166	35	5	Positive
194	HexCer	HexCer(d18:1/20:0)	FALSE	756.6	Unit	264.3	Unit	8.8	0.6	166	35	5	Positive
195	HexCer	HexCer(d18:1/22:0)	FALSE	784.7	Unit	264.3	Unit	10.0	0.6	166	35	5	Positive
196	HexCer	HexCer(d18:1/24:0)	FALSE	812.7	Unit	264.3	Unit	10.2	0.6	166	35	5	Positive
197	HexCer	HexCer(d18:1/24:1)	FALSE	810.7	Unit	264.3	Unit	10.0	0.6	166	35	5	Positive
198	HexCer	HexCer(d18:2/20:0)	FALSE	754.6	Unit	262.3	Unit	7.9	0.5	166	35	5	Positive
199	HexCer	HexCer(d18:2/22:0)	FALSE	782.7	Unit	262.3	Unit	9.0	0.5	166	35	5	Positive
200	HexCer	HexCer(d18:2/24:0)	FALSE	810.7	Unit	262.3	Unit	10.1	0.5	166	35	5	Positive
201	Hex2Cer	Hex2Cer(d16:1/16:0)	FALSE	834.6	Unit	236.3	Unit	5.2	0.5	166	49	5	Positive
202	Hex2Cer	Hex2Cer(d16:1/24:1)	FALSE	944.7	Unit	236.3	Unit	8.2	0.5	166	49	5	Positive
203	Hex2Cer	Hex2Cer(d18:1/15:0) d7 (IS)	TRUE	855.6	Unit	271.3	Unit	5.6	1	166	49	5	Positive
204	Hex2Cer	Hex2Cer(d18:1/16:0)	FALSE	862.6	Unit	264.3	Unit	6.1	0.6	166	49	5	Positive
205	Hex2Cer	Hex2Cer(d18:1/20:0)	FALSE	918.7	Unit	264.3	Unit	8.1	0.6	166	49	5	Positive
206	Hex2Cer	Hex2Cer(d18:1/22:0)	FALSE	946.7	Unit	264.3	Unit	9.3	0.6	166	49	5	Positive
207	Hex2Cer	Hex2Cer(d18:1/24:0)	FALSE	974.8	Unit	264.3	Unit	10.1	0.6	166	49	5	Positive
208	Hex2Cer	Hex2Cer(d18:1/24:1)	FALSE	972.7	Unit	264.3	Unit	9.3	0.6	166	49	5	Positive
209	Hex2Cer	Hex2Cer(d18:2/16:0)	FALSE	860.6	Unit	262.3	Unit	5.4	0.5	166	49	5	Positive
210	Hex2Cer	Hex2Cer(d18:2/24:1)	FALSE	970.7	Unit	262.3	Unit	8.4	0.5	166	49	5	Positive
211	Hex3Cer	Hex3Cer(d18:1/16:0)	FALSE	1024.7	Unit	264.3	Unit	5.7	0.5	166	61	5	Positive
212	Hex3Cer	Hex3Cer(d18:1/17:0) (IS)	TRUE	1038.7	Unit	264.3	Unit	6.2	0.5	166	61	5	Positive
213	Hex3Cer	Hex3Cer(d18:1/18:0)	FALSE	1052.7	Unit	264.3	Unit	6.6	0.5	166	61	5	Positive
214	Hex3Cer	Hex3Cer(d18:1/22:0)	FALSE	1108.8	Unit	264.3	Unit	8.8	0.5	166	61	5	Positive
215	Hex3Cer	Hex3Cer(d18:1/24:0)	FALSE	1136.8	Unit	264.3	Unit	10.0	0.7	166	61	5	Positive
216	Hex3Cer	Hex3Cer(d18:1/24:1)	FALSE	1134.8	Unit	264.3	Unit	8.8	0.5	166	61	5	Positive
217	Hex2Cer	HexCer(d18:1/15:0) d7 (IS)	TRUE	693.6	Unit	271.3	Unit	6.1	1	166	35	5	Positive
218	LPC	LPC(14:0) (a\b)	FALSE	468.3	Unit	184.1	Unit	1.9	1	166	21	5	Positive
219	LPC	LPC(15:0) (a\b)	FALSE	482.3	Unit	184.1	Unit	2.3	1	166	21	5	Positive
220	LPC	LPC(16:0) (a\b)	FALSE	496.3	Unit	184.1	Unit	2.6	1	166	21	5	Positive
221	LPC	LPC(16:1) (a\b)	FALSE	494.3	Unit	184.1	Unit	2.1	1	166	21	5	Positive
222	LPC	LPC(17:0) [sn1]	FALSE	510.4	Unit	184.1	Unit	2.9	1	166	21	5	Positive
223	LPC	LPC(17:1) (a\b\c)	FALSE	508.4	Unit	184.1	Unit	2.5	1	166	21	5	Positive
224	LPC	LPC(18:0) (a\b)	FALSE	524.4	Unit	184.1	Unit	3.3	1	166	21	5	Positive
225	LPC	LPC(18:1) (a\b)	FALSE	522.4	Unit	184.1	Unit	2.8	1	166	21	5	Positive
226	LPC	LPC(18:1) d7 (IS)	TRUE	529.4	Unit	184.1	Unit	2.8	1	166	21	5	Positive

화합물 번호	화합물 그룹	화합물 명칭	ISTD?	전구 이온	MS1 Res	생성 이온	MS2 Res	머무름 시간(분)	Delta RT	Frag.	충돌 에너지	셀 가속기 전압	극성
227	LPC	LPC(18:2) (a\b)	FALSE	520.3	Unit	184.1	Unit	2.3	1	166	21	5	Positive
228	oxLipid	LPC(18:2) [+OH]	FALSE	536.3	Unit	184.1	Unit	1.0	1	166	21	5	Positive
229	LPC	LPC(18:3) (a\b\c)	FALSE	518.3	Unit	184.1	Unit	2.0	1	166	21	5	Positive
230	LPC (104)	LPC 18:3(104)	FALSE	518.3	Unit	104.1	Unit	2.0	0.8	166	21	5	Positive
231	LPC	LPC(19:0) (a\b\c)	FALSE	538.4	Unit	184.1	Unit	3.5	1	166	21	5	Positive
232	LPC	LPC(19:1) (a\b\c)	FALSE	536.4	Unit	184.1	Unit	3.1	1	166	21	5	Positive
233	LPC	LPC(20:0) (a\b)	FALSE	552.4	Unit	184.1	Unit	3.8	1	166	21	5	Positive
234	LPC	LPC(20:1) (a\b)	FALSE	550.4	Unit	184.1	Unit	3.4	1	166	21	5	Positive
235	LPC	LPC(20:2) (a\b)	FALSE	548.4	Unit	184.1	Unit	2.9	1	166	21	5	Positive
236	LPC	LPC(20:3) (a\b)	FALSE	546.4	Unit	184.1	Unit	2.6	1	166	21	5	Positive
237	LPC (104)	LPC 20:3(104)	FALSE	546.4	Unit	104.1	Unit	2.6	1	166	21	5	Positive
238	LPC	LPC(20:4) (a\b)	FALSE	544.3	Unit	184.1	Unit	2.3	1	166	21	5	Positive
239	oxLipid	LPC(20:4) [+OH]	FALSE	560.3	Unit	184.1	Unit	1.4	1.5	166	21	5	Positive
240	LPC	LPC(20:5) (a\b)	FALSE	542.3	Unit	184.1	Unit	1.9	1	166	21	5	Positive
241	LPC	LPC(22:0) (a\b)	FALSE	580.4	Unit	184.1	Unit	4.4	1	166	21	5	Positive
242	LPC	LPC(22:1) (a\b)	FALSE	578.4	Unit	184.1	Unit	3.9	1	166	21	5	Positive
243	LPC	LPC(22:4) (a\b)	FALSE	572.4	Unit	184.1	Unit	2.8	1	166	21	5	Positive
244	LPC (104)	LPC 22:5(104)	FALSE	570.4	Unit	104.1	Unit	2.5	1.5	166	21	5	Positive
245	LPC	LPC(22:5) (a\b\c)	FALSE	570.4	Unit	184.1	Unit	2.5	1	166	21	5	Positive
246	LPC	LPC(22:6) (a\b)	FALSE	568.3	Unit	184.1	Unit	2.2	1	166	21	5	Positive
247	oxLipid	LPC(22:6) [+OH]	FALSE	584.3	Unit	184.1	Unit	1.5	1.5	166	21	5	Positive
248	LPC	LPC(24:0) (a\b)	FALSE	608.5	Unit	184.1	Unit	5.1	1	166	21	5	Positive
249	LPC	LPC(26:0) (a\b)	FALSE	636.5	Unit	184.1	Unit	5.9	1	166	21	5	Positive
250	LPCO	LPC(O-16:0)	FALSE	482.4	Unit	104.1	Unit	3.0	3	166	23	5	Positive
251	LPCO	LPC(O-18:0)	FALSE	510.4	Unit	104.1	Unit	3.6	3	166	23	5	Positive
252	LPCO	LPC(O-18:1)	FALSE	508.4	Unit	104.1	Unit	3.1	3	166	23	5	Positive
253	LPCO	LPC(O-20:0)	FALSE	538.4	Unit	104.1	Unit	4.1	3	166	23	5	Positive
254	LPCO	LPC(O-20:1)	FALSE	536.4	Unit	104.1	Unit	3.7	3	166	23	5	Positive
255	LPCO	LPC(O-22:0)	FALSE	566.5	Unit	104.1	Unit	4.8	2	166	23	5	Positive
256	LPCO	LPC(O-22:1)	FALSE	564.4	Unit	104.1	Unit	4.2	2	166	23	5	Positive
257	LPCO	LPC(O-24:0)	FALSE	594.5	Unit	104.1	Unit	5.6	1	166	23	5	Positive
258	LPCO	LPC(O-24:1)	FALSE	592.5	Unit	104.1	Unit	4.8	2	166	23	5	Positive
259	LPCO	LPC(O-24:2)	FALSE	590.5	Unit	104.1	Unit	4.3	2	166	23	5	Positive
260	LPCP	LPC(P-16:0)	FALSE	480.3	Unit	104.1	Unit	3.0	0.6	166	25	5	Positive
261	LPCP	LPC(P-17:0) (a\b)	FALSE	494.3	Unit	104.1	Unit	3.3	1	166	25	5	Positive
262	LPCP	LPC(P-18:0)	FALSE	508.3	Unit	104.1	Unit	3.6	0.6	166	25	5	Positive
263	LPCP	LPC(P-18:1)	FALSE	506.3	Unit	104.1	Unit	3.1	0.6	166	25	5	Positive
264	LPCP	LPC(P-20:0)	FALSE	536.3	Unit	104.1	Unit	4.1	0.6	166	25	5	Positive
265	LPE	LPE(16:0) (a\b)	FALSE	454.3	Unit	313.3	Unit	2.7	1	166	17	5	Positive
266	LPE	LPE(17:0) (a\b)	FALSE	468.3	Unit	327.3	Unit	3.1	1	166	17	5	Positive
267	LPE	LPE(18:0) (a\b)	FALSE	482.3	Unit	341.3	Unit	3.4	1	166	17	5	Positive
268	LPE	LPE(18:1) (a\b)	FALSE	480.3	Unit	339.3	Unit	2.9	1	166	17	5	Positive
269	LPE	LPE(18:1) d7 (IS)	TRUE	487.3	Unit	346.3	Unit	2.9	1	166	17	5	Positive
270	LPE	LPE(18:2) (a\b)	FALSE	478.3	Unit	337.3	Unit	2.4	1	166	17	5	Positive
271	LPE	LPE(20:4) (a\b)	FALSE	502.3	Unit	361.3	Unit	2.4	1	166	17	5	Positive
272	LPE	LPE(22:6) (a\b)	FALSE	526.3	Unit	385.3	Unit	2.3	1	166	17	5	Positive

화합물 번호	화합물 그룹	화합물 명칭	ISTD?	전구 이온	MS1 Res	생성 이온	MS2 Res	머무름 시간(분)	Delta RT	Frag.	충돌 에너지	셀 가속기 전압	극성
273	LPEP	LPE(P-16:0)	FALSE	438.3	Unit	266.4	Unit	3.1	1	166	19	5	Positive
274	LPEP	LPE(P-18:0)	FALSE	466.3	Unit	294.4	Unit	3.7	1	166	19	5	Positive
275	LPEP	LPE(P-18:1)	FALSE	464.3	Unit	292.4	Unit	3.3	1	166	19	5	Positive
276	LPEP	LPE(P-20:0)	FALSE	494.3	Unit	322.4	Unit	4.2	1	166	19	5	Positive
277	LPI	LPI(13:0 (IS)	TRUE	548.3	Unit	271.3	Unit	1.3	1	166	21	5	Positive
278	LPI	LPI(18:0)	FALSE	618.3	Unit	341.3	Unit	2.9	1	166	21	5	Positive
279	LPI	LPI(18:1) (a\b)	FALSE	616.3	Unit	339.3	Unit	2.4	1	166	21	5	Positive
280	LPI	LPI(18:2) (a\b)	FALSE	614.3	Unit	337.3	Unit	1.9	1	166	21	5	Positive
281	LPI	LPI(20:4) (a\b)	FALSE	638.3	Unit	361.3	Unit	1.9	1	166	21	5	Positive
282	Methyl-CE	methyl-CE(18:0)	FALSE	684.6	Unit	383.3	Unit	12.2	0.4	166	10	4	Positive
283	Methyl-CE	methyl-CE(18:1)	FALSE	682.6	Unit	383.3	Unit	11.9	0.4	166	10	4	Positive
284	Methyl-CE	methyl-CE(18:2)	FALSE	680.6	Unit	383.3	Unit	11.7	0.4	166	10	4	Positive
285	Methyl-CE	methyl-CE(20:4)	FALSE	704.6	Unit	383.3	Unit	11.6	0.4	166	10	4	Positive
286	mDE	methyl-DE(18:1)	FALSE	680.6	Unit	381.4	Unit	11.7	0.6	166	10	4	Positive
287	mDE	methyl-DE(18:2)	FALSE	678.6	Unit	381.4	Unit	11.5	0.6	166	10	4	Positive
288	MG	MG(18:1) d7 (IS)	TRUE	364.2	Unit	272.2	Unit	3.7	1	166	11	4	Positive
289	PA	PA(15:0_18:1) d7 (IS)	TRUE	685.6	Unit	570.6	Unit	6.2	2	166	13	4	Positive
290	PA	PA(34:1)	FALSE	692.6	Unit	577.6	Unit	6.7	2	166	13	4	Positive
291	PA	PA(36:2)	FALSE	718.6	Unit	603.6	Unit	7.0	2	166	13	4	Positive
292	PA	PA(36:3)	FALSE	716.6	Unit	601.6	Unit	6.4	2	166	13	4	Positive
293	PA	PA(36:4)	FALSE	714.6	Unit	599.6	Unit	5.7	2	166	13	4	Positive
294	PC	PC(28:0)	FALSE	678.5	Unit	184.1	Unit	5.2	0.8	166	25	5	Positive
295	PC	PC(14:0_16:0)	FALSE	706.5	Unit	184.1	Unit	6.0	0.8	166	25	5	Positive
296	PC	PC(31:0) (a\b)	FALSE	720.6	Unit	184.1	Unit	6.4	0.8	166	25	5	Positive
297	PC	PC(31:1)	FALSE	718.5	Unit	184.1	Unit	5.8	0.6	166	25	5	Positive
298	PC	PC(16:0_16:0)	FALSE	734.6	Unit	184.1	Unit	7.0	0.6	166	25	5	Positive
299	PC	PC(32:1)	FALSE	732.6	Unit	184.1	Unit	6.2	0.6	166	25	5	Positive
300	PC	PC(32:2)	FALSE	730.5	Unit	184.1	Unit	5.6	0.6	166	25	5	Positive
301	PC	PC(33:0) (a\b)	FALSE	748.6	Unit	184.1	Unit	7.5	1.2	166	25	5	Positive
302	PC	PC(33:1)	FALSE	746.6	Unit	184.1	Unit	6.7	0.6	166	25	5	Positive
303	PC	PC(33:2)	FALSE	744.6	Unit	184.1	Unit	6.0	0.6	166	25	5	Positive
304	PC	PC(16:0_18:0)	FALSE	762.6	Unit	184.1	Unit	8.1	0.6	166	25	5	Positive
305	PC	PC(16:0_18:1)	FALSE	760.6	Unit	184.1	Unit	7.2	0.6	166	25	5	Positive
306	PC	PC(16:0_18:2)	FALSE	758.6	Unit	184.1	Unit	6.5	0.6	166	25	5	Positive
307	oxLipid	PC(34:2) [+OH]	FALSE	774.6	Unit	184.1	Unit	4.8	1	166	25	5	Positive
308	PC	PC(34:3) (a\b\c)	FALSE	756.6	Unit	184.1	Unit	5.9	1.2	166	25	5	Positive
309	PC	PC(14:0_20:4)	FALSE	754.5	Unit	184.1	Unit	5.5	0.6	166	25	5	Positive
310	PC	PC(34:5)	FALSE	752.5	Unit	184.1	Unit	5.1	0.6	166	25	5	Positive
311	PC	PC(35:1) (a\b)	FALSE	774.6	Unit	184.1	Unit	7.7	1.2	166	25	5	Positive
312	PC	PC(35:2) (a\b)	FALSE	772.6	Unit	184.1	Unit	6.9	1.2	166	25	5	Positive
313	PC	PC(35:3) (a\b\c)	FALSE	770.6	Unit	184.1	Unit	6.3	3	166	25	5	Positive
314	PC	PC(15:0_20:4)	FALSE	768.6	Unit	184.1	Unit	6.0	0.6	166	25	5	Positive
315	PC	PC(35:5)	FALSE	766.5	Unit	184.1	Unit	5.4	0.6	166	25	5	Positive
316	PC	PC(18:0_18:1)	FALSE	788.6	Unit	184.1	Unit	8.3	0.8	166	25	5	Positive
317	PC	PC(36:2) (a\b)	FALSE	786.6	Unit	184.1	Unit	7.5	1	166	25	5	Positive
318	PC	PC(36:3) (a\b\c)	FALSE	784.6	Unit	184.1	Unit	6.8	1.2	166	25	5	Positive

화합물 번호	화합물 그룹	화합물 명칭	ISTD?	전구 이온	MS1 Res	생성 이온	MS2 Res	머무름 시간(분)	Delta RT	Frag.	충돌 에너지	셀 가속기 전압	극성
319	PC	PC(36:4) (a\b)	FALSE	782.6	Unit	184.1	Unit	6.3	1.6	166	25	5	Positive
320	oxLipid	PC(36:4) [+OH]	FALSE	798.6	Unit	184.1	Unit	5.4	2	166	25	5	Positive
321	PC	PC(36:5) (a\b)	FALSE	780.6	Unit	184.1	Unit	5.8	1	166	25	5	Positive
322	PC	PC(36:6) (a\b)	FALSE	778.5	Unit	184.1	Unit	5.3	0.6	166	25	5	Positive
323	PC	PC(37:4) (a\b)	FALSE	796.6	Unit	184.1	Unit	6.9	1.2	166	25	5	Positive
324	PC	PC(15:0_22:6)	FALSE	792.6	Unit	184.1	Unit	5.8	0.6	166	25	5	Positive
325	PC	PC(38:2)	FALSE	814.6	Unit	184.1	Unit	8.6	1.4	166	25	5	Positive
326	PC	PC(18:0_20:3)	FALSE	812.6	Unit	184.1	Unit	7.9	1.4	166	25	5	Positive
327	PC	PC(38:4) (a\b\c)	FALSE	810.6	Unit	184.1	Unit	7.3	1.6	166	25	5	Positive
328	PC	PC(38:5) (a\b)	FALSE	808.6	Unit	184.1	Unit	6.7	1	166	25	5	Positive
329	PC	PC(38:6) (a\b)	FALSE	806.6	Unit	184.1	Unit	6.1	1.2	166	25	5	Positive
330	oxLipid	PC(38:6) [+OH]	FALSE	822.6	Unit	184.1	Unit	5.3	2	166	25	5	Positive
331	PC	PC(38:7) (a\b\c)	FALSE	804.6	Unit	184.1	Unit	5.6	1	166	25	5	Positive
332	PC	PC(39:5) (a\b)	FALSE	822.6	Unit	184.1	Unit	6.8	1.2	166	25	5	Positive
333	PC	PC(39:6) (a\b)	FALSE	820.6	Unit	184.1	Unit	6.7	1	166	25	5	Positive
334	PC	PC(40:4) (a\b)	FALSE	838.6	Unit	184.1	Unit	8.4	1.2	166	25	5	Positive
335	PC	PC(40:5) (a\b)	FALSE	836.6	Unit	184.1	Unit	7.8	1.2	166	25	5	Positive
336	PC	PC(18:0_22:6)	FALSE	834.6	Unit	184.1	Unit	7.3	0.6	166	25	5	Positive
337	PC	PC(40:7) (a\b\c)	FALSE	832.6	Unit	184.1	Unit	6.4	1	166	25	5	Positive
338	PC	PC(40:8)	FALSE	830.6	Unit	184.1	Unit	5.8	0.8	166	25	5	Positive
339	PC	PC(15:0_18:1) d7 (IS)	TRUE	753.6	Unit	184.1	Unit	6.7	0.7	166	25	5	Positive
340	PC (O)	PC(O-16:0/16:0)	FALSE	720.6	Unit	184.1	Unit	7.7	0.8	166	25	5	Positive
341	PC (O)	PC(O-32:1)	FALSE	718.5	Unit	184.1	Unit	7.2	0.8	166	25	5	Positive
342	PC (O)	PC(O-32:2)	FALSE	716.6	Unit	184.1	Unit	6.3	0.8	166	25	5	Positive
343	PC (O)	PC(O-34:1)	FALSE	746.6	Unit	184.1	Unit	7.9	0.8	166	25	5	Positive
344	PC (O)	PC(O-34:2)	FALSE	744.6	Unit	184.1	Unit	7.2	1	166	25	5	Positive
345	PC (O)	PC(O-34:4)	FALSE	740.6	Unit	184.1	Unit	6.1	0.8	166	25	5	Positive
346	PC (O)	PC(O-35:4)	FALSE	754.5	Unit	184.1	Unit	6.7	0.8	166	25	5	Positive
347	PC (O)	PC(O-36:0)	FALSE	776.6	Unit	184.1	Unit	10.0	0.8	166	25	5	Positive
348	PC (O)	PC(O-18:0/18:1)	FALSE	774.6	Unit	184.1	Unit	9.1	0.8	166	25	5	Positive
349	PC (O)	PC(O-36:2) (a\b)	FALSE	772.6	Unit	184.1	Unit	8.2	1.2	166	25	5	Positive
350	PC (O)	PC(O-36:3) (a\b)	FALSE	770.6	Unit	184.1	Unit	7.4	1.2	166	25	5	Positive
351	PC (O)	PC(O-16:0/20:4)	FALSE	768.6	Unit	184.1	Unit	7.1	0.8	166	25	5	Positive
352	PC (O)	PC(O-36:5)	FALSE	766.5	Unit	184.1	Unit	6.4	0.8	166	25	5	Positive
353	PC (O)	PC(O-18:0/20:4)	FALSE	796.6	Unit	184.1	Unit	8.2	0.8	166	25	5	Positive
354	PC (O)	PC(O-38:5)	FALSE	794.6	Unit	184.1	Unit	7.2	0.8	166	25	5	Positive
355	PC (O)	PC(O-16:0/22:6)	FALSE	792.6	Unit	184.1	Unit	6.9	0.8	166	25	5	Positive
356	PC (O)	PC(O-40:5)	FALSE	822.6	Unit	184.1	Unit	8.3	0.8	166	25	5	Positive
357	PC (O)	PC(O-18:0/22:6)	FALSE	820.6	Unit	184.1	Unit	8.0	1	166	25	5	Positive
358	PC (O)	PC(O-40:7)	FALSE	818.6	Unit	184.1	Unit	7.0	1	166	25	5	Positive
359	PC (P)	PC(P-18:0/18:1) d9 (IS)	TRUE	781.6	Unit	184.1	Unit	8.9	1	166	25	5	Positive
360	PC (P)	PC(P-16:0/14:0)	FALSE	690.4	Unit	184.1	Unit	6.6	0.8	166	25	5	Positive
361	PC (P)	PC(P-16:0/16:0)	FALSE	718.5	Unit	184.1	Unit	7.6	0.8	166	25	5	Positive
362	PC (P)	PC(P-16:0/16:1)	FALSE	716.6	Unit	184.1	Unit	6.8	0.8	166	25	5	Positive
363	PC (P)	PC(P-16:0/18:0)	FALSE	746.6	Unit	184.1	Unit	8.8	0.8	166	25	5	Positive
364	PC (P)	PC(P-16:0/18:1)	FALSE	744.6	Unit	184.1	Unit	7.8	0.8	166	25	5	Positive

화합물 번호	화합물 그룹	화합물 명칭	ISTD?	전구 이온	MS1 Res	생성 이온	MS2 Res	머무름 시간(분)	Delta RT	Frag.	충돌 에너지	셀 가속기 전압	극성
365	PC (P)	PC(P-16:0/18:2)	FALSE	742.5	Unit	184.1	Unit	7.0	0.8	166	25	5	Positive
366	PC (P)	PC(P-16:0/18:3)	FALSE	740.6	Unit	184.1	Unit	6.4	0.8	166	25	5	Positive
367	PC (P)	PC(P-35:2) (a\b)	FALSE	756.6	Unit	184.1	Unit	7.5	1.5	166	25	5	Positive
368	PC (P)	PC(P-15:0/20:4) (a\b)	FALSE	752.6	Unit	184.1	Unit	6.3	1	166	25	5	Positive
369	PC (P)	PC(P-36:2) (a\b)	FALSE	770.6	Unit	184.1	Unit	8.1	1	166	25	5	Positive
370	PC (P)	PC(P-36:3)	FALSE	768.5	Unit	184.1	Unit	7.3	1	166	25	5	Positive
371	PC (P)	PC(P-16:0/20:4)	FALSE	766.5	Unit	184.1	Unit	6.9	0.8	166	25	5	Positive
372	PC (P)	PC(P-16:0/20:5)	FALSE	764.6	Unit	184.1	Unit	6.3	0.8	166	25	5	Positive
373	PC (P)	PC(P-37:4) (a\b)	FALSE	780.5	Unit	184.1	Unit	7.4	1	166	25	5	Positive
374	PC (P)	PC(P-18:0/20:4)	FALSE	794.6	Unit	184.1	Unit	8.0	0.8	166	25	5	Positive
375	PC (P)	PC(P-38:5) (a\b)	FALSE	792.6	Unit	184.1	Unit	7.2	1.2	166	25	5	Positive
376	PC (P)	PC(P-16:0/22:6)	FALSE	790.6	Unit	184.1	Unit	6.7	0.8	166	25	5	Positive
377	PC (P)	PC(P-20:0/20:4)	FALSE	822.6	Unit	184.1	Unit	9.2	0.8	166	25	5	Positive
378	PC (P)	PC(P-18:0/22:5)	FALSE	820.6	Unit	184.1	Unit	8.1	1	166	25	5	Positive
379	PC (P)	PC(P-18:0/22:6)	FALSE	818.6	Unit	184.1	Unit	7.8	0.8	166	25	5	Positive
380	PC (P)	PC(P-18:1/22:6)	FALSE	816.6	Unit	184.1	Unit	6.8	0.8	166	25	5	Positive
381	PE	PE(16:0_16:0)	FALSE	692.5	Unit	551.5	Unit	7.4	0.6	166	19	5	Positive
382	PE	PE(16:0_16:1)	FALSE	690.5	Unit	549.5	Unit	6.6	0.6	166	19	5	Positive
383	PE	PE(16:0_18:1)	FALSE	718.5	Unit	577.5	Unit	7.6	0.6	166	19	5	Positive
384	PE	PE(16:0_18:2)	FALSE	716.5	Unit	575.5	Unit	6.8	0.6	166	19	5	Positive
385	PE	PE(34:3) (a\b\c)	FALSE	714.5	Unit	573.5	Unit	6.2	1	166	19	5	Positive
386	PE	PE(35:1) (a\b)	FALSE	732.6	Unit	591.5	Unit	8.0	1	166	19	5	Positive
387	PE	PE(35:2) (a\b)	FALSE	730.5	Unit	589.5	Unit	7.3	1	166	19	5	Positive
388	PE	PE(18:0_18:1)	FALSE	746.6	Unit	605.6	Unit	8.8	0.6	166	19	5	Positive
389	PE	PE(36:2) (a\b)	FALSE	744.6	Unit	603.5	Unit	7.9	1	166	19	5	Positive
390	PE	PE(36:3) (a\b)	FALSE	742.5	Unit	601.5	Unit	7.1	0.6	166	19	5	Positive
391	PE	PE(16:0_20:4)	FALSE	740.5	Unit	599.5	Unit	6.8	0.6	166	19	5	Positive
392	PE	PE(36:5) (a\b)	FALSE	738.5	Unit	597.5	Unit	6.1	1	166	19	5	Positive
393	PE	PE(37:4) (a\b)	FALSE	754.6	Unit	613.5	Unit	7.2	1	166	19	5	Positive
394	PE	PE(18:0_20:3) (a\b)	FALSE	770.6	Unit	629.6	Unit	8.5	1.2	166	19	5	Positive
395	PE	PE(18:0_20:4)	FALSE	768.6	Unit	627.5	Unit	7.9	0.6	166	19	5	Positive
396	PE	PE(38:5) (a\b)	FALSE	766.5	Unit	625.5	Unit	7.1	1	166	19	5	Positive
397	PE	PE(16:0_22:6)	FALSE	764.5	Unit	623.5	Unit	6.6	0.6	166	19	5	Positive
398	PE	PE(39:6) (a\b)	FALSE	778.5	Unit	637.5	Unit	7.0	1	166	19	5	Positive
399	PE	PE(40:4) (a\b)	FALSE	796.6	Unit	655.6	Unit	8.9	1	166	19	5	Positive
400	PE	PE(18:0_22:5) (a\b)	FALSE	794.6	Unit	653.6	Unit	8.2	1.4	166	19	5	Positive
401	PE	PE(18:0_22:6)	FALSE	792.6	Unit	651.5	Unit	7.6	0.6	166	19	5	Positive
402	PE	PE(18:1_22:6) (a\b)	FALSE	790.5	Unit	649.5	Unit	6.8	0.6	166	19	5	Positive
403	PE	PE(15:0_18:1) d7 (IS)	TRUE	711.6	Unit	570.5	Unit	7.0	1	166	19	5	Positive
404	PE (O)	PE(O-34:1)	FALSE	704.6	Unit	563.5	Unit	8.3	0.8	166	19	5	Positive
405	PE (O)	PE(O-16:0/18:2)	FALSE	702.5	Unit	561.5	Unit	7.6	0.8	166	19	5	Positive
406	PE (O)	PE(O-36:3) (a\b)	FALSE	728.6	Unit	587.5	Unit	7.8	1	166	19	5	Positive
407	PE (O)	PE(O-16:0/20:4)	FALSE	726.5	Unit	585.5	Unit	7.5	0.8	166	19	5	Positive
408	PE (O)	PE(O-36:5)	FALSE	724.5	Unit	583.5	Unit	6.8	0.8	166	19	5	Positive
409	PE (O)	PE(O-38:4) (a\b)	FALSE	754.6	Unit	613.6	Unit	8.5	1.2	166	19	5	Positive
410	PE (O)	PE(O-38:5) (a\b)	FALSE	752.6	Unit	611.5	Unit	7.8	1.2	166	19	5	Positive

화합물 번호	화합물 그룹	화합물 명칭	ISTD?	전구 이온	MS1 Res	생성 이온	MS2 Res	머무름 시간(분)	Delta RT	Frag.	충돌 에너지	셀 가속기 전압	극성
411	PE (O)	PE(O-16:0/22:6)	FALSE	750.6	Unit	609.5	Unit	7.3	1.2	166	19	5	Positive
412	PE (O)	PE(O-18:0/22:5)	FALSE	780.6	Unit	639.6	Unit	8.7	0.8	166	19	5	Positive
413	PE (O)	PE(O-18:0/22:6)	FALSE	778.5	Unit	637.5	Unit	8.2	0.8	166	19	5	Positive
414	PE (O)	PE(O-18:1/22:6)	FALSE	776.6	Unit	635.5	Unit	7.4	0.8	166	19	5	Positive
415	PE (P)	PE(P-15:0/22:6)	FALSE	734.5	Unit	385.3	Unit	6.5	1	166	19	5	Positive
416	PE (P)	PE(P-16:0/18:1)	FALSE	702.5	Unit	339.3	Unit	8.3	0.6	166	19	5	Positive
417	PE (P)	PE(P-16:0/18:2)	FALSE	700.5	Unit	337.3	Unit	7.4	0.6	166	19	5	Positive
418	PE (P)	PE(P-16:0/20:3) (a\b)	FALSE	726.5	Unit	363.3	Unit	7.8	0.6	166	19	5	Positive
419	PE (P)	PE(P-16:0/20:4)	FALSE	724.5	Unit	361.3	Unit	7.3	0.6	166	19	5	Positive
420	PE (P)	PE(P-16:0/20:5)	FALSE	722.5	Unit	359.3	Unit	6.7	0.6	166	19	5	Positive
421	PE (P)	PE(P-16:0/22:4)	FALSE	752.6	Unit	389.3	Unit	8.2	0.6	166	19	5	Positive
422	PE (P)	PE(P-16:0/22:5) (a\b)	FALSE	750.5	Unit	387.3	Unit	7.6	1.4	166	19	5	Positive
423	PE (P)	PE(P-16:0/22:6)	FALSE	748.5	Unit	385.3	Unit	7.1	0.6	166	19	5	Positive
424	PE (P)	PE(P-17:0/20:4) (a\b)	FALSE	738.6	Unit	361.3	Unit	7.8	1	166	19	5	Positive
425	PE (P)	PE(P-17:0/22:6) (a\b)	FALSE	762.6	Unit	385.3	Unit	7.6	1	166	19	5	Positive
426	PE (P)	PE(P-18:0/18:1)	FALSE	730.6	Unit	339.3	Unit	9.5	0.6	166	19	5	Positive
427	PE (P)	PE(P-18:0/18:1) d9 (IS)	TRUE	739.5	Unit	348.3	Unit	9.4	1	166	19	5	Positive
428	PE (P)	PE(P-18:0/18:2)	FALSE	728.6	Unit	337.3	Unit	8.6	0.6	166	19	5	Positive
429	PE (P)	PE(P-18:0/18:3)	FALSE	726.5	Unit	335.3	Unit	7.9	1	166	19	5	Positive
430	PE (P)	PE(P-18:0/20:3) (a\b)	FALSE	754.5	Unit	363.3	Unit	9.0	0.6	166	19	5	Positive
431	PE (P)	PE(P-18:0/20:4)	FALSE	752.6	Unit	361.3	Unit	8.5	0.6	166	19	5	Positive
432	PE (P)	PE(P-18:0/20:5)	FALSE	750.5	Unit	359.3	Unit	7.8	0.6	166	19	5	Positive
433	PE (P)	PE(P-18:0/22:4)	FALSE	780.6	Unit	389.3	Unit	9.4	0.6	166	19	5	Positive
434	PE (P)	PE(P-18:0/22:5) (a\b)	FALSE	778.5	Unit	387.3	Unit	8.8	1.4	166	19	5	Positive
435	PE (P)	PE(P-18:0/22:6)	FALSE	776.6	Unit	385.3	Unit	8.2	0.6	166	19	5	Positive
436	PE (P)	PE(P-18:1/18:1) (a\b)	FALSE	728.6	Unit	339.3	Unit	8.5	0.6	166	19	5	Positive
437	PE (P)	PE(P-18:1/18:2) (a\b)	FALSE	726.5	Unit	337.3	Unit	7.7	0.6	166	19	5	Positive
438	PE (P)	PE(P-18:1/20:3) (a\b)	FALSE	752.5	Unit	363.3	Unit	8.0	0.6	166	19	5	Positive
439	PE (P)	PE(P-18:1/20:4) (a\b)	FALSE	750.5	Unit	361.3	Unit	7.6	0.6	166	19	5	Positive
440	PE (P)	PE(P-18:1/20:5) (a\b)	FALSE	748.5	Unit	359.3	Unit	6.9	0.6	166	19	5	Positive
441	PE (P)	PE(P-18:1/22:4)	FALSE	778.5	Unit	389.3	Unit	8.4	0.6	166	19	5	Positive
442	PE (P)	PE(P-18:1/22:5) (a\b)	FALSE	776.6	Unit	387.3	Unit	7.8	1.4	166	19	5	Positive
443	PE (P)	PE(P-18:1/22:6) (a\b)	FALSE	774.5	Unit	385.3	Unit	7.3	1	166	19	5	Positive
444	PE (P)	PE(P-19:0/20:4) (a\b)	FALSE	766.6	Unit	361.3	Unit	9.0	1	166	19	5	Positive
445	PE (P)	PE(P-20:0/18:1)	FALSE	758.6	Unit	339.3	Unit	10.1	0.6	166	19	5	Positive
446	PE (P)	PE(P-20:0/18:2)	FALSE	756.6	Unit	337.3	Unit	9.9	0.6	166	19	5	Positive
447	PE (P)	PE(P-20:0/20:4)	FALSE	780.6	Unit	361.3	Unit	9.7	0.6	166	19	5	Positive
448	PE (P)	PE(P-20:0/22:6)	FALSE	804.6	Unit	385.3	Unit	9.5	0.6	166	19	5	Positive
449	PE (P)	PE(P-20:1/20:4)	FALSE	778.5	Unit	361.3	Unit	8.6	0.6	166	19	5	Positive
450	PE (P)	PE(P-20:1/22:6)	FALSE	802.6	Unit	385.3	Unit	8.3	0.6	166	19	5	Positive
451	PG	PG(34:1)	FALSE	766.6	Unit	577.5	Unit	6.0	0.6	166	17	5	Positive
452	PG	PG(36:1)	FALSE	794.6	Unit	605.6	Unit	7.1	0.6	166	17	5	Positive
453	PG	PG(36:2)	FALSE	792.6	Unit	603.5	Unit	6.5	0.6	166	17	5	Positive
454	PG	PG(15:0.18:1) d7 (IS)	TRUE	759.6	Unit	570.6	Unit	5.9	1	166	17	5	Positive
455	PI	PI(15:0.18:1) d7 (IS)	FALSE	847.6	Unit	570.6	Unit	5.6	1.5	166	17	5	Positive
456	PI	PI(16:0/16:0)	FALSE	828.6	Unit	551.6	Unit	5.9	0.8	166	17	5	Positive

화합물 번호	화합물 그룹	화합물 명칭	ISTD?	전구 이온	MS1 Res	생성 이온	MS2 Res	머무름 시간(분)	Delta RT	Frag.	충돌 에너지	셀 가속기 전압	극성
457	PI	PI(16:0_16:1)	FALSE	826.5	Unit	549.5	Unit	5.3	0.8	166	17	5	Positive
458	PI	PI(34:0)	FALSE	856.6	Unit	579.6	Unit	6.8	0.8	166	17	5	Positive
459	PI	PI(34:1)	FALSE	854.6	Unit	577.6	Unit	6.0	0.8	166	17	5	Positive
460	PI	PI(15-MHDA_18:1)/PI(17:0_18:1)	FALSE	868.6	Unit	591.6	Unit	6.5	0.8	166	17	5	Positive
461	PI	PI(15-MHDA_18:2)/PI(17:0_18:2)	FALSE	866.6	Unit	589.6	Unit	5.9	0.8	166	17	5	Positive
462	PI	PI(18:0_18:1)	FALSE	882.6	Unit	605.6	Unit	7.0	0.8	166	17	5	Positive
463	PI	PI(36:2)	FALSE	880.6	Unit	603.6	Unit	6.3	3	166	17	5	Positive
464	PI	PI(36:3) (a\b)	FALSE	878.6	Unit	601.6	Unit	5.7	1	166	17	5	Positive
465	PI	PI(16:0_20:4)	FALSE	876.6	Unit	599.6	Unit	5.4	0.8	166	17	5	Positive
466	PI	PI(37:4)	FALSE	890.6	Unit	613.6	Unit	5.8	1	166	17	5	Positive
467	PI	PI(37:6)	FALSE	886.6	Unit	609.6	Unit	5.7	1	166	17	5	Positive
468	PI	PI(18:0_20:2)	FALSE	908.6	Unit	631.6	Unit	7.2	0.8	166	17	5	Positive
469	PI	PI(18:0_20:3) (a\b)	FALSE	906.6	Unit	629.6	Unit	6.8	1	166	17	5	Positive
470	PI	PI(18:0_20:4)	FALSE	904.6	Unit	627.6	Unit	6.3	0.8	166	17	5	Positive
471	PI	PI(38:5) (a\b)	FALSE	902.6	Unit	625.6	Unit	5.6	1	166	17	5	Positive
472	PI	PI(38:6)	FALSE	900.6	Unit	623.6	Unit	5.3	0.8	166	17	5	Positive
473	PI	PI(40:4) (a\b)	FALSE	932.6	Unit	655.6	Unit	7.1	0.8	166	17	5	Positive
474	PI	PI(18:0_22:5) (a\b)	FALSE	930.6	Unit	653.6	Unit	6.5	1	166	17	5	Positive
475	PI	PI(18:0_22:6)	FALSE	928.6	Unit	651.6	Unit	6.1	0.8	166	17	5	Positive
476	PIP	PIP1(38:4)	FALSE	984.7	Unit	627.7	Unit	5.3	2	166	20	4	Positive
477	PS	PS(36:1)	FALSE	790.6	Unit	605.6	Unit	7.1	1	166	23	5	Positive
478	PS	PS(36:2)	FALSE	788.5	Unit	603.5	Unit	6.4	1	166	23	5	Positive
479	PS	PS(38:4)	FALSE	812.5	Unit	627.5	Unit	6.3	1	166	23	5	Positive
480	PS	PS(40:5)	FALSE	838.6	Unit	653.6	Unit	6.4	1	166	23	5	Positive
481	PS	PS(15:0_18:1) d7 (IS)	TRUE	755.5	Unit	570.5	Unit	5.7	1	166	23	4	Positive
482	S1P	S1P(d16:1)	FALSE	352.2	Unit	236.3	Unit	1.5	3	166	12	4	Positive
483	S1P	S1P(d18:0)	FALSE	382.2	Unit	284.3	Unit	2.3	3	166	12	4	Positive
484	S1P	S1P(d18:1)	FALSE	380.2	Unit	264.3	Unit	2.1	3	166	12	4	Positive
485	S1P	S1P(d18:1) d7 (IS)	TRUE	387.2	Unit	271.3	Unit	2.1	1	166	12	4	Positive
486	S1P	S1P(d18:2)	FALSE	378.2	Unit	262.3	Unit	1.6	3	166	12	4	Positive
487	SM	SM(d17:1/14:0)	FALSE	661.5	Unit	184.1	Unit	4.8	0.6	166	29	5	Positive
488	SM	SM(d18:0/14:0)	FALSE	677.6	Unit	184.1	Unit	5.5	0.6	166	29	5	Positive
489	SM	SM(d18:1/14:0)/SM(d16:1/16:0)	FALSE	675.5	Unit	184.1	Unit	5.2	0.6	166	29	5	Positive
490	SM	SM(d18:2/14:0)	FALSE	673.5	Unit	184.1	Unit	4.7	0.6	166	29	5	Positive
491	SM	SM(d17:1/16:0)	FALSE	689.6	Unit	184.1	Unit	5.6	0.6	166	29	5	Positive
492	SM	SM(d18:0/16:0)	FALSE	705.6	Unit	184.1	Unit	6.4	0.6	166	29	5	Positive
493	SM	SM(d18:1/16:0)	FALSE	703.6	Unit	184.1	Unit	6.0	0.6	166	29	5	Positive
494	SM	SM(d18:2/16:0)	FALSE	701.6	Unit	184.1	Unit	5.4	0.6	166	29	5	Positive
495	SM	SM(34:3)	FALSE	699.5	Unit	184.1	Unit	4.9	0.6	166	29	5	Positive
496	SM	SM(35:1) (a\b)	FALSE	717.6	Unit	184.1	Unit	6.4	0.6	166	29	5	Positive
497	SM	SM(35:2) (a\b)	FALSE	715.6	Unit	184.1	Unit	5.9	1	166	29	5	Positive
498	SM	SM(d18:1/18:0)/SM(d16:1/20:0)	FALSE	731.6	Unit	184.1	Unit	7.0	0.6	166	29	5	Positive
499	SM	SM(d18:2/18:0)	FALSE	729.6	Unit	184.1	Unit	6.2	0.6	166	29	5	Positive
500	SM	SM(d18:2/18:1)	FALSE	727.6	Unit	184.1	Unit	5.6	0.6	166	29	5	Positive
501	SM	SM(37:1)	FALSE	745.6	Unit	184.1	Unit	7.6	1	166	29	5	Positive
502	SM	SM(37:2)	FALSE	743.5	Unit	184.1	Unit	6.7	0.6	166	29	5	Positive

화합물 번호	화합물 그룹	화합물 명칭	ISTD?	전구 이온	MS1 Res	생성 이온	MS2 Res	머무름 시간(분)	Delta RT	Frag.	충돌 에너지	셀 가속기 전압	극성
503	SM	SM(d18:1/20:0)/SM(d16:1/22:0)	FALSE	759.6	Unit	184.1	Unit	8.2	0.6	166	29	5	Positive
504	SM	SM(d18:2/20:0)	FALSE	757.6	Unit	184.1	Unit	7.3	0.6	166	29	5	Positive
505	SM	SM(38:3) (a\b)	FALSE	755.6	Unit	184.1	Unit	6.5	1	166	29	5	Positive
506	SM	SM(d16:1/23:0)/SM(d17:1/22:0)	FALSE	773.7	Unit	184.1	Unit	8.8	0.6	166	29	5	Positive
507	SM	SM(d18:0/22:0)	FALSE	789.7	Unit	184.1	Unit	9.8	0.6	166	29	5	Positive
508	SM	SM(d18:1/22:0)/SM(d16:1/24:0)	FALSE	787.7	Unit	184.1	Unit	9.4	0.6	166	29	5	Positive
509	SM	SM(40:2) (a\b)	FALSE	785.7	Unit	184.1	Unit	8.3	1.4	166	29	5	Positive
510	SM	SM(40:3) (a\b)	FALSE	783.6	Unit	184.1	Unit	7.5	1.2	166	29	5	Positive
511	SM	SM(41:0)	FALSE	803.7	Unit	184.1	Unit	10.1	0.8	166	29	5	Positive
512	SM	SM(41:1) (a\b)	FALSE	801.7	Unit	184.1	Unit	9.9	1	166	29	5	Positive
513	SM	SM(41:2) (a\b)	FALSE	799.7	Unit	184.1	Unit	8.9	1.4	166	29	5	Positive
514	SM	SM(d18:1/24:0)	FALSE	815.7	Unit	184.1	Unit	10.1	0.6	166	29	5	Positive
515	SM	SM(42:2) (a\b)	FALSE	813.7	Unit	184.1	Unit	9.5	1.4	166	29	5	Positive
516	SM	SM(43:1)	FALSE	829.7	Unit	184.1	Unit	10.2	0.8	166	29	5	Positive
517	SM	SM(43:2) (a\b\c)	FALSE	827.7	Unit	184.1	Unit	9.9	1.4	166	29	5	Positive
518	SM	SM(44:1)	FALSE	843.6	Unit	184.1	Unit	10.3	1	166	29	5	Positive
519	SM	SM(44:2)	FALSE	841.6	Unit	184.1	Unit	10.1	1	166	29	5	Positive
520	SM	SM(44:3)	FALSE	839.6	Unit	184.1	Unit	9.6	2	166	29	5	Positive
521	SM	SM(d18:1/15:0) d9 (IS)	TRUE	698.6	Unit	193.1	Unit	5.6	1	166	29	5	Positive
522	SPN	Sph(d17:1) (IS)	FALSE	286.3	Unit	268.3	Unit	1.8	3	166	10	4	Positive
523	SPN	Sph(d18:1)	FALSE	300.3	Unit	282.3	Unit	2.4	3	166	10	4	Positive
524	SPN	Sph(d18:2)	FALSE	298.3	Unit	280.3	Unit	1.8	3	166	10	4	Positive
525	Sulfatides	SHexCer(d18:1/12:0) (IS)	TRUE	724.8	Unit	264.3	Unit	4.1	0.6	166	56	5	Positive
526	Sulfatides	SHexCer(d18:1/16:0(OH))	FALSE	796.8	Unit	264.3	Unit	5.0	0.6	166	56	5	Positive
527	Sulfatides	SHexCer(d18:1/16:0)	FALSE	780.8	Unit	264.3	Unit	5.2	0.6	166	56	5	Positive
528	Sulfatides	SHexCer(d18:1/24:0(OH))	FALSE	908.8	Unit	264.3	Unit	8.6	0.6	166	56	5	Positive
529	Sulfatides	SHexCer(d18:1/24:1(OH))	FALSE	906.8	Unit	264.3	Unit	7.5	0.8	166	56	5	Positive
530	Sulfatides	SHexCer(d18:1/24:1)	FALSE	890.8	Unit	264.3	Unit	7.7	0.6	166	56	5	Positive
531	TG	TG(48:0) [NL-16:0]	FALSE	824.8	Unit	551.5	Unit	11.4	0.7	166	25	5	Positive
532	TG	TG(48:0) [NL-18:0]	FALSE	824.8	Unit	523.5	Unit	11.4	0.7	166	25	5	Positive
533	TG	TG(48:1) [NL-16:1]	FALSE	822.8	Unit	551.5	Unit	11.3	0.7	166	25	5	Positive
534	TG	TG(48:1) [NL-18:1]	FALSE	822.8	Unit	523.5	Unit	11.3	0.7	166	25	5	Positive
535	TG	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS)	TRUE	829.8	Unit	523.5	Unit	11.3	1	166	25	5	Positive
536	TG	TG(48:2) [NL-14:0]	FALSE	820.8	Unit	575.5	Unit	11.1	0.7	166	25	5	Positive
537	TG	TG(48:2) [NL-14:1]	FALSE	820.8	Unit	577.5	Unit	11.1	0.7	166	25	5	Positive
538	TG	TG(48:2) [NL-16:1]	FALSE	820.8	Unit	549.5	Unit	11.1	0.7	166	25	5	Positive
539	TG	TG(48:2) [NL-18:2]	FALSE	820.8	Unit	523.5	Unit	11.1	0.7	166	25	5	Positive
540	TG	TG(48:3) [NL-14:0]	FALSE	818.8	Unit	573.5	Unit	11.0	0.7	166	25	5	Positive
541	TG	TG(48:3) [NL-16:1]	FALSE	818.8	Unit	547.5	Unit	11.0	0.7	166	25	5	Positive
542	TG	TG(48:3) [NL-18:3]	FALSE	818.8	Unit	523.5	Unit	11.0	0.7	166	25	5	Positive
543	TG	TG(49:1) [NL-16:1]	FALSE	836.8	Unit	565.5	Unit	11.4	0.7	166	25	5	Positive
544	TG	TG(49:1) [NL-17:1]	FALSE	836.8	Unit	551.5	Unit	11.4	0.7	166	25	5	Positive
545	TG	TG(50:0) [NL-18:0]	FALSE	852.8	Unit	551.5	Unit	11.6	0.7	166	25	5	Positive
546	TG	TG(50:1) [NL-14:0]	FALSE	850.8	Unit	605.5	Unit	11.5	0.7	166	25	5	Positive
547	TG	TG(50:1) [NL-16:0]	FALSE	850.8	Unit	577.5	Unit	11.5	0.7	166	25	5	Positive
548	TG	TG(50:1) [NL-18:1]	FALSE	850.8	Unit	551.5	Unit	11.5	0.7	166	25	5	Positive

화합물 번호	화합물 그룹	화합물 명칭	ISTD?	전구 이온	MS1 Res	생성 이온	MS2 Res	머무름 시간(분)	Delta RT	Frag.	충돌 에너지	셀 가속기 전압	극성
549	TG	TG(50:2) [NL-14:0]	FALSE	848.8	Unit	603.5	Unit	11.3	0.7	166	25	5	Positive
550	TG	TG(50:2) [NL-16:1]	FALSE	848.8	Unit	577.5	Unit	11.3	0.7	166	25	5	Positive
551	TG	TG(50:2) [NL-18:1]	FALSE	848.8	Unit	549.5	Unit	11.3	0.7	166	25	5	Positive
552	TG	TG(50:2) [NL-18:2]	FALSE	848.8	Unit	551.5	Unit	11.3	0.7	166	25	5	Positive
553	TG	TG(50:3) [NL-14:0]	FALSE	846.8	Unit	601.5	Unit	11.1	0.7	166	25	5	Positive
554	TG	TG(50:3) [NL-14:1]	FALSE	846.8	Unit	603.5	Unit	11.1	0.7	166	25	5	Positive
555	TG	TG(50:3) [NL-16:1]	FALSE	846.8	Unit	575.5	Unit	11.1	0.7	166	25	5	Positive
556	TG	TG(50:3) [NL-18:2]	FALSE	846.8	Unit	549.5	Unit	11.1	0.7	166	25	5	Positive
557	TG	TG(50:3) [NL-18:3]	FALSE	846.8	Unit	551.5	Unit	11.2	0.7	166	25	5	Positive
558	TG	TG(50:4) [NL-14:0]	FALSE	844.8	Unit	599.5	Unit	11.0	0.7	166	25	5	Positive
559	TG	TG(50:4) [NL-18:3]	FALSE	844.8	Unit	549.5	Unit	11.0	0.7	166	25	5	Positive
560	TG	TG(50:4) [NL-20:4]	FALSE	844.8	Unit	523.5	Unit	11.1	0.7	166	25	5	Positive
561	TG	TG(51:0) [NL-16:0]	FALSE	866.7	Unit	593.4	Unit	11.7	0.7	166	25	5	Positive
562	TG	TG(51:1) [NL-17:0]	FALSE	864.8	Unit	577.5	Unit	11.5	0.7	166	25	5	Positive
563	TG	TG(51:2) [NL-15:0]	FALSE	862.8	Unit	603.5	Unit	11.4	0.7	166	25	5	Positive
564	TG	TG(51:2) [NL-17:0]	FALSE	862.8	Unit	575.5	Unit	11.4	0.7	166	25	5	Positive
565	TG	TG(51:2) [NL-17:1]	FALSE	862.8	Unit	577.5	Unit	11.4	0.7	166	25	5	Positive
566	TG	TG(52:1) [NL-18:0]	FALSE	878.8	Unit	577.5	Unit	11.7	0.7	166	25	5	Positive
567	TG	TG(52:1) [NL-18:1]	FALSE	878.8	Unit	579.5	Unit	11.7	0.7	166	25	5	Positive
568	TG	TG(52:2) [NL-16:0]	FALSE	876.8	Unit	603.5	Unit	11.5	0.7	166	25	5	Positive
569	TG	TG(52:2) [NL-18:2]	FALSE	876.8	Unit	579.5	Unit	11.5	0.7	166	25	5	Positive
570	TG	TG(52:3) [NL-16:1]	FALSE	874.8	Unit	603.5	Unit	11.3	0.7	166	25	5	Positive
571	TG	TG(52:3) [NL-18:2]	FALSE	874.8	Unit	577.5	Unit	11.3	0.7	166	25	5	Positive
572	TG	TG(52:4) [NL-16:1]	FALSE	872.8	Unit	601.5	Unit	11.2	0.7	166	25	5	Positive
573	TG	TG(52:4) [NL-18:2]	FALSE	872.8	Unit	575.5	Unit	11.2	0.7	166	25	5	Positive
574	TG	TG(52:4) [NL-18:3]	FALSE	872.8	Unit	577.5	Unit	11.2	0.7	166	25	5	Positive
575	TG	TG(52:5) [NL-18:3]	FALSE	870.8	Unit	575.5	Unit	11.1	0.7	166	25	5	Positive
576	TG	TG(52:5) [NL-20:4]	FALSE	870.8	Unit	549.5	Unit	11.1	0.7	166	25	5	Positive
577	TG	TG(52:5) [NL-20:5]	FALSE	870.8	Unit	551.5	Unit	11.1	0.7	166	25	5	Positive
578	TG	TG(53:2) [NL-17:1]	FALSE	890.8	Unit	605.5	Unit	11.6	0.7	166	25	5	Positive
579	TG	TG(53:2) [NL-18:1]	FALSE	890.8	Unit	591.5	Unit	11.5	0.7	166	25	5	Positive
580	TG	TG(54:0) [NL-18:0]	FALSE	908.8	Unit	607.5	Unit	12.0	0.7	166	25	5	Positive
581	TG	TG(54:1) [NL-18:1]	FALSE	906.8	Unit	607.5	Unit	11.9	0.7	166	25	5	Positive
582	TG	TG(54:2) [NL-18:0]	FALSE	904.8	Unit	603.5	Unit	11.7	0.7	166	25	5	Positive
583	TG	TG(54:2) [NL-20:1]	FALSE	904.8	Unit	577.5	Unit	11.7	0.7	166	25	5	Positive
584	TG	TG(54:3) [NL-18:1]	FALSE	902.8	Unit	603.5	Unit	11.5	0.7	166	25	5	Positive
585	TG	TG(54:3) [NL-18:2]	FALSE	902.8	Unit	605.5	Unit	11.5	0.7	166	25	5	Positive
586	TG	TG(54:4) [NL-18:2]	FALSE	900.8	Unit	603.5	Unit	11.3	0.7	166	25	5	Positive
587	TG	TG(54:4) [NL-20:3]	FALSE	900.8	Unit	577.5	Unit	11.4	0.7	166	25	5	Positive
588	TG	TG(54:5) [NL-18:3]	FALSE	898.8	Unit	603.5	Unit	11.2	0.7	166	25	5	Positive
589	TG	TG(54:5) [NL-20:4]	FALSE	898.8	Unit	577.5	Unit	11.3	0.7	166	25	5	Positive
590	TG	TG(54:6) [NL-18:3]	FALSE	896.8	Unit	601.5	Unit	11.1	0.7	166	25	5	Positive
591	TG	TG(54:6) [NL-20:4]	FALSE	896.8	Unit	575.5	Unit	11.1	0.7	166	25	5	Positive
592	TG	TG(54:6) [NL-20:5]	FALSE	896.8	Unit	577.5	Unit	11.1	0.7	166	25	5	Positive
593	TG	TG(54:6) [NL-22:6]	FALSE	896.8	Unit	551.5	Unit	11.2	0.7	166	25	5	Positive
594	TG	TG(54:7) [NL-20:5]	FALSE	894.8	Unit	575.5	Unit	11.0	0.7	166	25	5	Positive

화합물 번호	화합물 그룹	화합물 명칭	ISTD?	전구 이온	MS1 Res	생성 이온	MS2 Res	머무름 시간(분)	Delta RT	Frag.	충돌 에너지	셀 가속기 전압	극성
595	TG	TG(54:7) [NL-22:6]	FALSE	894.8	Unit	549.5	Unit	11.0	0.7	166	25	5	Positive
596	TG	TG(56:6) [NL-20:4]	FALSE	924.8	Unit	603.5	Unit	11.3	0.7	166	25	5	Positive
597	TG	TG(56:6) [NL-22:5]	FALSE	924.8	Unit	577.5	Unit	11.3	0.7	166	25	5	Positive
598	TG	TG(56:7) [NL-20:4]	FALSE	922.8	Unit	601.5	Unit	11.1	0.7	166	25	5	Positive
599	TG	TG(56:7) [NL-20:5]	FALSE	922.8	Unit	603.5	Unit	11.1	0.7	166	25	5	Positive
600	TG	TG(56:7) [NL-22:5]	FALSE	922.8	Unit	575.5	Unit	11.1	0.7	166	25	5	Positive
601	TG	TG(56:7) [NL-22:6]	FALSE	922.8	Unit	577.5	Unit	11.2	0.7	166	25	5	Positive
602	TG	TG(56:8) [NL-20:4]	FALSE	920.8	Unit	599.5	Unit	11.0	0.7	166	25	5	Positive
603	TG	TG(56:8) [NL-20:5]	FALSE	920.8	Unit	601.5	Unit	11.0	0.7	166	25	5	Positive
604	TG	TG(56:8) [NL-22:6]	FALSE	920.8	Unit	575.5	Unit	11.1	0.7	166	25	5	Positive
605	TG	TG(56:9) [NL-22:6]	FALSE	918.8	Unit	573.5	Unit	10.9	0.7	166	25	5	Positive
606	TG	TG(58:10) [NL-22:6]	FALSE	944.9	Unit	599.5	Unit	11.0	0.7	166	25	5	Positive
607	TG	TG(58:8) [NL-22:6]	FALSE	948.8	Unit	603.5	Unit	11.2	0.7	166	25	5	Positive
608	TG	TG(58:9) [NL-22:6]	FALSE	946.9	Unit	601.5	Unit	11.1	0.7	166	25	5	Positive
609	TG SIM	TG(48:0) [SIM]	FALSE	824.8	Unit	824.8	Unit	11.4	0.7	166	0	5	Positive
610	TG SIM	TG(48:1) [SIM]	FALSE	822.8	Unit	822.8	Unit	11.3	0.7	166	0	5	Positive
611	TG SIM	TG(48:2) [SIM]	FALSE	820.8	Unit	820.8	Unit	11.1	0.7	166	0	5	Positive
612	TG SIM	TG(48:3) [SIM]	FALSE	818.8	Unit	818.8	Unit	11.0	0.7	166	0	5	Positive
613	TG SIM	TG(49:1) [SIM]	FALSE	836.8	Unit	836.8	Unit	11.4	0.7	166	0	5	Positive
614	TG SIM	TG(50:0) [SIM]	FALSE	852.8	Unit	852.8	Unit	11.6	0.7	166	0	5	Positive
615	TG SIM	TG(50:1) [SIM]	FALSE	850.8	Unit	850.8	Unit	11.5	0.7	166	0	5	Positive
616	TG SIM	TG(50:2) [SIM]	FALSE	848.8	Unit	848.8	Unit	11.3	0.7	166	0	5	Positive
617	TG SIM	TG(50:3) [SIM]	FALSE	846.8	Unit	846.8	Unit	11.1	0.7	166	0	5	Positive
618	TG SIM	TG(50:4) [SIM]	FALSE	844.8	Unit	844.8	Unit	11.0	0.7	166	0	5	Positive
619	TG SIM	TG(51:0) [SIM]	FALSE	866.7	Unit	866.7	Unit	11.7	0.7	166	0	5	Positive
620	TG SIM	TG(51:1) [SIM]	FALSE	864.8	Unit	864.8	Unit	11.5	0.7	166	0	5	Positive
621	TG SIM	TG(51:2) [SIM]	FALSE	862.8	Unit	862.8	Unit	11.4	0.7	166	0	5	Positive
622	TG SIM	TG(52:1) [SIM]	FALSE	878.8	Unit	878.8	Unit	11.7	0.7	166	0	5	Positive
623	TG SIM	TG(52:2) [SIM]	FALSE	876.8	Unit	876.8	Unit	11.5	0.7	166	0	5	Positive
624	TG SIM	TG(52:3) [SIM]	FALSE	874.8	Unit	874.8	Unit	11.3	0.7	166	0	5	Positive
625	TG SIM	TG(52:4) [SIM]	FALSE	872.8	Unit	872.8	Unit	11.2	0.7	166	0	5	Positive
626	TG SIM	TG(52:5) [SIM]	FALSE	870.8	Unit	870.8	Unit	11.0	0.7	166	0	5	Positive
627	TG SIM	TG(53:2) [SIM]	FALSE	890.8	Unit	890.8	Unit	11.5	0.7	166	0	5	Positive
628	TG SIM	TG(54:0) [SIM]	FALSE	908.8	Unit	908.8	Unit	12.0	0.7	166	0	5	Positive
629	TG SIM	TG(54:1) [SIM]	FALSE	906.8	Unit	906.8	Unit	11.9	0.7	166	0	5	Positive
630	TG SIM	TG(54:2) [SIM]	FALSE	904.8	Unit	904.8	Unit	11.7	0.7	166	0	5	Positive
631	TG SIM	TG(54:3) [SIM]	FALSE	902.8	Unit	902.8	Unit	11.5	0.7	166	0	5	Positive
632	TG SIM	TG(54:4) [SIM]	FALSE	900.8	Unit	900.8	Unit	11.3	0.7	166	0	5	Positive
633	TG SIM	TG(54:5) [SIM]	FALSE	898.8	Unit	898.8	Unit	11.2	0.7	166	0	5	Positive
634	TG SIM	TG(54:6) [SIM]	FALSE	896.8	Unit	896.8	Unit	11.1	0.7	166	0	5	Positive
635	TG SIM	TG(54:7) [SIM]	FALSE	894.8	Unit	894.8	Unit	11.0	0.7	166	0	5	Positive
636	TG SIM	TG(56:6) [SIM]	FALSE	924.8	Unit	924.8	Unit	11.3	0.7	166	0	5	Positive
637	TG SIM	TG(56:7) [SIM]	FALSE	922.8	Unit	922.8	Unit	11.2	0.7	166	0	5	Positive
638	TG SIM	TG(56:8) [SIM]	FALSE	920.8	Unit	920.8	Unit	11.1	0.7	166	0	5	Positive
639	TG SIM	TG(56:9) [SIM]	FALSE	918.8	Unit	918.8	Unit	10.9	0.7	166	0	5	Positive
640	TG SIM	TG(58:10) [SIM]	FALSE	944.9	Unit	944.9	Unit	11.0	0.7	166	0	5	Positive

화합물 번호	화합물 그룹	화합물 명칭	ISTD?	전구 이온	MS1 Res	생성 이온	MS2 Res	머무름 시간(분)	Delta RT	Frag.	충돌 에너지	셀 가속기 전압	극성
641	TG SIM	TG(O-50:1) [SIM]	FALSE	836.8	Unit	836.8	Unit	11.8	0.7	166	0	5	Positive
642	TG SIM	TG(O-50:2) [SIM]	FALSE	834.8	Unit	834.8	Unit	11.6	0.7	166	0	5	Positive
643	TG SIM	TG(O-52:1) [SIM]	FALSE	864.8	Unit	864.8	Unit	12.0	0.7	166	0	5	Positive
644	TG SIM	TG(O-52:2) [SIM]	FALSE	862.8	Unit	862.8	Unit	11.8	0.7	166	0	5	Positive
645	TG SIM	TG(O-54:2) [SIM]	FALSE	890.8	Unit	890.8	Unit	12.0	0.7	166	0	5	Positive
646	TG (O)	TG(O-50:1) [NL-15:0]	FALSE	836.8	Unit	577.5	Unit	11.8	0.7	166	25	5	Positive
647	TG (O)	TG(O-50:1) [NL-16:0]	FALSE	836.8	Unit	563.5	Unit	11.8	0.7	166	25	5	Positive
648	TG (O)	TG(O-50:1) [NL-17:1]	FALSE	836.8	Unit	551.5	Unit	11.8	0.7	166	25	5	Positive
649	TG (O)	TG(O-50:1) [NL-18:1]	FALSE	836.8	Unit	537.5	Unit	11.8	0.7	166	25	5	Positive
650	TG (O)	TG(O-50:2) [NL-16:1]	FALSE	834.8	Unit	563.5	Unit	11.6	0.7	166	25	5	Positive
651	TG (O)	TG(O-50:2) [NL-18:1]	FALSE	834.8	Unit	535.5	Unit	11.6	0.7	166	25	5	Positive
652	TG (O)	TG(O-50:2) [NL-18:2]	FALSE	834.8	Unit	537.5	Unit	11.6	0.7	166	25	5	Positive
653	TG (O)	TG(O-52:0) [NL-16:0]	FALSE	866.8	Unit	593.5	Unit	12.2	0.7	166	25	5	Positive
654	TG (O)	TG(O-52:1) [NL-16:0]	FALSE	864.8	Unit	591.5	Unit	12.0	0.7	166	25	5	Positive
655	TG (O)	TG(O-52:1) [NL-18:1]	FALSE	864.8	Unit	565.5	Unit	12.0	0.7	166	25	5	Positive
656	TG (O)	TG(O-52:2) [NL-16:0]	FALSE	862.8	Unit	589.5	Unit	11.8	0.7	166	25	5	Positive
657	TG (O)	TG(O-52:2) [NL-17:1]	FALSE	862.8	Unit	577.5	Unit	11.8	0.7	166	25	5	Positive
658	TG (O)	TG(O-52:2) [NL-18:1]	FALSE	862.8	Unit	563.5	Unit	11.8	0.7	166	25	5	Positive
659	TG (O)	TG(O-54:2) [NL-17:1]	FALSE	890.8	Unit	605.5	Unit	12.0	0.7	166	25	5	Positive
660	TG (O)	TG(O-54:2) [NL-18:1]	FALSE	890.8	Unit	591.5	Unit	12.0	0.7	166	25	5	Positive
661	TG (O)	TG(O-54:3) [NL-17:1]	FALSE	888.8	Unit	603.5	Unit	11.8	0.7	166	25	5	Positive
662	TG (O)	TG(O-54:3) [NL-18:1]	FALSE	888.8	Unit	589.5	Unit	11.8	0.7	166	25	5	Positive
663	TG (O)	TG(O-54:4) [NL-17:1]	FALSE	886.8	Unit	601.5	Unit	11.6	0.7	166	25	5	Positive
664	TG (O)	TG(O-54:4) [NL-18:2]	FALSE	886.8	Unit	589.5	Unit	11.6	0.7	166	25	5	Positive
665	Ubiquinone	Ubiquinone	FALSE	880.7	Unit	197	Unit	11.0	0.4	166	17	5	Positive

¹ 일부 전이는 적분 시 분리되는 여러 피크의 모니터링을 허용하므로 여기에서 전이 수는 지질 종의 최종 목록보다 적습니다.

표 A2. 각 지질 종에 대해 제안된 참조 화합물과 감응 계수 및 %CV 값.

화합물 명칭	전환	시간 참조 화합물	ISTD 화합물	감응 계수	%CV ¹	% 백그라운드 ²
AC(10:0)	316.3 → 85.1	AcylCarnitine 16:0 d3 (IS) [reference]	AC(16:0) d3	1	7.2	<1
AC(12:0)	344.3 → 85.1	AC(12:0) [reference]	AC(16:0) d3	1	2.7	<1
AC(12:1)	342.3 → 85.1	AcylCarnitine 16:0 d3 (IS) [reference]	AC(16:0) d3	1	5.4	<1
AC(13:0)	358.3 → 85.1	AC(12:0) [reference]	AC(16:0) d3	1	1.8	1.16
AC(14:0)	372.3 → 85.1	AcylCarnitine 16:0 d3 (IS) [reference]	AC(16:0) d3	1	1.7	2.02
AC(14:0)-OH	388.3 → 85.1	AcylCarnitine 16:0 d3 (IS) [reference]	AC(16:0) d3	1	4.0	1.38
AC(14:1)	370.3 → 85.1	AcylCarnitine 16:0 d3 (IS) [reference]	AC(16:0) d3	1	2.6	<1
AC(14:1)-OH	386.3 → 85.1	AcylCarnitine 16:0 d3 (IS) [reference]	AC(16:0) d3	1	5.9	<1
AC(14:2)	368.3 → 85.1	AcylCarnitine 16:0 d3 (IS) [reference]	AC(16:0) d3	1	3.1	<1
AC(15:0) (a)	386.3 → 85.1	AcylCarnitine 16:0 d3 (IS) [reference]	AC(16:0) d3	1	6.2	2.06
AC(15:0) (b)	386.3 → 85.1	AcylCarnitine 16:0 d3 (IS) [reference]	AC(16:0) d3	1	10.3	12.37
AC(16:0)	400.4 → 85.1	AcylCarnitine 16:0 d3 (IS) [reference]	AC(16:0) d3	1	1.6	<1
AC(16:0)-OH	416.4 → 85.1	AcylCarnitine 16:0 d3 (IS) [reference]	AC(16:0) d3	1	7.9	3.41
AC(16:1)	398.3 → 85.1	AcylCarnitine 16:0 d3 (IS) [reference]	AC(16:0) d3	1	2.5	1.29
AC(16:1)-OH	414.3 → 85.1	AcylCarnitine 16:0 d3 (IS) [reference]	AC(16:0) d3	1	6.1	6.41
AC(17:0) (a)	414.4 → 85.1	AcylCarnitine 16:0 d3 (IS) [reference]	AC(16:0) d3	1	6.7	7.62
AC(17:0) (b)	414.4 → 85.1	AcylCarnitine 16:0 d3 (IS) [reference]	AC(16:0) d3	1	6.2	8.87

화합물 명칭	전환	시간 참조 화합물	ISTD 화합물	감응 계수	%CV ¹	% 백그라운드 ²
AC(18:0)	428.4 → 85.1	AcylCarnitine 16:0 d3 (IS) [reference]	AC(16:0) d3	1	2.8	<1
AC(18:0)-OH	444.4 → 85.1	AcylCarnitine 16:0 d3 (IS) [reference]	AC(16:0) d3	1	11.9	8.3
AC(18:1)	426.4 → 85.1	AcylCarnitine 16:0 d3 (IS) [reference]	AC(16:0) d3	1	1.9	<1
AC(18:1)-OH	442.4 → 85.1	AcylCarnitine 16:0 d3 (IS) [reference]	AC(16:0) d3	1	7.9	1.29
AC(18:2)	424.3 → 85.1	AcylCarnitine 16:0 d3 (IS) [reference]	AC(16:0) d3	1	2.4	<1
AC(18:3)	422.3 → 85.1	AcylCarnitine 16:0 d3 (IS) [reference]	AC(16:0) d3	1	4.6	7.71
AC(20:3) (a)	450.3 → 85.1	AcylCarnitine 16:0 d3 (IS) [reference]	AC(16:0) d3	1	8.0	6.11
AC(20:3) (b)	450.3 → 85.1	AcylCarnitine 16:0 d3 (IS) [reference]	AC(16:0) d3	1	17.1	23.07
AC(20:3)-OH	466.3 → 85.1	AcylCarnitine 16:0 d3 (IS) [reference]	AC(16:0) d3	1	11.4	<1
AC(20:4)	448.3 → 85.1	AcylCarnitine 16:0 d3 (IS) [reference]	AC(16:0) d3	1	14.1	7.47
AC(20:5)	446.3 → 85.1	AcylCarnitine 16:0 d3 (IS) [reference]	AC(16:0) d3	1	8.2	2.97
AC(22:5)	474.3 → 85.1	AcylCarnitine 16:0 d3 (IS) [reference]	AC(16:0) d3	1	17.9	<1
AC(22:5)-OH	490.3 → 85.1	AcylCarnitine 16:0 d3 (IS) [reference]	AC(16:0) d3	1	7.9	1.24
AC(22:6)	472.3 → 85.1	AcylCarnitine 16:0 d3 (IS) [reference]	AC(16:0) d3	1	16.8	24.67
AC(24:0)	512.3 → 85.1	AC(24:0) [reference]	AC(16:0) d3	1	3.0	<1
AC(24:1) (a)	510.3 → 85.1	AC(24:0) [reference]	AC(16:0) d3	1	5.9	2.21
AC(24:1) (b)	510.3 → 85.1	AC(24:0) [reference]	AC(16:0) d3	1	9.8	6.96
AC(26:0)	540.3 → 85.1	AC(24:0) [reference]	AC(16:0) d3	1	3.3	<1
AC(26:1)	538.3 → 85.1	AC(24:0) [reference]	AC(16:0) d3	1	3.7	<1
CA	426.3 → 355.3	Cholic Acid d4 (IS) [reference]	Cholic acid d4	1	5.4	10
CE(14:0)	614.6 → 369.3	CE 18:0-d6 (IS) [reference]	CE(18:0) d6	4.3	18.4	<1
CE(15:0)	628.6 → 369.3	CE 18:0-d6 (IS) [reference]	CE(18:0) d6	2.4	12.0	1.03
CE(16:0)	642.6 → 369.3	CE 18:0-d6 (IS) [reference]	CE(18:0) d6	1.7	2.3	<1
CE(16:1)	640.6 → 369.3	CE 18:0-d6 (IS) [reference]	CE(18:0) d6	1	10.4	<1
CE(16:2)	638.6 → 369.3	CE 18:0-d6 (IS) [reference]	CE(18:0) d6	0.5	9.8	<1
CE(17:0)	656.6 → 369.3	CE 18:0-d6 (IS) [reference]	CE(18:0) d6	1.3	4.9	<1
CE(17:1)	654.6 → 369.3	CE 18:0-d6 (IS) [reference]	CE(18:0) d6	0.7	7.5	<1
CE(18:0)	670.7 → 369.3	CE 18:0-d6 (IS) [reference]	CE(18:0) d6	1.1	2.0	<1
CE(18:1)	668.6 → 369.3	CE 18:0-d6 (IS) [reference]	CE(18:0) d6	0.6	3.1	<1
CE(18:2)	666.6 → 369.3	CE 18:0-d6 (IS) [reference]	CE(18:0) d6	0.3	4.5	<1
CE(18:2) [+OH]	682.6 → 369.3	CE(18:3) [reference]	CE(18:0) d6	1	9.4	<1
CE(18:3)	664.6 → 369.3	CE 18:0-d6 (IS) [reference]	CE(18:0) d6	0.3	7.9	<1
CE(20:0)	698.7 → 369.3	CE 18:0-d6 (IS) [reference]	CE(18:0) d6	1.1	12.9	6.67
CE(20:1)	696.7 → 369.3	CE 18:0-d6 (IS) [reference]	CE(18:0) d6	0.4	5.1	3.45
CE(20:2)	694.7 → 369.3	CE 18:0-d6 (IS) [reference]	CE(18:0) d6	0.2	2.8	<1
CE(20:3)	692.6 → 369.3	CE 18:0-d6 (IS) [reference]	CE(18:0) d6	0.2	2.9	<1
CE(20:4)	690.6 → 369.3	CE 18:0-d6 (IS) [reference]	CE(18:0) d6	0.2	4.1	<1
CE(20:4) [+OH]	706.6 → 369.3	CE(20:5) [reference]	CE(18:0) d6	1	10.9	<1
CE(20:5)	688.6 → 369.3	CE 18:0-d6 (IS) [reference]	CE(18:0) d6	0.2	3.7	<1
CE(22:0)	726.7 → 369.3	CE 18:0-d6 (IS) [reference]	CE(18:0) d6	0.6	14.8	8.7
CE(22:1)	724.7 → 369.3	CE 18:0-d6 (IS) [reference]	CE(18:0) d6	0.3	17.0	3.71
CE(22:4)	718.7 → 369.3	CE 18:0-d6 (IS) [reference]	CE(18:0) d6	0.2	4.4	<1
CE(22:5)	716.6 → 369.3	CE(22:6) [reference]	CE(18:0) d6	0.2	4.3	<1
CE(22:6)	714.6 → 369.3	CE 18:0-d6 (IS) [reference]	CE(18:0) d6	0.2	6.1	<1
CE(24:0)	754.7 → 369.3	CE 18:0-d6 (IS) [reference]	CE(18:0) d6	0.5	18.7	16.71
CE(24:1)	752.7 → 369.3	CE 18:0-d6 (IS) [reference]	CE(18:0) d6	0.3	16.6	6.78
CE(24:4)	746.7 → 369.3	CE 18:0-d6 (IS) [reference]	CE(18:0) d6	0.1	8.4	<1

화합물 명칭	전환	시간 참조 화합물	ISTD 화합물	감응 계수	%CV ¹	% 백그라운드 ²
CE(24:5)	744.7 → 369.3	CE 18:0-d6 (IS) [reference]	CE(18:0) d6	0.1	8.1	<1
CE(24:6)	742.7 → 369.3	CE 18:0-d6 (IS) [reference]	CE(18:0) d6	0.1	13.7	<1
Cer(d16:1/16:0)	510.6 → 236.3	Cer(d18:1-d7/18:0) (IS) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	12.6	1.31
Cer(d16:1/18:0)	538.6 → 236.3	Cer(d18:1-d7/18:0) (IS) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	7.5	3.53
Cer(d16:1/20:0)	566.6 → 236.3	Cer(d18:1-d7/18:0) (IS) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	4.2	2.12
Cer(d16:1/22:0)	594.6 → 236.3	Cer(d16:1/22:0) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	14.3	1.33
Cer(d16:1/23:0)	608.6 → 236.3	Cer(d16:1/23:0) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	14.1	1.7
Cer(d16:1/24:0)	622.6 → 236.3	Cer(d16:1/24:0) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	15.3	1.2
Cer(d16:1/24:1)	620.6 → 236.3	Cer(d16:1/24:1) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	14.2	<1
Cer(d17:1/16:0)	524.6 → 250.3	Cer(d18:1-d7/18:0) (IS) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	12.9	7.44
Cer(d17:1/18:0)	552.6 → 250.3	Cer(d18:1-d7/18:0) (IS) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	11.1	28.25
Cer(d17:1/20:0)	580.6 → 250.3	Cer(d18:1-d7/18:0) (IS) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	8.4	8.01
Cer(d17:1/22:0)	608.6 → 250.3	Cer(d17:1/22:0) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	13.5	2.66
Cer(d17:1/23:0)	622.6 → 250.3	Cer(d17:1/23:0) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	16.2	2.04
Cer(d17:1/24:0)	636.6 → 250.3	Cer(d17:1/24:0) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	14.5	2.13
Cer(d17:1/24:1)	634.6 → 250.3	Cer(d17:1/24:1) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	14.2	<1
Cer(d18:1/16:0)	538.5 → 264.3	Cer(d18:1-d7/18:0) (IS) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	3.9	<1
Cer(d18:1/18:0)	566.6 → 264.3	Cer(d18:1-d7/18:0) (IS) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	3.1	1.11
Cer(d18:1/20:0)	594.6 → 264.3	Cer(d18:1/21:0) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	13.7	3.03
Cer(d18:1/21:0)	608.6 → 264.3	Cer(d18:1/21:0) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	14.2	2.95
Cer(d18:1/22:0)	622.6 → 264.3	Cer(d18:1/22:0) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	13.5	<1
Cer(d18:1/23:0)	636.6 → 264.3	Cer(d18:1/23:0) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	13.4	<1
Cer(d18:1/24:0)	650.6 → 264.3	Cer(d18:1/24:0) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	15.9	<1
Cer(d18:1/24:1)	648.6 → 264.3	Cer(d18:1/24:1) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	13.5	<1
Cer(d18:1/26:0)	678.6 → 264.3	Cer(d18:1/26:0) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	17.3	13.36
Cer(d18:2/16:0)	536.5 → 262.3	Cer(d18:1-d7/18:0) (IS) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	9.9	1.09
Cer(d18:2/18:0)	564.6 → 262.3	Cer(d18:1-d7/18:0) (IS) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	7.2	<1
Cer(d18:2/20:0)	592.6 → 262.3	Cer(d18:1-d7/18:0) (IS) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	7.4	<1
Cer(d18:2/22:0)	620.6 → 262.3	Cer(d18:2/22:0) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	14.5	<1
Cer(d18:2/23:0)	634.6 → 262.3	Cer(d18:2/23:0) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	14.4	<1
Cer(d18:2/24:0)	648.6 → 262.3	Cer(d18:2/24:0) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	16.0	<1
Cer(d18:2/24:1)	646.6 → 262.3	Cer(d18:2/24:1) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	14.4	<1
Cer(d18:2/26:0)	676.6 → 262.3	Cer(d18:2/24:0) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	18.2	2.79
Cer(d19:1/18:0)	580.6 → 278.3	Cer(d19:1/20:0) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	13.5	4.15
Cer(d19:1/20:0)	608.6 → 278.3	Cer(d19:1/20:0) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	16.3	13.82
Cer(d19:1/22:0)	636.6 → 278.3	Cer(d19:1/22:0) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	15.2	<1
Cer(d19:1/23:0)	650.6 → 278.3	Cer(d19:1/23:0) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	15.4	<1
Cer(d19:1/24:0)	664.6 → 278.3	Cer(d19:1/24:0) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	16.0	<1
Cer(d19:1/24:1)	662.6 → 278.3	Cer(d19:1/24:1) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	14.8	<1
Cer(d20:1/22:0)	650.6 → 292.3	Cer(d20:1/22:0) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	17.1	8.75
Cer(d20:1/23:0)	664.6 → 292.3	Cer(d20:1/23:0) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	17.0	5.41
Cer(d20:1/24:0)	678.6 → 292.3	Cer(d20:1/24:0) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	16.6	5.37
Cer(d20:1/24:1)	676.6 → 292.3	Cer(d20:1/24:1) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	16.4	1.26
Cer(m18:0/20:0)	580.6 → 268.4	Cer(d18:1-d7/18:0) (IS) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	14.2	3
Cer(m18:0/22:0)	608.6 → 268.4	Cer(d18:1-d7/18:0) (IS) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	15.3	<1
Cer(m18:0/23:0)	622.6 → 268.4	Cer(d18:1-d7/18:0) (IS) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	14.8	1.08
Cer(m18:0/24:0)	636.6 → 268.4	Cer(d18:1-d7/18:0) (IS) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	15.7	<1

화합물 명칭	전환	시간 참조 화합물	ISTD 화합물	감응 계수	%CV ¹	% 백그라운드 ²
Cer(m18:0/24:1)	634.6 → 268.4	Cer(d18:1-d7/18:0) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	15.2	1.36
Cer(m18:1/18:0)	550.6 → 266.4	Cer(d18:1-d7/18:0) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	14.2	<1
Cer(m18:1/20:0)	578.6 → 266.4	Cer(m18:1/20:0) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	14.6	<1
Cer(m18:1/22:0)	606.6 → 266.4	Cer(m18:1/20:0) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	14.4	<1
Cer(m18:1/23:0)	620.6 → 266.4	Cer(d18:1-d7/18:0) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	13.2	<1
Cer(m18:1/24:0)	634.6 → 266.4	Cer(d18:1-d7/18:0) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	15.3	<1
Cer(m18:1/24:1)	632.6 → 266.4	Cer(d18:1-d7/18:0) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	14.4	<1
Cer1P(d18:1/16:0)	618.4 → 264.3	Cer1P(d18:1/16:0) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	16.6	<1
COH	369.4 → 161.2	COH-d7 [IS] [reference]	COH(d7)	1	7.9	<1
DE(16:0)	640.6 → 367.4	DE(18:1) ester d6 [IS] [reference]	CE(18:0) d6	1	16.7	1.74
DE(18:1)	666.6 → 367.4	DE(18:1) ester d6 [IS] [reference]	CE(18:0) d6	1	6.8	<1
DE(18:2)	664.6 → 367.4	DE(18:1) ester d6 [IS] [reference]	CE(18:0) d6	1	7.7	<1
DE(20:4)	688.6 → 367.4	DE(18:1) ester d6 [IS] [reference]	CE(18:0) d6	1	7.8	<1
DG(14:0_16:0)	558.5 → 313.3	DG(15:0 18:1) d7 [IS] [reference]	DG(15:0_18:1) d7	1	3.3	28.6
DG(14:0_18:2)	582.5 → 285.2	DG(15:0 18:1) d7 [IS] [reference]	DG(15:0_18:1) d7	1	7.8	1.94
DG(16:0_16:0)	586.5 → 313.2	DG(15:0 18:1) d7 [IS] [reference]	DG(15:0_18:1) d7	0.5	4.5	16.01
DG(16:0_16:1)	584.5 → 313.2	DG(15:0 18:1) d7 [IS] [reference]	DG(15:0_18:1) d7	1	2.9	10.96
DG(16:0_18:1)	612.6 → 313.3	DG(15:0 18:1) d7 [IS] [reference]	DG(15:0_18:1) d7	1	4.2	2.83
DG(16:0_18:2)	610.5 → 313.2	DG(15:0 18:1) d7 [IS] [reference]	DG(15:0_18:1) d7	1	4.8	<1
DG(16:0_20:4)	634.5 → 313.2	DG(15:0 18:1) d7 [IS] [reference]	DG(15:0_18:1) d7	1	4.1	6.05
DG(16:0_22:5)	660.6 → 313.3	DG(15:0 18:1) d7 [IS] [reference]	DG(15:0_18:1) d7	1	7.7	7.88
DG(16:0_22:6)	658.5 → 313.2	DG(15:0 18:1) d7 [IS] [reference]	DG(15:0_18:1) d7	1	7.2	4.45
DG(16:1_18:1)	610.5 → 339.2	DG(15:0 18:1) d7 [IS] [reference]	DG(15:0_18:1) d7	1	2.7	3.86
DG(18:0_18:1)	640.6 → 341.3	DG(15:0 18:1) d7 [IS] [reference]	DG(15:0_18:1) d7	1	3.6	5.13
DG(18:0_18:2)	638.6 → 341.3	DG(18:0_18:2) [reference]	DG(15:0_18:1) d7	1	4.3	1.73
DG(18:0_20:4)	662.6 → 341.3	DG(18:0_20:4) [reference]	DG(15:0_18:1) d7	1	8.7	1.64
DG(18:1_18:1)	638.6 → 339.3	DG(18:0_18:2) [reference]	DG(15:0_18:1) d7	1	3.4	1.2
DG(18:1_18:2)	636.6 → 339.3	DG(15:0 18:1) d7 [IS] [reference]	DG(15:0_18:1) d7	1	2.4	<1
DG(18:1_18:3)	634.5 → 339.2	DG(15:0 18:1) d7 [IS] [reference]	DG(15:0_18:1) d7	1	4.0	<1
DG(18:1_20:3)	662.6 → 339.3	DG(18:0_20:4) [reference]	DG(15:0_18:1) d7	1	4.7	1.22
DG(18:1_20:4)	660.6 → 339.3	DG(15:0 18:1) d7 [IS] [reference]	DG(15:0_18:1) d7	1	2.6	<1
DG(18:1_20:5)	658.6 → 339.3	DG(15:0 18:1) d7 [IS] [reference]	DG(15:0_18:1) d7	1	3.5	2.71
DG(18:1_22:5)	686.6 → 339.3	DG(15:0 18:1) d7 [IS] [reference]	DG(15:0_18:1) d7	1	5.1	3.15
DG(18:1_22:6)	684.6 → 339.3	DG(15:0 18:1) d7 [IS] [reference]	DG(15:0_18:1) d7	1	3.6	1.27
DG(18:2_18:2)	634.5 → 337.2	DG(15:0 18:1) d7 [IS] [reference]	DG(15:0_18:1) d7	0.5	3.0	<1
DG(18:2_20:4)	658.5 → 337.2	DG(15:0 18:1) d7 [IS] [reference]	DG(15:0_18:1) d7	1	3.9	<1
DG(18:2_22:6)	682.6 → 337.3	DG(15:0 18:1) d7 [IS] [reference]	DG(15:0_18:1) d7	1	4.8	<1
dhCer(d18:0/16:0)	540.5 → 284.3	dhCer(d18:0/8:0) [reference]	dhCer(d18:0/8:0)	1	11.8	32.71
dhCer(d18:0/18:0)	568.6 → 284.3	dhCer(d18:0/8:0) [reference]	dhCer(d18:0/8:0)	1	9.4	23.82
dhCer(d18:0/20:0)	596.6 → 284.3	dhCer(d18:0/8:0) [reference]	dhCer(d18:0/8:0)	1	14.6	16.64
dhCer(d18:0/22:0)	624.6 → 284.3	dhCer(d18:0/8:0) [reference]	dhCer(d18:0/8:0)	1	15.4	1.67
dhCer(d18:0/24:0)	652.7 → 284.3	dhCer(d18:0/8:0) [reference]	dhCer(d18:0/8:0)	1	16.1	2.87
dhCer(d18:0/24:1)	650.6 → 284.3	dhCer(d18:0/8:0) [reference]	dhCer(d18:0/8:0)	1	14.3	<1
dimethyl-CE(18:1)	696.6 → 397.3	CE 18:0-d6 [IS] [reference]	CE(18:0) d6	1	6.0	<1
dimethyl-CE(18:2)	694.6 → 397.3	CE 18:0-d6 [IS] [reference]	CE(18:0) d6	1	2.6	<1
dimethyl-CE(20:4)	718.6 → 397.3	CE 18:0-d6 [IS] [reference]	CE(18:0) d6	1	5.0	<1
dxCA	410.3 → 357.3	Cholic Acid d4 [IS] [reference]	Cholic acid d4	1	4.7	8.07

화합물 명칭	전환	시간 참조 화합물	ISTD 화합물	감응 계수	%CV ¹	% 백그라운드 ²
FA(14:0)	227.2 → 227.2	FA(22:6) d5 (IS) [reference]	FFA(18:1) d9	1	6.2	67.45
FA(16:0)	255.2 → 255.2	FA(18:1) d9 (IS) [reference]	FFA(18:1) d9	1	2.0	23.4
FA(16:1)	253.2 → 253.2	FA(20:4) d11 (IS) [reference]	FFA(18:1) d9	1	4.8	14.87
FA(17:0)	269.2 → 269.2	FA(18:1) d9 (IS) [reference]	FFA(18:1) d9	1	3.6	79.9
FA(17:1)	267.2 → 267.2	FA(18:1) d9 (IS) [reference]	FFA(18:1) d9	1	2.8	70.54
FA(18:0)	283.3 → 283.3	FA(18:1) d9 (IS) [reference]	FFA(18:1) d9	1	4.5	94.5
FA(18:1)	281.2 → 281.2	FA(18:1) d9 (IS) [reference]	FFA(18:1) d9	1	1.6	2.23
FA(18:2)	279.2 → 279.2	FA(18:1) d9 (IS) [reference]	FFA(18:1) d9	1	3.1	10.48
FA(18:3)	277.2 → 277.2	FA(22:6) d5 (IS) [reference]	FFA(18:1) d9	1	3.8	9.42
FA(20:2)	307.3 → 307.3	FA(18:1) d9 (IS) [reference]	FFA(18:1) d9	1	6.7	73.72
FA(20:3)	305.2 → 305.2	FA(18:1) d9 (IS) [reference]	FFA(18:1) d9	1	3.9	76.41
FA(20:4)	303.2 → 303.2	FA(20:4) d11 (IS) [reference]	FFA(18:1) d9	1	5.1	14.41
FA(20:5)	301.2 → 301.2	FA(22:6) d5 (IS) [reference]	FFA(18:1) d9	1	7.3	26.16
FA(22:4)	331.3 → 331.3	FA(18:1) d9 (IS) [reference]	FFA(18:1) d9	1	4.5	34.32
FA(22:5)	329.2 → 329.2	FA(20:4) d11 (IS) [reference]	FFA(18:1) d9	1	7.8	43.67
FA(22:6)	327.2 → 327.2	FA(22:6) d5 (IS) [reference]	FFA(18:1) d9	1	4.6	26.58
GM3(d18:1/16:0)	1153.7 → 264.3	GM3(d18:1/16:0) [reference]	Hex3Cer(d18:1/17:0)	1	4.2	<1
GM3(d18:1/18:0)	1181.8 → 264.3	GM3(d18:1/16:0) [reference]	Hex3Cer(d18:1/17:0)	1	4.4	<1
GM3(d18:1/20:0)	1209.8 → 264.3	GM3(d18:1/16:0) [reference]	Hex3Cer(d18:1/17:0)	1	7.4	<1
GM3(d18:1/22:0)	1237.8 → 264.3	GM3(d18:1/22:0) [reference]	Hex3Cer(d18:1/17:0)	1	5.6	<1
GM3(d18:1/24:0)	1265.8 → 264.3	GM3(d18:1/24:0) [reference]	Hex3Cer(d18:1/17:0)	1	4.9	<1
GM3(d18:1/24:1)	1263.8 → 264.3	GM3(d18:1/22:0) [reference]	Hex3Cer(d18:1/17:0)	1	5.1	<1
Hex2Cer(d16:1/16:0)	834.6 → 236.3	Hex2Cer(d18:1/15:0) d7 (IS) [reference]	Hex2Cer(d18:1/15:0) d7	1	4.2	<1
Hex2Cer(d16:1/24:1)	944.7 → 236.3	Hex2Cer(d16:1/24:1) [reference]	Hex2Cer(d18:1/15:0) d7	1	8.6	<1
Hex2Cer(d18:1/16:0)	862.6 → 264.3	Hex2Cer(d18:1/16:0) [reference]	Hex2Cer(d18:1/15:0) d7	1	2.4	<1
Hex2Cer(d18:1/20:0)	918.7 → 264.3	Hex2Cer(d18:1/22:0) [reference]	Hex2Cer(d18:1/15:0) d7	1	9.0	<1
Hex2Cer(d18:1/22:0)	946.7 → 264.3	Hex2Cer(d18:1/22:0) [reference]	Hex2Cer(d18:1/15:0) d7	1	3.8	<1
Hex2Cer(d18:1/24:0)	974.8 → 264.3	Hex2Cer(d18:1/24:0) [reference]	Hex2Cer(d18:1/15:0) d7	1	4.4	<1
Hex2Cer(d18:1/24:1)	972.7 → 264.3	Hex2Cer(d18:1/24:1) [reference]	Hex2Cer(d18:1/15:0) d7	1	2.6	<1
Hex2Cer(d18:2/16:0)	860.6 → 262.3	Hex2Cer(d18:1/15:0) d7 (IS) [reference]	Hex2Cer(d18:1/15:0) d7	1	4.6	<1
Hex2Cer(d18:2/24:1)	970.7 → 262.3	Hex2Cer(d18:2/24:1) [reference]	Hex2Cer(d18:1/15:0) d7	1	4.7	<1
Hex3Cer(d18:1/16:0)	1024.7 → 264.3	Hex3Cer(d18:1/17:0) (IS) [reference]	Hex3Cer(d18:1/17:0)	1	4.4	<1
Hex3Cer(d18:1/18:0)	1052.7 → 264.3	Hex3Cer(d18:1/17:0) (IS) [reference]	Hex3Cer(d18:1/17:0)	1	11.2	1.58
Hex3Cer(d18:1/22:0)	1108.8 → 264.3	Hex3Cer(d18:1/17:0) (IS) [reference]	Hex3Cer(d18:1/17:0)	1	5.3	<1
Hex3Cer(d18:1/24:0)	1136.8 → 264.3	Hex3Cer(d18:1/17:0) (IS) [reference]	Hex3Cer(d18:1/17:0)	1	5.3	<1
Hex3Cer(d18:1/24:1)	1134.8 → 264.3	Hex3Cer(d18:1/17:0) (IS) [reference]	Hex3Cer(d18:1/17:0)	1	5.1	<1
HexCer(d16:1/18:0)	700.6 → 236.3	HexCer(d16:1/20:0) [reference]	HexCer(d18:1/15:0) d7	1	16.7	3.78
HexCer(d16:1/20:0)	728.6 → 236.3	HexCer(d16:1/20:0) [reference]	HexCer(d18:1/15:0) d7	1	9.8	2.88
HexCer(d16:1/22:0)	756.7 → 236.3	HexCer(d16:1/24:0) [reference]	HexCer(d18:1/15:0) d7	1	6.8	<1
HexCer(d16:1/24:0)	784.7 → 236.3	HexCer(d16:1/24:0) [reference]	HexCer(d18:1/15:0) d7	1	6.2	<1
HexCer(d18:1/16:0)	700.6 → 264.3	HexCer(d18:1/16:0) [reference]	HexCer(d18:1/15:0) d7	1	8.6	<1
HexCer(d18:1/18:0)	728.6 → 264.3	HexCer(d18:1/18:0) [reference]	HexCer(d18:1/15:0) d7	1	6.9	<1
HexCer(d18:1/20:0)	756.6 → 264.3	HexCer(d18:1/20:0) [reference]	HexCer(d18:1/15:0) d7	1	7.2	<1
HexCer(d18:1/22:0)	784.7 → 264.3	HexCer(d18:1/22:0) [reference]	HexCer(d18:1/15:0) d7	1	2.5	<1
HexCer(d18:1/24:0)	812.7 → 264.3	HexCer(d18:1/24:0) [reference]	HexCer(d18:1/15:0) d7	1	3.5	<1
HexCer(d18:1/24:1)	810.7 → 264.3	HexCer(d18:1/24:1) [reference]	HexCer(d18:1/15:0) d7	1	2.6	<1
HexCer(d18:2/20:0)	754.6 → 262.3	HexCer(d18:2/20:0) [reference]	HexCer(d18:1/15:0) d7	1	13.0	1.36

화합물 명칭	전환	시간 참조 화합물	ISTD 화합물	감응 계수	%CV ¹	% 백그라운드 ²
HexCer(d18:2/22:0)	782.7 → 262.3	HexCer(d18:2/20:0) [reference]	HexCer(d18:1/15:0) d7	1	7.1	<1
HexCer(d18:2/24:0)	810.7 → 262.3	HexCer(d18:2/24:0) [reference]	HexCer(d18:1/15:0) d7	1	4.2	<1
LPC(14:0) [sn1]	468.3 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	2.0	<1
LPC(14:0) [sn2]	468.3 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	3.5	<1
LPC(15:0) [sn1]	482.3 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	1.9	17.68
LPC(15:0) [sn2]	482.3 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	3.7	<1
LPC(15-MHDA) [sn1] / LPC(17:0) [sn2]	510.4 → 184.1	LPC(0-16:0) [reference]	LPC(18:1) d7	1	2.1	<1
LPC(15-MHDA) [sn1] [104_sn1]	510.4 → 104.1	LPC(0-16:0) [reference]	LPC(18:1) d7	1	3.0	<1
LPC(15-MHDA) [sn2]	510.4 → 184.1	LPC(0-16:0) [reference]	LPC(18:1) d7	1	3.7	<1
LPC(16:0) [sn1]	496.3 → 184.1	LPC(0-16:0) [reference]	LPC(18:1) d7	1	1.8	<1
LPC(16:0) [sn2]	496.3 → 184.1	LPC(0-16:0) [reference]	LPC(18:1) d7	1	2.1	<1
LPC(16:1) [sn1]	494.3 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	1.5	<1
LPC(16:1) [sn2]	494.3 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	4.4	<1
LPC(17:0) [sn1]	510.4 → 184.1	LPC(0-16:0) [reference]	LPC(18:1) d7	1	2.1	<1
LPC(17:1) (a) [sn1] [104_sn1]	508.4 → 104.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	3.3	<1
LPC(17:1) [sn1] (a) / LPC(17:1) [sn2] (b)	508.4 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	2.3	<1
LPC(17:1) [sn1] (b)	508.4 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	4.8	2.07
LPC(17:1) [sn2] (a)	508.4 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	5.6	<1
LPC(18:0) [sn1]	524.4 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	2.0	<1
LPC(18:0) [sn2]	524.4 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	2.8	<1
LPC(18:1) [sn1]	522.4 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	1.5	<1
LPC(18:1) [sn2]	522.4 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	1.9	<1
LPC(18:2) [+OH]	536.3 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	8.8	4.8
LPC(18:2) [sn1]	520.3 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	1.7	<1
LPC(18:2) [sn2]	520.3 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	3.6	<1
LPC(18:3) (a) [sn1] [104_sn1]	518.3 → 104.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	4.8	<1
LPC(18:3) [sn1] (a)/LPC(18:3) [sn2] (b)	518.3 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	3.4	<1
LPC(18:3) [sn1] (b)	518.3 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	3.7	<1
LPC(18:3) [sn2] (a)	518.3 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	5.3	<1
LPC(19:0) (a) [sn1] [104_sn1]	538.4 → 104.1	LPC(0-16:0) [reference]	LPC(18:1) d7	1	5.9	<1
LPC(19:0) [sn1] (a) / LPC(19:0) [sn2] (b)	538.4 → 184.1	LPC(0-16:0) [reference]	LPC(18:1) d7	1	4.3	1.21
LPC(19:0) [sn1] (b)	538.4 → 184.1	LPC(0-16:0) [reference]	LPC(18:1) d7	1	3.9	<1
LPC(19:0) [sn2] (a)	538.4 → 184.1	LPC(0-16:0) [reference]	LPC(18:1) d7	1	6.9	6.16
LPC(19:1) (a)	536.4 → 184.1	LPC(0-16:0) [reference]	LPC(18:1) d7	1	10.0	4.92
LPC(19:1) (b)	536.4 → 184.1	LPC(0-16:0) [reference]	LPC(18:1) d7	1	4.4	2.96
LPC(19:1) (c)	536.4 → 184.1	LPC(0-16:0) [reference]	LPC(18:1) d7	1	9.0	28.49
LPC(20:0) [sn1]	552.4 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	4.5	<1
LPC(20:0) [sn2]	552.4 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	4.8	2.53
LPC(20:1) [sn1]	550.4 → 184.1	LPC(0-16:0) [reference]	LPC(18:1) d7	1	4.1	<1
LPC(20:1) [sn2]	550.4 → 184.1	LPC(0-16:0) [reference]	LPC(18:1) d7	1	4.1	1
LPC(20:2) [sn1]	548.4 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	2.8	<1
LPC(20:2) [sn2]	548.4 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	4.1	<1
LPC(20:3) [sn1]	546.4 → 184.1	LPC(0-16:0) [reference]	LPC(18:1) d7	1	2.4	<1
LPC(20:3) [sn2]	546.4 → 184.1	LPC(0-16:0) [reference]	LPC(18:1) d7	1	3.3	<1
LPC(20:4) [+OH]	560.3 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	15.4	25.83
LPC(20:4) [sn1]	544.3 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	3.3	<1
LPC(20:4) [sn2]	544.3 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	4.0	<1

화합물 명칭	전환	시간 참조 화합물	ISTD 화합물	감응 계수	%CV ¹	% 백그라운드 ²
LPC(20:5) [sn1]	542.3 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	4.3	<1
LPC(20:5) [sn2]	542.3 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	5.6	<1
LPC(22:0) [sn1]	580.4 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	8.0	<1
LPC(22:0) [sn2]	580.4 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	8.6	<1
LPC(22:1) [sn1]	578.4 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	5.8	3.53
LPC(22:1) [sn2]	578.4 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	8.3	15.86
LPC(22:4) [sn1]	572.4 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	4.7	<1
LPC(22:4) [sn2]	572.4 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	5.5	<1
LPC(22:5) (n3) [sn1] [104_sn1]	570.4 → 104.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	3.3	<1
LPC(22:5) [sn1] (n3)/LPC(22:5) [sn2] (n6)	570.4 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	3.0	<1
LPC(22:5) [sn1] (n6)	570.4 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	4.8	<1
LPC(22:5) [sn2] (n3)	570.4 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	4.0	<1
LPC(22:6) [sn1]	568.3 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	3.8	<1
LPC(22:6) [sn2]	568.3 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	5.0	<1
LPC(22:6) [+OH]	584.3 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	38.1	53.47
LPC(24:0) [sn1]	608.5 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	6.9	<1
LPC(24:0) [sn2]	608.5 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	8.0	<1
LPC(26:0) [sn1]	636.5 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	6.4	43.83
LPC(26:0) [sn2]	636.5 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	7.3	51.49
LPC(O-16:0)	482.4 → 104.1	LPC(O-16:0) [reference]	LPC(18:1) d7	1	2.1	<1
LPC(O-18:0)	510.4 → 104.1	LPC(O-16:0) [reference]	LPC(18:1) d7	1	3.5	<1
LPC(O-18:1)	508.4 → 104.1	LPC(O-16:0) [reference]	LPC(18:1) d7	1	2.4	<1
LPC(O-20:0)	538.4 → 104.1	LPC(O-16:0) [reference]	LPC(18:1) d7	1	6.3	<1
LPC(O-20:1)	536.4 → 104.1	LPC(O-16:0) [reference]	LPC(18:1) d7	1	4.3	<1
LPC(O-22:0)	566.5 → 104.1	LPC(O-16:0) [reference]	LPC(18:1) d7	1	5.8	<1
LPC(O-22:1)	564.4 → 104.1	LPC(O-16:0) [reference]	LPC(18:1) d7	1	7.1	<1
LPC(O-24:0)	594.5 → 104.1	LPC(O-16:0) [reference]	LPC(18:1) d7	1	4.4	<1
LPC(O-24:1)	592.5 → 104.1	LPC(O-16:0) [reference]	LPC(18:1) d7	1	5.6	1.54
LPC(O-24:2)	590.5 → 104.1	LPC(O-16:0) [reference]	LPC(18:1) d7	1	7.9	<1
LPC(P-16:0)	480.3 → 104.1	LPC(O-16:0) [reference]	LPC(18:1) d7	1	2.2	<1
LPC(P-17:0) (a)	494.3 → 104.1	LPC(O-16:0) [reference]	LPC(18:1) d7	1	5.3	3.84
LPC(P-17:0) (b)	494.3 → 104.1	LPC(O-16:0) [reference]	LPC(18:1) d7	1	6.7	8.79
LPC(P-18:0)	508.3 → 104.1	LPC(P-18:0) [reference]	LPC(18:1) d7	1	5.1	<1
LPC(P-18:1)	506.3 → 104.1	LPC(P-18:1) [reference]	LPC(18:1) d7	1	4.6	<1
LPC(P-20:0)	536.3 → 104.1	LPC(P-18:1) [reference]	LPC(18:1) d7	1	11.3	<1
LPE(16:0) [sn1]	454.3 → 313.3	LPE(18:1) d7 (IS) [reference]	LPE(18:1) d7	1	5.5	<1
LPE(16:0) [sn2]	454.3 → 313.3	LPE(18:1) d7 (IS) [reference]	LPE(18:1) d7	1	5.1	<1
LPE(17:0)	468.3 → 327.3	LPE(18:1) d7 (IS) [reference]	LPE(18:1) d7	1	22.8	7.3
LPE(18:0) [sn1]	482.3 → 341.3	LPE(18:1) d7 (IS) [reference]	LPE(18:1) d7	1	3.6	<1
LPE(18:0) [sn2]	482.3 → 341.3	LPE(18:1) d7 (IS) [reference]	LPE(18:1) d7	1	5.3	<1
LPE(18:1) [sn1]	480.3 → 339.3	LPE(18:1) d7 (IS) [reference]	LPE(18:1) d7	1	5.0	<1
LPE(18:1) [sn2]	480.3 → 339.3	LPE(18:1) d7 (IS) [reference]	LPE(18:1) d7	1	5.6	<1
LPE(18:2) [sn1]	478.3 → 337.3	LPE(18:1) d7 (IS) [reference]	LPE(18:1) d7	1	3.9	<1
LPE(18:2) [sn2]	478.3 → 337.3	LPE(18:1) d7 (IS) [reference]	LPE(18:1) d7	1	5.0	<1
LPE(20:4) [sn1]	502.3 → 361.3	LPE(18:1) d7 (IS) [reference]	LPE(18:1) d7	1	5.3	<1
LPE(20:4) [sn2]	502.3 → 361.3	LPE(18:1) d7 (IS) [reference]	LPE(18:1) d7	1	6.1	<1
LPE(22:6) [sn1]	526.3 → 385.3	LPE(18:1) d7 (IS) [reference]	LPE(18:1) d7	1	5.0	<1

화합물 명칭	전환	시간 참조 화합물	ISTD 화합물	감응 계수	%CV ¹	% 백그라운드 ²
LPE(22:6) [sn2]	526.3 → 385.3	LPE(18:1) d7 (IS) [reference]	LPE(18:1) d7	1	7.3	<1
LPE(P-16:0)	438.3 → 266.4	LPE(18:1) d7 (IS) [reference]	LPE(18:1) d7	1	11.2	<1
LPE(P-18:0)	466.3 → 294.4	LPE(18:1) d7 (IS) [reference]	LPE(18:1) d7	1	9.6	<1
LPE(P-18:1)	464.3 → 292.4	LPE(18:1) d7 (IS) [reference]	LPE(18:1) d7	1	15.8	<1
LPE(P-20:0)	494.3 → 322.4	LPE(18:1) d7 (IS) [reference]	LPE(18:1) d7	1	21.6	21.11
LPI(18:0)	618.3 → 341.3	LPI(18:0) [reference]	LPI(13:0)	1	18.7	2.56
LPI(18:1) [sn1]	616.3 → 339.3	LPI 13:0 (IS) [reference]	LPI(13:0)	1	10.8	<1
LPI(18:1) [sn2]	616.3 → 339.3	LPI 13:0 (IS) [reference]	LPI(13:0)	1	25.4	<1
LPI(18:2) [sn1]	614.3 → 337.3	LPI 13:0 (IS) [reference]	LPI(13:0)	1	10.6	<1
LPI(18:2) [sn2]	614.3 → 337.3	LPI 13:0 (IS) [reference]	LPI(13:0)	1	10.6	3.74
LPI(20:4) [sn1]	638.3 → 361.3	LPI 13:0 (IS) [reference]	LPI(13:0)	1	12.4	<1
LPI(20:4) [sn2]	638.3 → 361.3	LPI 13:0 (IS) [reference]	LPI(13:0)	1	11.9	<1
methyl-CE(18:0)	684.6 → 383.3	CE 18:0-d6 (IS) [reference]	CE(18:0) d6	1	14.6	4.15
methyl-CE(18:1)	682.6 → 383.3	CE 18:0-d6 (IS) [reference]	CE(18:0) d6	1	4.3	<1
methyl-CE(18:2)	680.6 → 383.3	CE 18:0-d6 (IS) [reference]	CE(18:0) d6	1	2.9	<1
methyl-CE(20:4)	704.6 → 383.3	CE 18:0-d6 (IS) [reference]	CE(18:0) d6	1	4.1	<1
methyl-DE(18:1)	680.6 → 381.4	CE 18:0-d6 (IS) [reference]	CE(18:0) d6	1	9.7	<1
methyl-DE(18:2)	678.6 → 381.4	CE 18:0-d6 (IS) [reference]	CE(18:0) d6	1	6.2	<1
PA(34:1)	692.6 → 577.6	PA(15:0_18:1) d7 (IS) [reference]	PA(15:0_18:1) d7	1	11.1	<1
PA(36:2)	718.6 → 603.6	PA(15:0_18:1) d7 (IS) [reference]	PA(15:0_18:1) d7	1	13.2	5.97
PA(36:3)	716.6 → 601.6	PA(15:0_18:1) d7 (IS) [reference]	PA(15:0_18:1) d7	1	13.7	6.68
PA(36:4)	714.6 → 599.6	PA(15:0_18:1) d7 (IS) [reference]	PA(15:0_18:1) d7	1	15.5	10.42
PC(14:0_16:0)	706.5 → 184.1	PC(14:0_16:0) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	1.9	<1
PC(14:0_20:4)	754.5 → 184.1	PC(14:0_20:4) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	2.3	<1
PC(14:0_22:6)	778.5 → 184.1	PC(15:0_22:6) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	2.7	<1
PC(15:0_20:3)	770.6 → 184.1	PC(33:2) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	3.7	<1
PC(15:0_20:4)	768.6 → 184.1	PC(15:0_20:4) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	2.0	<1
PC(15:0_22:6)	792.6 → 184.1	PC(15:0_22:6) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	2.2	<1
PC(15-MHDA_18:1)	774.6 → 184.1	PC(16:0_18:1) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	2.4	<1
PC(15-MHDA_18:2)	772.6 → 184.1	PC(16:0_18:1) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	2.1	<1
PC(15-MHDA_20:4)	796.6 → 184.1	PC(16:0_18:2) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	2.2	<1
PC(15-MHDA_22:6)	820.6 → 184.1	PC(18:0_22:6) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	2.1	<1
PC(16:0_16:0)	734.6 → 184.1	PC(16:0_16:0) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	2.0	<1
PC(16:0_18:0)	762.6 → 184.1	PC(18:0_18:1) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	2.4	<1
PC(16:0_18:1)	760.6 → 184.1	PC(16:0_18:1) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	3.2	<1
PC(16:0_18:2)	758.6 → 184.1	PC(16:0_18:2) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	5.5	<1
PC(16:0_18:3) (a)	756.6 → 184.1	PC(32:2) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	1.9	<1
PC(16:0_18:3) (b)	756.6 → 184.1	PC(32:2) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	2.2	<1
PC(16:0_20:3) (a)	784.6 → 184.1	PC(33:1) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	2.4	<1
PC(16:0_20:3) (b)	784.6 → 184.1	PC(33:1) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	3.0	<1
PC(16:0_20:4)	782.6 → 184.1	PC(33:2) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	4.0	<1
PC(16:0_20:5)	780.6 → 184.1	PC(15:0_22:6) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	1.5	<1
PC(16:0_22:6)	806.6 → 184.1	PC(15:0_22:6) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	2.2	<1
PC(16:1_18:2)	756.6 → 184.1	PC(33:2) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	2.9	<1
PC(16:1_20:4)	780.6 → 184.1	PC(15:0_22:6) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	2.9	<1
PC(16:1_22:6)	804.6 → 184.1	PC(15:0_22:6) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	2.5	<1
PC(17:0_18:1)	774.6 → 184.1	PC(16:0_18:1) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	2.4	<1

화합물 명칭	전환	시간 참조 화합물	ISTD 화합물	감응 계수	%CV ¹	% 백그라운드 ²
PC(17:0_18:2)	772.6 → 184.1	PC(16:0_18:1) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	2.6	<1
PC(17:0_20:4)	796.6 → 184.1	PC(16:0_18:2) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	2.2	<1
PC(17:0_22:6)	820.6 → 184.1	PC(18:0_22:6) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	2.0	<1
PC(17:1_18:2)	770.6 → 184.1	PC(33:2) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	2.3	<1
PC(18:0_18:1)	788.6 → 184.1	PC(18:0_18:1) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	1.6	<1
PC(18:0_18:2)	786.6 → 184.1	PC(16:0_18:1) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	3.3	<1
PC(18:0_20:3)	812.6 → 184.1	PC(18:0_18:1) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	1.8	<1
PC(18:0_20:4)	810.6 → 184.1	PC(18:0_20:4) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	2.0	<1
PC(18:0_22:4)	838.6 → 184.1	PC(15:0_18:1) d7 (IS) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	1.6	<1
PC(18:0_22:5) (n3)/PC(20:1_20:4)	836.6 → 184.1	PC(15:0_18:1) d7 (IS) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	1.8	<1
PC(18:0_22:5) (n6)	836.6 → 184.1	PC(15:0_18:1) d7 (IS) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	2.1	<1
PC(18:0_22:6)	834.6 → 184.1	PC(18:0_22:6) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	1.6	<1
PC(18:1_18:1)	786.6 → 184.1	PC(16:0_18:1) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	3.3	<1
PC(18:1_18:2)	784.6 → 184.1	PC(33:1) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	1.9	<1
PC(18:1_20:3)	810.6 → 184.1	PC(18:0_20:4) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	1.6	<1
PC(18:1_22:6) (a)	832.6 → 184.1	PC(18:0_22:6) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	1.6	<1
PC(18:1_22:6) (b)	832.6 → 184.1	PC(18:0_22:6) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	3.9	<1
PC(18:2_18:2)	782.6 → 184.1	PC(33:2) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	3.7	<1
PC(18:2_20:5)	804.6 → 184.1	PC(15:0_22:6) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	2.0	<1
PC(20:0_20:4)	838.6 → 184.1	PC(15:0_18:1) d7 (IS) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	3.1	<1
PC(28:0)	678.5 → 184.1	PC(28:0) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	3.5	<1
PC(31:0) (a)	720.6 → 184.1	PC(16:0_18:1) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	2.0	<1
PC(31:0) (b)	720.6 → 184.1	PC(16:0_18:1) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	2.9	<1
PC(31:1)	718.5 → 184.1	PC(14:0_16:0) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	2.4	<1
PC(32:1)	732.6 → 184.1	PC(16:0_16:0) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	1.6	<1
PC(32:2)	730.5 → 184.1	PC(32:2) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	1.8	<1
PC(33:0) (a)	748.6 → 184.1	PC(16:0_18:1) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	1.7	<1
PC(33:0) (b)	748.6 → 184.1	PC(16:0_18:1) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	2.6	<1
PC(33:1)	746.6 → 184.1	PC(33:1) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	1.7	<1
PC(33:2)	744.6 → 184.1	PC(33:2) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	2.8	<1
PC(34:2) [+OH]	774.6 → 184.1	PC(15:0_18:1) d7 (IS) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	50.5	<1
PC(34:5)	752.5 → 184.1	PC(34:5) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	3.6	<1
PC(35:5)	766.5 → 184.1	PC(15:0_20:4) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	3.1	<1
PC(36:4) [+OH]	798.6 → 184.1	PC(15:0_18:1) d7 (IS) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	4.2	<1
PC(36:6) (a)	778.5 → 184.1	PC(15:0_22:6) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	3.0	<1
PC(38:2)	814.6 → 184.1	PC(18:0_18:1) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	2.4	2.16
PC(38:4) (b)	810.6 → 184.1	PC(18:0_20:4) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	1.8	<1
PC(38:5) (a)	808.6 → 184.1	PC(15:0_22:6) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	2.2	<1
PC(38:5) (b)	808.6 → 184.1	PC(15:0_22:6) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	1.8	<1
PC(38:6) (a)	806.6 → 184.1	PC(15:0_22:6) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	1.4	<1
PC(38:6) [+OH]	822.6 → 184.1	PC(18:0_20:4) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	4.3	<1
PC(38:7) (c)	804.6 → 184.1	PC(15:0_22:6) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	3.3	<1
PC(39:5) (a)	822.6 → 184.1	PC(18:0_22:6) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	3.1	<1
PC(39:5) (b)	822.6 → 184.1	PC(18:0_22:6) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	1.9	<1
PC(40:7) (a)	832.6 → 184.1	PC(18:0_22:6) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	2.7	<1
PC(40:8)	830.6 → 184.1	PC(16:0_18:2) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	2.5	<1
PC(42:10)	854.5 → 184.1	PC(34:5) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	3.0	<1

화합물 명칭	전환	시간 참조 화합물	ISTD 화합물	감응 계수	%CV ¹	% 백그라운드 ²
PC(O-16:0/16:0)	720.6 → 184.1	PC(O-16:0/16:0) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	2.7	<1
PC(O-16:0/20:3)	770.6 → 184.1	PC(O-38:5) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	2.1	<1
PC(O-16:0/20:4)	768.6 → 184.1	PC(O-38:5) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	1.6	<1
PC(O-16:0/22:6)	792.6 → 184.1	PC(O-38:5) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	1.6	<1
PC(O-18:0/18:1)	774.6 → 184.1	PC(O-36:0) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	4.6	<1
PC(O-18:0/18:2)	772.6 → 184.1	PC(O-34:1) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	2.3	<1
PC(O-18:0/20:4)	796.6 → 184.1	PC(O-38:5) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	2.4	<1
PC(O-18:0/22:6)	820.6 → 184.1	PC(O-38:5) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	2.6	<1
PC(O-18:1/18:1)	772.6 → 184.1	PC(O-34:1) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	2.6	<1
PC(O-18:1/18:2)	770.6 → 184.1	PC(O-38:5) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	1.6	<1
PC(O-32:1)	718.5 → 184.1	PC(O-16:0/16:0) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	2.8	<1
PC(O-32:2)	716.6 → 184.1	PC(16:0_18:2) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	2.5	1.55
PC(O-34:1)	746.6 → 184.1	PC(O-34:1) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	2.0	<1
PC(O-34:2)	744.6 → 184.1	PC(O-34:1) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	1.7	<1
PC(O-34:4)	740.6 → 184.1	PC(O-34:1) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	2.8	2.57
PC(O-35:4)	754.5 → 184.1	PC(O-34:1) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	1.9	93.31
PC(O-36:0)	776.6 → 184.1	PC(O-36:0) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	3.7	<1
PC(O-36:5)	766.5 → 184.1	PC(O-38:5) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	1.9	<1
PC(O-38:5)	794.6 → 184.1	PC(O-38:5) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	1.9	<1
PC(O-40:5)	822.6 → 184.1	PC(O-38:5) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	2.1	<1
PC(O-40:7)	818.6 → 184.1	PC(O-38:5) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	2.4	<1
PC(P-15:0/20:4) (a)	752.6 → 184.1	PC(P-16:0/22:6) [reference]	PC(P-18:0/18:1) d9	1	4.5	2.73
PC(P-15:0/20:4) (b)	752.6 → 184.1	PC(P-16:0/22:6) [reference]	PC(P-18:0/18:1) d9	1	4.9	7.07
PC(P-16:0/14:0)	690.4 → 184.1	PC(P-16:0/18:1) [reference]	PC(P-18:0/18:1) d9	1	4.0	<1
PC(P-16:0/16:0)	718.5 → 184.1	PC(P-16:0/18:1) [reference]	PC(P-18:0/18:1) d9	1	3.3	<1
PC(P-16:0/16:1)	716.6 → 184.1	PC(P-16:0/18:1) [reference]	PC(P-18:0/18:1) d9	1	2.6	<1
PC(P-16:0/18:0)	746.6 → 184.1	PC(P-18:0/18:1) d9 (IS) [reference]	PC(P-18:0/18:1) d9	1	2.7	3.56
PC(P-16:0/18:1)	744.6 → 184.1	PC(P-16:0/18:1) [reference]	PC(P-18:0/18:1) d9	1	1.2	<1
PC(P-16:0/18:2)	742.5 → 184.1	PC(P-16:0/18:1) [reference]	PC(P-18:0/18:1) d9	1	3.4	<1
PC(P-16:0/18:3)	740.6 → 184.1	PC(P-16:0/20:4) [reference]	PC(P-18:0/18:1) d9	1	3.1	1.53
PC(P-16:0/20:4)	766.5 → 184.1	PC(P-16:0/20:4) [reference]	PC(P-18:0/18:1) d9	1	2.4	<1
PC(P-16:0/20:5)	764.6 → 184.1	PC(P-16:0/20:4) [reference]	PC(P-18:0/18:1) d9	1	3.3	<1
PC(P-16:0/22:6)	790.6 → 184.1	PC(P-16:0/22:6) [reference]	PC(P-18:0/18:1) d9	1	3.5	<1
PC(P-17:0/20:4) (a)	780.5 → 184.1	PC(P-16:0/20:4) [reference]	PC(P-18:0/18:1) d9	1	3.2	<1
PC(P-17:0/20:4) (b)	780.5 → 184.1	PC(P-16:0/20:4) [reference]	PC(P-18:0/18:1) d9	1	3.8	<1
PC(P-18:0/18:2)	770.6 → 184.1	PC(P-16:0/18:1) [reference]	PC(P-18:0/18:1) d9	1	1.4	<1
PC(P-18:0/20:4)	794.6 → 184.1	PC(P-16:0/20:4) [reference]	PC(P-18:0/18:1) d9	1	1.4	<1
PC(P-18:0/22:5)	820.6 → 184.1	PC(P-16:0/22:6) [reference]	PC(P-18:0/18:1) d9	1	1.8	<1
PC(P-18:0/22:6)	818.6 → 184.1	PC(P-16:0/22:6) [reference]	PC(P-18:0/18:1) d9	1	2.9	<1
PC(P-18:1/18:1)	770.6 → 184.1	PC(P-16:0/18:1) [reference]	PC(P-18:0/18:1) d9	1	2.1	<1
PC(P-18:1/22:6)	816.6 → 184.1	PC(P-16:0/22:6) [reference]	PC(P-18:0/18:1) d9	1	5.8	1.18
PC(P-20:0/20:4)	822.6 → 184.1	PC(P-18:0/18:1) d9 (IS) [reference]	PC(P-18:0/18:1) d9	1	2.6	1.89
PC(P-35:2) (a)	756.6 → 184.1	PC(P-16:0/18:1) [reference]	PC(P-18:0/18:1) d9	1	2.9	<1
PC(P-35:2) (b)	756.6 → 184.1	PC(P-16:0/18:1) [reference]	PC(P-18:0/18:1) d9	1	3.0	<1
PC(P-36:3)	768.5 → 184.1	PC(P-16:0/20:4) [reference]	PC(P-18:0/18:1) d9	1	2.1	<1
PC(P-38:5) (a)	792.6 → 184.1	PC(P-16:0/22:6) [reference]	PC(P-18:0/18:1) d9	1	3.1	<1
PC(P-38:5) (b)	792.6 → 184.1	PC(P-16:0/22:6) [reference]	PC(P-18:0/18:1) d9	1	2.2	<1

화합물 명칭	전환	시간 참조 화합물	ISTD 화합물	감응 계수	%CV ¹	% 백그라운드 ²
PE(15-MHDA_18:1)	732.6 → 591.5	PE(16:0_18:1) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	12.8	17.5
PE(15-MHDA_18:2)	730.5 → 589.5	PE(16:0_18:1) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	9.1	<1
PE(15-MHDA_20:4)	754.6 → 613.5	PE(16:0_18:1) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	11.1	<1
PE(15-MHDA_22:6)	778.5 → 637.5	PE(16:0_22:6) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	9.4	<1
PE(16:0_16:0)	692.5 → 551.5	PE(16:0_18:1) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	17.5	<1
PE(16:0_16:1)	690.5 → 549.5	PE(16:0_16:1) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	8.9	<1
PE(16:0_18:1)	718.5 → 577.5	PE(16:0_18:1) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	2.5	<1
PE(16:0_18:2)	716.5 → 575.5	PE(16:0_18:2) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	2.5	<1
PE(16:0_18:3) (a)	714.5 → 573.5	PE(16:0_18:2) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	7.0	1.14
PE(16:0_18:3) (b)	714.5 → 573.5	PE(16:0_18:2) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	6.9	<1
PE(16:0_20:3)	742.5 → 601.5	PE(16:0_18:1) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	2.7	<1
PE(16:0_20:4)	740.5 → 599.5	PE(18:0_20:4) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	1.5	<1
PE(16:0_20:5)	738.5 → 597.5	PE(16:0_16:1) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	4.3	<1
PE(16:0_22:6)	764.5 → 623.5	PE(16:0_22:6) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	5.8	<1
PE(16:1_18:2)	714.5 → 573.5	PE(16:0_18:2) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	10.5	<1
PE(16:1_20:4)	738.5 → 597.5	PE(16:0_16:1) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	7.3	<1
PE(17:0_18:1)	732.6 → 591.5	PE(16:0_18:1) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	11.0	<1
PE(17:0_18:2)	730.5 → 589.5	PE(16:0_18:1) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	8.0	1.13
PE(17:0_20:4)	754.6 → 613.5	PE(16:0_18:1) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	5.0	<1
PE(17:0_22:6)	778.5 → 637.5	PE(16:0_22:6) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	9.1	2.42
PE(18:0_18:1)	746.6 → 605.6	PE(18:0_18:1) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	2.0	<1
PE(18:0_18:2)	744.6 → 603.5	PE(16:0_18:1) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	1.5	<1
PE(18:0_20:3) (a)	770.6 → 629.6	PE(18:0_18:1) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	2.3	<1
PE(18:0_20:3) (b)	770.6 → 629.6	PE(18:0_18:1) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	4.3	<1
PE(18:0_20:4)	768.6 → 627.5	PE(18:0_20:4) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	1.4	<1
PE(18:0_22:4)	796.6 → 655.6	PE(18:0_18:1) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	4.5	<1
PE(18:0_22:5) (n3)	794.6 → 653.6	PE(18:0_18:1) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	2.5	<1
PE(18:0_22:5) (n6)	794.6 → 653.6	PE(18:0_18:1) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	3.8	<1
PE(18:0_22:6)	792.6 → 651.5	PE(18:0_22:6) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	2.9	<1
PE(18:1_18:1)	744.6 → 603.5	PE(16:0_18:1) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	5.8	<1
PE(18:1_18:2)	742.5 → 601.5	PE(16:0_18:1) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	3.0	<1
PE(18:1_22:6) (a)	790.5 → 649.5	PE(18:0_22:6) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	4.2	1.05
PE(18:1_22:6) (b)	790.5 → 649.5	PE(18:0_22:6) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	7.9	1.59
PE(20:0_20:4)	796.6 → 655.6	PE(18:0_18:1) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	7.8	<1
PE(38:5) (a)	766.5 → 625.5	PE(18:0_20:4) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	3.2	<1
PE(38:5) (b)	766.5 → 625.5	PE(18:0_20:4) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	2.7	<1
PE(O-16:0/18:2)	702.5 → 561.5	PE(O-34:1) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	4.6	<1
PE(O-16:0/20:3)	728.6 → 587.5	PE(18:0_22:6) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	6.9	<1
PE(O-16:0/20:4)	726.5 → 585.5	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	2.5	<1
PE(O-16:0/22:4)	754.6 → 613.6	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	5.1	8.97
PE(O-16:0/22:6)	750.6 → 609.5	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	2.5	<1
PE(O-18:0/20:4)	754.6 → 613.6	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	2.7	<1
PE(O-18:0/22:5)	780.6 → 639.6	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	5.1	<1
PE(O-18:0/22:6)	778.5 → 637.5	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	3.1	<1
PE(O-18:1/18:2)	728.6 → 587.5	PE(18:0_22:6) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	4.5	<1
PE(O-18:1/22:6)	776.6 → 635.5	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	2.9	<1
PE(O-34:1)	704.6 → 563.5	PE(O-34:1) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	3.1	<1

화합물 명칭	전환	시간 참조 화합물	ISTD 화합물	감응 계수	%CV ¹	% 백그라운드 ²
PE(O-36:5)	724.5 → 583.5	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	6.5	1.71
PE(O-38:5) (a)	752.6 → 611.5	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	3.0	<1
PE(O-38:5) (b)	752.6 → 611.5	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	4.7	1.69
PE(P-15:0/22:6)	734.5 → 385.3	PE(P-16:0/18:2) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	12.0	<1
PE(P-16:0/18:1)	702.5 → 339.3	PE(P-16:0/18:2) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	2.8	<1
PE(P-16:0/18:2)	700.5 → 337.3	PE(P-16:0/18:2) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	2.1	<1
PE(P-16:0/20:3) (a)	726.5 → 363.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	4.9	<1
PE(P-16:0/20:3) (b)	726.5 → 363.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	8.0	1.32
PE(P-16:0/20:4)	724.5 → 361.3	PE(P-16:0/18:2) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	3.0	<1
PE(P-16:0/20:5)	722.5 → 359.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	5.2	<1
PE(P-16:0/22:4)	752.6 → 389.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	5.2	<1
PE(P-16:0/22:5) (n3)	750.5 → 387.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	2.6	<1
PE(P-16:0/22:5) (n6)	750.5 → 387.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	6.2	<1
PE(P-16:0/22:6)	748.5 → 385.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	2.5	<1
PE(P-17:0/20:4) (a)	738.6 → 361.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	4.7	<1
PE(P-17:0/20:4) (b)	738.6 → 361.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	5.2	<1
PE(P-17:0/22:6) (a)	762.6 → 385.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	5.9	<1
PE(P-17:0/22:6) (b)	762.6 → 385.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	5.9	<1
PE(P-18:0/18:1)	730.6 → 339.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	2.9	<1
PE(P-18:0/18:2)	728.6 → 337.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	2.1	<1
PE(P-18:0/18:3)	726.5 → 335.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	12.7	<1
PE(P-18:0/20:3) (a)	754.5 → 363.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	3.6	<1
PE(P-18:0/20:3) (b)	754.5 → 363.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	6.8	<1
PE(P-18:0/20:4)	752.6 → 361.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	1.4	<1
PE(P-18:0/20:5)	750.5 → 359.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	2.8	<1
PE(P-18:0/22:4)	780.6 → 389.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	4.9	<1
PE(P-18:0/22:5) (n3)	778.5 → 387.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	3.2	<1
PE(P-18:0/22:5) (n6)	778.5 → 387.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	6.7	1.39
PE(P-18:0/22:6)	776.6 → 385.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	2.0	<1
PE(P-18:1/18:1) (a)	728.6 → 339.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	3.0	<1
PE(P-18:1/18:1) (b)	728.6 → 339.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	6.2	<1
PE(P-18:1/18:2) (a)	726.5 → 337.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	3.0	<1
PE(P-18:1/18:2) (b)	726.5 → 337.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	5.5	<1
PE(P-18:1/20:3) (a)	752.5 → 363.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	6.1	<1
PE(P-18:1/20:3) (b)	752.5 → 363.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	9.5	<1
PE(P-18:1/20:4) (a)	750.5 → 361.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	2.4	<1
PE(P-18:1/20:4) (b)	750.5 → 361.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	5.0	<1
PE(P-18:1/20:5) (a)	748.5 → 359.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	4.1	<1
PE(P-18:1/20:5) (b)	748.5 → 359.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	7.7	<1
PE(P-18:1/22:4)	778.5 → 389.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	9.4	<1
PE(P-18:1/22:5) (a)	776.6 → 387.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	5.4	2.73
PE(P-18:1/22:5) (b)	776.6 → 387.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	8.9	<1
PE(P-18:1/22:6) (a)	774.5 → 385.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	1.9	<1
PE(P-18:1/22:6) (b)	774.5 → 385.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	4.1	<1
PE(P-19:0/20:4) (a)	766.6 → 361.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	12.3	1.51
PE(P-19:0/20:4) (b)	766.6 → 361.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	9.2	<1
PE(P-20:0/18:1)	758.6 → 339.3	PE(P-18:0/18:1) d9 (IS) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	6.7	3.32

화합물 명칭	전환	시간 참조 화합물	ISTD 화합물	감응 계수	%CV ¹	% 백그라운드 ²
PE(P-20:0/18:2)	756.6 → 337.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	4.7	<1
PE(P-20:0/20:4)	780.6 → 361.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	3.3	<1
PE(P-20:0/22:6)	804.6 → 385.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	4.0	<1
PE(P-20:1/20:4)	778.5 → 361.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	3.8	<1
PE(P-20:1/22:6)	802.6 → 385.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	5.5	<1
PG(34:1)	766.6 → 577.5	PG(15:0_18:1) d7 (IS) [reference]	PG(15:0_18:1) d7	1	12.2	<1
PG(36:1)	794.6 → 605.6	PG(15:0_18:1) d7 (IS) [reference]	PG(15:0_18:1) d7	1	10.9	<1
PG(36:2)	792.6 → 603.5	PG(15:0_18:1) d7 (IS) [reference]	PG(15:0_18:1) d7	1	12.2	<1
PI(38:5) (b)	902.6 → 625.6	PI(38:6) [reference]	PI(15:0_18:1) d7	1	4.0	<1
PI(15-MHDA_18:1)/PI(17:0_18:1)	868.6 → 591.6	PI(34:1) [reference]	PI(15:0_18:1) d7	1	7.3	<1
PI(15-MHDA_18:2)/PI(17:0_18:2)	866.6 → 589.6	PI(15-MHDA_18:2)/PI(17:0_18:2) [reference]	PI(15:0_18:1) d7	1	8.0	<1
PI(37:4)	890.6 → 613.6	PI(16:0_20:4) [reference]	PI(15:0_18:1) d7	1	6.4	<1
PI(16:0/16:0)	828.6 → 551.6	PI(34:1) [reference]	PI(15:0_18:1) d7	1	5.7	<1
PI(16:0_16:1)	826.5 → 549.5	PI(16:0_16:1) [reference]	PI(15:0_18:1) d7	1	3.8	<1
PI(16:0_20:3) (a)	878.6 → 601.6	PI(16:0_20:4) [reference]	PI(15:0_18:1) d7	1	4.7	<1
PI(16:0_20:3) (b)	878.6 → 601.6	PI(16:0_20:4) [reference]	PI(15:0_18:1) d7	1	5.3	<1
PI(16:0_20:4)	876.6 → 599.6	PI(16:0_20:4) [reference]	PI(15:0_18:1) d7	1	2.2	<1
PI(18:0_18:1)	882.6 → 605.6	PI(18:0_18:1) [reference]	PI(15:0_18:1) d7	1	2.5	<1
PI(18:0_20:2)	908.6 → 631.6	PI(18:0_20:4) [reference]	PI(15:0_18:1) d7	1	5.7	<1
PI(18:0_20:3) (a)	906.6 → 629.6	PI(18:0_20:4) [reference]	PI(15:0_18:1) d7	1	9.5	<1
PI(18:0_20:3) (b)	906.6 → 629.6	PI(18:0_20:4) [reference]	PI(15:0_18:1) d7	1	3.2	<1
PI(18:0_20:4)	904.6 → 627.6	PI(18:0_20:4) [reference]	PI(15:0_18:1) d7	1	3.7	<1
PI(18:0_22:4)	932.6 → 655.6	PI(18:0_22:6) [reference]	PI(15:0_18:1) d7	1	6.2	<1
PI(18:0_22:5) (n3)	930.6 → 653.6	PI(18:0_22:6) [reference]	PI(15:0_18:1) d7	1	13.4	<1
PI(18:0_22:5) (n6)	930.6 → 653.6	PI(18:0_22:6) [reference]	PI(15:0_18:1) d7	1	9.0	<1
PI(18:0_22:6)	928.6 → 651.6	PI(18:0_22:6) [reference]	PI(15:0_18:1) d7	1	3.3	<1
PI(18:1_18:2)	878.6 → 601.6	PI(16:0_20:4) [reference]	PI(15:0_18:1) d7	1	3.8	<1
PI(20:0_20:4)	932.6 → 655.6	PI(18:0_22:6) [reference]	PI(15:0_18:1) d7	1	9.2	<1
PI(34:0)	856.6 → 579.6	PI(18:0_18:1) [reference]	PI(15:0_18:1) d7	1	7.8	<1
PI(34:1)	854.6 → 577.6	PI(34:1) [reference]	PI(15:0_18:1) d7	1	2.3	<1
PI(36:2)	880.6 → 603.6	PI(16:0_20:4) [reference]	PI(15:0_18:1) d7	1	10.9	<1
PI(37:6)	886.6 → 609.6	PI(16:0_20:4) [reference]	PI(15:0_18:1) d7	1	11.7	<1
PI(38:5) (a)	902.6 → 625.6	PI(38:6) [reference]	PI(15:0_18:1) d7	1	3.7	<1
PI(38:6)	900.6 → 623.6	PI(38:6) [reference]	PI(15:0_18:1) d7	1	3.6	<1
PIP1(38:4)	984.7 → 627.7	PI(18:0_22:6) [reference]	PI(15:0_18:1) d7	1	7.0	1.52
PS(36:1)	790.6 → 605.6	PS(15:0_18:1) d7 (IS) [reference]	PS(15:0_18:1) d7	1	4.7	<1
PS(36:2)	788.5 → 603.5	PS(15:0_18:1) d7 (IS) [reference]	PS(15:0_18:1) d7	1	4.9	6.95
PS(38:4)	812.5 → 627.5	PS(15:0_18:1) d7 (IS) [reference]	PS(15:0_18:1) d7	1	11.9	<1
PS(40:5)	838.6 → 653.6	PS(15:0_18:1) d7 (IS) [reference]	PS(15:0_18:1) d7	1	6.8	16.53
S1P(d16:1)	352.2 → 236.3	S1P(d18:1) d7 (IS) [reference]	S1P(18:1) d7	1	6.9	4.6
S1P(d18:0)	382.2 → 284.3	S1P(d18:1) d7 (IS) [reference]	S1P(18:1) d7	1	14.7	<1
S1P(d18:1)	380.2 → 264.3	S1P(d18:1) d7 (IS) [reference]	S1P(18:1) d7	1	5.6	<1
S1P(d18:2)	378.2 → 262.3	S1P(d18:1) d7 (IS) [reference]	S1P(18:1) d7	1	5.1	<1
SHexCer(d18:1/16:0(OH))	796.8 → 264.3	SHexCer(d18:1/16:0) [reference]	SHexCer(d18:1/12:0)	1	6.2	<1
SHexCer(d18:1/16:0)	780.8 → 264.3	SHexCer(d18:1/16:0) [reference]	SHexCer(d18:1/12:0)	1	8.1	<1
SHexCer(d18:1/24:0(OH))	908.8 → 264.3	SHexCer(d18:1/24:1(OH)) [reference]	SHexCer(d18:1/12:0)	1	10.9	<1
SHexCer(d18:1/24:1(OH))	906.8 → 264.3	SHexCer(d18:1/24:1(OH)) [reference]	SHexCer(d18:1/12:0)	1	12.8	<1

화합물 명칭	전환	시간 참조 화합물	ISTD 화합물	감응 계수	%CV ¹	% 백그라운드 ²
SHexCer(d18:1/24:1)	890.8 → 264.3	SHexCer(d18:1/24:1 (OH)) [reference]	SHexCer(d18:1/12:0)	1	16.3	<1
SM(34:3)	699.5 → 184.1	SM(d18:2/14:0) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	4.4	<1
SM(35:2) (b)	715.6 → 184.1	SM(d17:1/16:0) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	5.0	<1
SM(37:1)	745.6 → 184.1	SM(d18:1/18:0)/SM(d16:1/20:0) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	1.8	<1
SM(37:2)	743.5 → 184.1	SM(d18:2/18:0) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	1.6	<1
SM(38:3) (a)	755.6 → 184.1	SM(d18:2/20:0) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	3.0	<1
SM(38:3) (b)	755.6 → 184.1	SM(d18:2/20:0) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	2.8	66.33
SM(40:3) (a)	783.6 → 184.1	SM(d18:2/20:0) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	2.2	<1
SM(40:3) (b)	783.6 → 184.1	SM(d18:2/20:0) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	2.0	<1
SM(40:4)	781.5 → 184.1	SM(d18:2/20:0) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	4.5	<1
SM(41:0)	803.7 → 184.1	SM(d18:1/24:0) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	3.3	<1
SM(41:1) (a)	801.7 → 184.1	SM(d16:1/23:0)/SM(d17:1/22:0) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	5.3	<1
SM(43:1)	829.7 → 184.1	SM(43:1) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	2.5	<1
SM(43:2) (b)	827.7 → 184.1	SM(d19:1/24:1) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	2.5	<1
SM(43:2) (c)	827.7 → 184.1	SM(d19:1/24:1) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	2.3	<1
SM(44:1)	843.6 → 184.1	SM(44:2) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	4.5	<1
SM(44:2)	841.6 → 184.1	SM(44:2) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	2.8	<1
SM(44:3)	839.6 → 184.1	SM(44:2) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	4.2	<1
SM(d16:1/19:0)	717.6 → 184.1	SM(d18:2/18:0) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	4.0	<1
SM(d16:1/23:0)/SM(d17:1/22:0)	773.7 → 184.1	SM(d16:1/23:0)/SM(d17:1/22:0) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	2.9	<1
SM(d16:1/24:1)	785.7 → 184.1	SM(d18:1/22:0)/SM(d16:1/24:0) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	2.0	<1
SM(d17:1/14:0)	661.5 → 184.1	SM(d18:1/15:0) d9 (IS) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	2.8	<1
SM(d17:1/16:0)	689.6 → 184.1	SM(d17:1/16:0) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	1.4	<1
SM(d17:1/24:1)	799.7 → 184.1	SM(d16:1/23:0)/SM(d17:1/22:0) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	2.9	<1
SM(d18:0/14:0)	677.6 → 184.1	SM(d18:1/15:0) d9 (IS) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	4.4	<1
SM(d18:0/16:0)	705.6 → 184.1	SM(d18:1/16:0) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	4.2	<1
SM(d18:0/22:0)	789.7 → 184.1	SM(d18:1/22:0)/SM(d16:1/24:0) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	6.6	<1
SM(d18:1/14:0)/SM(d16:1/16:0)	675.5 → 184.1	SM(d18:1/15:0) d9 (IS) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	3.6	<1
SM(d18:1/16:0)	703.6 → 184.1	SM(d18:1/16:0) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	2.8	<1
SM(d18:1/17:0)/SM(d17:1/18:0)	717.6 → 184.1	SM(d18:2/18:0) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	3.0	<1
SM(d18:1/18:0)/SM(d16:1/20:0)	731.6 → 184.1	SM(d18:1/18:0)/SM(d16:1/20:0) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	2.1	<1
SM(d18:1/20:0)/SM(d16:1/22:0)	759.6 → 184.1	SM(d16:1/23:0)/SM(d17:1/22:0) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	1.7	<1
SM(d18:1/22:0)/SM(d16:1/24:0)	787.7 → 184.1	SM(d18:1/22:0)/SM(d16:1/24:0) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	1.6	<1
SM(d18:1/23:0)/SM(d17:1/24:0)	801.7 → 184.1	SM(d16:1/23:0)/SM(d17:1/22:0) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	1.3	<1
SM(d18:1/24:0)	815.7 → 184.1	SM(d18:1/24:0) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	4.0	<1
SM(d18:1/24:1)	813.7 → 184.1	SM(d18:1/24:1) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	1.7	<1
SM(d18:2/14:0)	673.5 → 184.1	SM(d18:2/14:0) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	5.6	<1
SM(d18:2/16:0)	701.6 → 184.1	SM(d18:2/16:0) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	2.8	<1
SM(d18:2/17:0)	715.6 → 184.1	SM(d17:1/16:0) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	2.9	<1
SM(d18:2/18:0)	729.6 → 184.1	SM(d18:2/18:0) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	1.9	<1
SM(d18:2/18:1)	727.6 → 184.1	SM(d18:2/16:0) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	2.2	<1
SM(d18:2/20:0)	757.6 → 184.1	SM(d18:2/20:0) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	2.0	<1
SM(d18:2/22:0)	785.7 → 184.1	SM(d18:1/22:0)/SM(d16:1/24:0) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	1.7	<1
SM(d18:2/23:0)	799.7 → 184.1	SM(d16:1/23:0)/SM(d17:1/22:0) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	2.7	<1
SM(d18:2/24:0)	813.7 → 184.1	SM(d18:1/24:1) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	4.1	<1
SM(d19:1/24:1)	827.7 → 184.1	SM(d19:1/24:1) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	4.2	<1
Sph(d18:1)	300.3 → 282.3	Sph(d17:1) [reference]	Sph(d17:1)	1	6.8	58.42

화합물 명칭	전환	시간 참조 화합물	ISTD 화합물	감응 계수	%CV ¹	% 백그라운드 ²
Sph(d18:2)	298.3 → 280.3	Sph(d17:1) [reference]	Sph(d17:1)	1	25.7	76.52
TG(48:0) [NL-16:0]	824.8 → 551.5	TG(48:0) [NL-16:0] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	4.0	1.25
TG(48:0) [NL-18:0]	824.8 → 523.5	TG(48:0) [NL-16:0] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.9	2.08
TG(48:0) [SIM]	824.8 → 824.8	TG(48:0) [NL-16:0] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.5	2.86
TG(48:1) [NL-16:1]	822.8 → 551.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.9	2.66
TG(48:1) [NL-18:1]	822.8 → 523.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.0	<1
TG(48:1) [SIM]	822.8 → 822.8	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.5	1.49
TG(48:2) [NL-14:0]	820.8 → 575.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.0	<1
TG(48:2) [NL-14:1]	820.8 → 577.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.7	1.14
TG(48:2) [NL-16:1]	820.8 → 549.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.7	4.14
TG(48:2) [NL-18:2]	820.8 → 523.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.7	<1
TG(48:2) [SIM]	820.8 → 820.8	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.3	<1
TG(48:3) [NL-14:0]	818.8 → 573.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.7	<1
TG(48:3) [NL-16:1]	818.8 → 547.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.3	5.58
TG(48:3) [NL-18:3]	818.8 → 523.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	4.6	<1
TG(48:3) [SIM]	818.8 → 818.8	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.8	4.47
TG(49:1) [NL-16:1]	836.8 → 565.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	4.9	14.31
TG(49:1) [NL-17:1]	836.8 → 551.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.8	<1
TG(49:1) [SIM]	836.8 → 836.8	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.3	13.44
TG(50:0) [NL-18:0]	852.8 → 551.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	4.8	<1
TG(50:0) [SIM]	852.8 → 852.8	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.3	1.84
TG(50:1) [NL-14:0]	850.8 → 605.5	TG(50:1) [NL-16:0] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	5.4	<1
TG(50:1) [NL-16:0]	850.8 → 577.5	TG(50:1) [NL-16:0] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.2	<1
TG(50:1) [NL-18:1]	850.8 → 551.5	TG(50:1) [NL-16:0] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.5	<1
TG(50:1) [SIM]	850.8 → 850.8	TG(50:1) [NL-16:0] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.5	<1
TG(50:2) [NL-14:0]	848.8 → 603.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	4.0	<1
TG(50:2) [NL-16:1]	848.8 → 577.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.6	<1
TG(50:2) [NL-18:1]	848.8 → 549.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.0	<1
TG(50:2) [NL-18:2]	848.8 → 551.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	4.0	<1
TG(50:2) [SIM]	848.8 → 848.8	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.6	<1
TG(50:3) [NL-14:0]	846.8 → 601.5	TG(50:3) [NL-18:2] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.9	<1
TG(50:3) [NL-14:1]	846.8 → 603.5	TG(50:3) [NL-18:2] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	4.0	<1
TG(50:3) [NL-16:1]	846.8 → 575.5	TG(50:3) [NL-18:2] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.4	<1
TG(50:3) [NL-18:2]	846.8 → 549.5	TG(50:3) [NL-18:2] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.4	<1
TG(50:3) [NL-18:3]	846.8 → 551.5	TG(50:3) [NL-18:2] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.1	<1
TG(50:3) [SIM]	846.8 → 846.8	TG(50:3) [NL-18:2] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.5	<1
TG(50:4) [NL-14:0]	844.8 → 599.5	TG(50:4) [SIM] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.3	<1
TG(50:4) [NL-18:3]	844.8 → 549.5	TG(50:4) [SIM] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.2	<1
TG(50:4) [NL-20:4]	844.8 → 523.5	TG(50:4) [SIM] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	4.2	<1
TG(50:4) [SIM]	844.8 → 844.8	TG(50:4) [SIM] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.4	<1
TG(51:0) [NL-16:0]	866.7 → 593.4	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.2	<1
TG(51:0) [SIM]	866.7 → 866.7	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	9.6	<1
TG(51:1) [NL-17:0]	864.8 → 577.5	TG(51:1) [NL-17:0] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	5.6	<1
TG(51:1) [SIM]	864.8 → 864.8	TG(51:2) [SIM] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.8	<1
TG(51:2) [NL-15:0]	862.8 → 603.5	TG(51:2) [SIM] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	5.6	<1
TG(51:2) [NL-17:0]	862.8 → 575.5	TG(51:2) [SIM] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.9	<1
TG(51:2) [NL-17:1]	862.8 → 577.5	TG(51:2) [SIM] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.3	<1

화합물 명칭	전환	시간 참조 화합물	ISTD 화합물	감응 계수	%CV ¹	% 백그라운드 ²
TG(51:2) [SIM]	862.8 → 862.8	TG(51:2) [SIM] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.4	3.13
TG(52:1) [NL-18:0]	878.8 → 577.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	4.2	<1
TG(52:1) [NL-18:1]	878.8 → 579.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.3	<1
TG(52:1) [SIM]	878.8 → 878.8	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.5	<1
TG(52:2) [NL-16:0]	876.8 → 603.5	TG(52:2) [NL-16:0] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	4.8	<1
TG(52:2) [NL-18:2]	876.8 → 579.5	TG(52:2) [NL-16:0] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.8	<1
TG(52:2) [SIM]	876.8 → 876.8	TG(52:2) [NL-16:0] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	8.1	<1
TG(52:3) [NL-16:1]	874.8 → 603.5	TG(52:3) [NL-18:2] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	6.1	<1
TG(52:3) [NL-18:2]	874.8 → 577.5	TG(52:3) [NL-18:2] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.3	<1
TG(52:3) [SIM]	874.8 → 874.8	TG(52:3) [NL-18:2] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	8.1	<1
TG(52:4) [NL-16:1]	872.8 → 601.5	TG(52:4) [SIM] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.2	<1
TG(52:4) [NL-18:2]	872.8 → 575.5	TG(52:4) [SIM] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.3	<1
TG(52:4) [NL-18:3]	872.8 → 577.5	TG(52:4) [SIM] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.6	<1
TG(52:4) [SIM]	872.8 → 872.8	TG(52:4) [SIM] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.6	<1
TG(52:5) [NL-18:3]	870.8 → 575.5	TG(52:5) [SIM] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.9	<1
TG(52:5) [NL-20:4]	870.8 → 549.5	TG(52:5) [SIM] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.3	<1
TG(52:5) [NL-20:5]	870.8 → 551.5	TG(52:5) [SIM] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	4.0	<1
TG(52:5) [SIM]	870.8 → 870.8	TG(52:5) [SIM] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.7	<1
TG(53:2) [NL-17:1]	890.8 → 605.5	TG(53:2) [NL-18:1] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	5.5	<1
TG(53:2) [NL-18:1]	890.8 → 591.5	TG(53:2) [NL-18:1] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.3	<1
TG(53:2) [SIM]	890.8 → 890.8	TG(53:2) [NL-18:1] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.3	<1
TG(54:0) [NL-18:0]	908.8 → 607.5	TG(53:2) [NL-18:1] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.4	8.23
TG(54:0) [SIM]	908.8 → 908.8	TG(53:2) [NL-18:1] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.0	4.98
TG(54:1) [NL-18:1]	906.8 → 607.5	TG(53:2) [NL-18:1] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.4	<1
TG(54:1) [SIM]	906.8 → 906.8	TG(53:2) [NL-18:1] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.6	<1
TG(54:2) [NL-18:0]	904.8 → 603.5	TG(54:2) [NL-20:1] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	4.1	<1
TG(54:2) [NL-20:1]	904.8 → 577.5	TG(54:2) [NL-20:1] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	4.4	<1
TG(54:2) [SIM]	904.8 → 904.8	TG(54:2) [NL-20:1] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.7	<1
TG(54:3) [NL-18:1]	902.8 → 603.5	TG(54:3) [NL-18:1] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.8	<1
TG(54:3) [NL-18:2]	902.8 → 605.5	TG(54:3) [NL-18:1] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	5.4	<1
TG(54:3) [SIM]	902.8 → 902.8	TG(54:3) [NL-18:1] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.7	<1
TG(54:4) [NL-18:2]	900.8 → 603.5	TG(54:4) [NL-18:2] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	4.3	<1
TG(54:4) [NL-20:3]	900.8 → 577.5	TG(54:4) [NL-18:2] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.9	<1
TG(54:4) [SIM]	900.8 → 900.8	TG(54:4) [NL-18:2] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.0	<1
TG(54:5) [NL-18:3]	898.8 → 603.5	TG(54:5) [SIM] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.6	<1
TG(54:5) [NL-20:4]	898.8 → 577.5	TG(54:5) [SIM] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.3	<1
TG(54:5) [SIM]	898.8 → 898.8	TG(54:5) [SIM] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.4	<1
TG(54:6) [NL-18:3]	896.8 → 601.5	TG(54:6) [SIM] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.0	<1
TG(54:6) [NL-20:4]	896.8 → 575.5	TG(54:6) [SIM] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.0	<1
TG(54:6) [NL-20:5]	896.8 → 577.5	TG(54:6) [SIM] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.8	<1
TG(54:6) [NL-22:6]	896.8 → 551.5	TG(54:6) [SIM] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.1	<1
TG(54:6) [SIM]	896.8 → 896.8	TG(54:6) [SIM] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.2	<1
TG(54:7) [NL-20:5]	894.8 → 575.5	TG(54:7) [NL-22:6] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.7	<1
TG(54:7) [NL-22:6]	894.8 → 549.5	TG(54:7) [NL-22:6] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.5	<1
TG(54:7) [SIM]	894.8 → 894.8	TG(54:7) [NL-22:6] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.1	<1
TG(56:6) [NL-20:4]	924.8 → 603.5	TG(56:6) [SIM] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	6.3	<1
TG(56:6) [NL-22:5]	924.8 → 577.5	TG(56:6) [SIM] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.2	<1

화합물 명칭	전환	시간 참조 화합물	ISTD 화합물	감응 계수	%CV ¹	% 백그라운드 ²
TG(56:6) [SIM]	924.8 → 924.8	TG(56:6) [SIM] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.5	<1
TG(56:7) [NL-20:4]	922.8 → 601.5	TG(56:7) [SIM] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.6	<1
TG(56:7) [NL-20:5]	922.8 → 603.5	TG(56:7) [SIM] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.9	<1
TG(56:7) [NL-22:5]	922.8 → 575.5	TG(56:7) [SIM] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.6	<1
TG(56:7) [NL-22:6]	922.8 → 577.5	TG(56:7) [SIM] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.1	<1
TG(56:7) [SIM]	922.8 → 922.8	TG(56:7) [SIM] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.2	<1
TG(56:8) [NL-20:4]	920.8 → 599.5	TG(56:8) [NL-22:6] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.2	<1
TG(56:8) [NL-20:5]	920.8 → 601.5	TG(56:8) [NL-22:6] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.7	<1
TG(56:8) [NL-22:6]	920.8 → 575.5	TG(56:8) [NL-22:6] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.4	<1
TG(56:8) [SIM]	920.8 → 920.8	TG(56:8) [NL-22:6] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.3	<1
TG(56:9) [NL-22:6]	918.8 → 573.5	TG(56:9) [NL-22:6] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.1	<1
TG(56:9) [SIM]	918.8 → 918.8	TG(56:9) [NL-22:6] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.6	57.34
TG(58:10) [NL-22:6]	944.9 → 599.5	TG(58:10) [NL-22:6] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.7	<1
TG(58:10) [SIM]	944.9 → 944.9	TG(58:10) [NL-22:6] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.2	<1
TG(58:8) [NL-22:6]	948.8 → 603.5	TG(58:8) [NL-22:6] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.8	<1
TG(58:9) [NL-22:6]	946.9 → 601.5	TG(58:9) [SIM] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	4.0	<1
TG(O-50:1) [NL-15:0]	836.8 → 577.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	6.0	<1
TG(O-50:1) [NL-16:0]	836.8 → 563.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.1	<1
TG(O-50:1) [NL-17:1]	836.8 → 551.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	7.8	<1
TG(O-50:1) [NL-18:1]	836.8 → 537.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.9	<1
TG(O-50:1) [SIM]	836.8 → 836.8	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.6	<1
TG(O-50:2) [NL-16:1]	834.8 → 563.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	5.5	12.07
TG(O-50:2) [NL-18:1]	834.8 → 535.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	4.6	<1
TG(O-50:2) [NL-18:2]	834.8 → 537.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	7.0	<1
TG(O-50:2) [SIM]	834.8 → 834.8	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.1	35.14
TG(O-52:0) [NL-16:0]	866.8 → 593.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	8.3	2.04
TG(O-52:1) [NL-16:0]	864.8 → 591.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.3	<1
TG(O-52:1) [NL-18:1]	864.8 → 565.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.7	<1
TG(O-52:1) [SIM]	864.8 → 864.8	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.5	<1
TG(O-52:2) [NL-16:0]	862.8 → 589.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	4.5	<1
TG(O-52:2) [NL-17:1]	862.8 → 577.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	5.6	<1
TG(O-52:2) [NL-18:1]	862.8 → 563.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	4.7	<1
TG(O-52:2) [SIM]	862.8 → 862.8	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.3	<1
TG(O-54:2) [NL-17:1]	890.8 → 605.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.7	<1
TG(O-54:2) [NL-18:1]	890.8 → 591.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.0	<1
TG(O-54:2) [SIM]	890.8 → 890.8	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.3	<1
TG(O-54:3) [NL-17:1]	888.8 → 603.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	7.4	<1
TG(O-54:3) [NL-18:1]	888.8 → 589.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	4.0	<1
TG(O-54:4) [NL-17:1]	886.8 → 601.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	11.7	<1
TG(O-54:4) [NL-18:2]	886.8 → 589.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	5.6	<1
Ubiquinone	880.7 → 197.0	Ubiquinone [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.3	<1

¹ %CV는 50개의 순차적으로 주입된 TQC에서 각 지질 종 농도에 대해 계산되었습니다.

² % 백그라운드는 동일한 LC/MS 배치 내 평균 NIST1950 농도의 백분율로 표시되는 바탕 시료 농도 중앙값입니다.

www.agilent.com/chem

연구 용도로만 사용하십시오. 진단 용도로는 사용하지 않습니다.

RA44413.1612962963

이 정보는 사전 고지 없이 변경될 수 있습니다.

© Agilent Technologies, Inc. 2021
2021년 9월 23일, 한국에서 인쇄
5994-3747KO

한국애질런트테크놀로지스(주)
대한민국 서울특별시 서초구 강남대로 369,
A+ 에셋타워 9층, 06621
전화: 82-80-004-5090 (고객지원센터)
팩스: 82-2-3452-2451
이메일: korea-inquiry_lsca@agilent.com

