

メタボロミクスを活用した肝細胞における中鎖脂肪酸代謝物解析

伏見, 達也

<https://hdl.handle.net/2324/4474950>

出版情報 : Kyushu University, 2020, 博士 (理学), 課程博士
バージョン :
権利関係 :



博士論文

メタボロミクスを活用した肝細胞における
中鎖脂肪酸代謝物解析

2020 年 12 月

九州大学大学院 システム生命科学科
システム生命科学専攻 生命医科学講座
メタボロミクス分野

伏見 達也

目次

略称.....	3
第一章 緒論.....	6
1.1. 中鎖脂肪酸と中鎖脂肪酸油.....	6
1.2. 中鎖脂肪酸の消化・吸収・代謝.....	8
1.3. 中鎖脂肪酸の活用.....	11
1.4. 肝臓を対象とした中鎖脂肪酸研究の課題.....	12
1.5. 本研究の目的.....	13
第二章 親水性・疎水性代謝物解析による肝細胞における MCFA 代謝評価.....	14
2.1. 緒言.....	14
2.2. 実験方法.....	15
2.2.1. 試薬および実験材料.....	15
2.2.2. 細胞培養.....	16
2.2.3. 培地, 細胞の回収およびメタボローム分析サンプル調製.....	17
2.2.4. 親水性代謝物解析.....	19
2.2.5. 疎水性代謝物解析.....	21
2.2.6. 細胞生存率測定.....	24
2.2.7. ケトン体測定.....	24
2.2.8. FA 測定.....	24
2.2.9. グルコース測定.....	25
2.2.10. 統計解析.....	25
2.3. 結果と考察.....	25
2.3.1. MCFAs, LCFAs を添加した AML12 細胞の表現型解析.....	25
2.3.2. AML12 細胞内代謝物の代謝プロファイリング.....	27
2.3.3. 個々の FA 添加後の AML12 細胞内脂質の定量評価.....	33
2.4. 小括.....	42

第三章 ^{13}C 標識脂肪酸を用いた動的メタボローム解析による MCFA 代謝動態評価	44
3.1. 緒言	44
3.2. 実験方法	48
3.2.1. 試薬および実験材料	48
3.2.2. 細胞培養	49
3.2.3. 培地, 細胞の回収およびメタボローム分析サンプル調製	49
3.2.4. 親水性代謝物解析	51
3.2.5. 疎水性代謝物解析	51
3.2.6. 標識化率の算出	52
3.2.7. 統計解析	52
3.3. 結果と考察	53
3.3.1. 個々の FA 添加後の AML12 細胞の代謝ターンオーバー解析	53
3.4. 小括	63
第四章 総括と展望	65
謝辞	67
引用文献	68
論文目録	77
補足資料	78

略称

略号	名称	和名
AcAc	acetoacetate	アセト酢酸
acyl-CoA	acyl-coenzyme A	アシル補酵素 A
Ala	alanine	アラニン
ALT	alanine aminotransferase	アラニンアミノトランスフェラーゼ
AML12	alpha mouse liver 12	
Arg	arginine	アルギニン
Asn	asparagine	アスパラギン
Asp	aspartic acid	アスパラギン酸
AST	aspartate aminotransferase	アスパラギン酸アミノトランスフェラーゼ
ATCC	American Type Culture Collection	アメリカン・タイプ・カルチャー・コレクション
Cer	ceramide	セラミド
Chol	cholesterol	コレステロール
ChE	cholesterol ester	コレステロールエステル
Cit	citrate	クエン酸
CoA	coenzyme A	補酵素 A
CPT1	carnitine palmitoyltransferase 1	カルニチンパルミトイルトランスフェラーゼ 1
DEA	diethylamine	ジエチルアミン
DG	diacylglycerol	ジアシルグリセロール
DHAP	dihydroxyacetone phosphate	ジヒドロキシアセトンリン酸
DMEM	Dulbecco's modified Eagle's medium	ダルベッコ改変イーグル培地
F6P	fructose 6-phosphate	フルクトース 6-リン酸
FA	fatty acid	脂肪酸
FA 4:0	butyric acid	酪酸
FA 6:0	hexanoic acid	ヘキサン酸
FA 8:0	octanoic acid	オクタン酸
FA 10:0	decanoic acid	デカン酸
FA 12:0	lauric acid	ラウリン酸
FA 14:0	myristic acid	ミリスチン酸
FA 16:0	palmitic acid	パルミチン酸
FA 18:1	oleic acid	オレイン酸
FBP	fructose 1,6-bisphosphate	フルクトース 1,6-ビスリン酸
FDR	false discovery rate	

Fum	fumalate	フマル酸
G1P	glucose 1-phosphate	グルコース 1-リン酸
G3P	glucose 3-phosphate	グルコース 3-リン酸
G6P	glucose 6-phosphate	グルコース 6-リン酸
GAP	glyceraldehyde 3-phosphate	グリセルアルデヒド 3-リン酸
Gln	glutamic acid	グルタミン酸
Glu	glutamine	グルタミン
His	histidine	ヒスチジン
HMG-CoA	hydroxymethylglutaryl-CoA	ヒドロキシメチルグルタリル-CoA
IC/HRMS/MS	ion chromatography high-resolution tandem mass spectrometry	イオンクロマトグラフィータンデム質量分析
Ile	isoleucine	イソロイシン
Isocit	isocitrate	イソクエン酸
LCFAs	long-chain fatty acids	長鎖脂肪酸
LCTs	long-chain triacylglycerols	長鎖トリアシルグリセロール
Leu	leucine	ロイシン
LPA	lysophosphatidic acid	リゾホスファチジン酸
LPC	lysophosphatidylcholine	リゾホスファチジルコリン
LPE	lysophosphatidylethanolamine	リゾホスファチジルエタノールアミン
LPG	lysophosphatidylglycerol	リゾホスファチジルグリセロール
LPI	lysophosphatidylinositol	リゾホスファチジルイノシトール
LPS	lysophosphatidylserine	リゾホスファチジルセリン
Lys	lysine	リシン
Mal	malate	リンゴ酸
MCFAs	medium-chain fatty acids	中鎖脂肪酸
MCTs	medium-chain triacylglycerols	中鎖トリアシルグリセロール
Met	methionine	メチオニン
MG	monoacylglycerol	モノアシルグリセロール
MRM	multiple reaction monitorin	多重反応モニタリング
MS	mass spectrometry	質量分析
NMR	nuclear magnetic resonance	核磁気共鳴
Orn	ornithine	オルニチン
Oxa	oxaloacetate	オキサロ酢酸
PA	phosphatidic acid	ホスファチジン酸
PC	phosphatidylcholine	ホスファチジルコリン
PCA	principal component analysis	主成分分析
PE	phosphatidylethanolamine	ホスファチジルエタノールアミン
PEP	phosphoenolpyruvate	ホスホエノールピルビン酸
PFPP	pentafluorophenylpropyl	ペンタフルオロフェニルプロピル
PG	phosphatidylglycerol	ホスファチジルグリセロール

Phe	phenylalanine	フェニルアラニン
PI	phosphatidylinositol	ホスファチジルイノシトール
PLA ₂	phospholipase A	ホスホリパーゼ A ₂
Pro	proline	プロリン
PS	phosphatidylserine	ホスファチジルセリン
RT	retention time	保持時間
SCFA	short-chain fatty acid	短鎖脂肪酸
SCOT	succinyl-CoA: 3-ketoacid-CoA transferase	スクシニル-CoA: 3-ケト酸 CoA トランスフェラーゼ
Ser	serine	セリン
SFC	supercritical fluid chromatography	超臨界流体クロマトグラフィー
SFC/TQMS	supercritical fluid chromatography triple quadrupole mass spectrometry	超臨界流体クロマトグラフィー三連四重極型質量分析
SM	sphingomyelin	スフィンゴミエリン
Suc	succinate	コハク酸
TG	triacylglycerol	トリアシルグリセロール
Thr	threonine	スレオニン
Trp	tryptophan	トリプトファン
Tyr	tyrosine	チロシン
Val	valine	バリン
VLDL	very low density lipoprotein	超低密度リポタンパク質
2-KG	2-ketoglutarate	2-ケトグルタル酸
2-PGA	2-phosphoglyceric acid	2-ホスホグリセリン酸
3-HB	3-hydroxybutyric acid	3-ヒドロキシ酪酸
3-PGA	3-phosphoglyceric acid	3-ホスホグリセリン酸

第一章 緒論

1.1. 中鎖脂肪酸と中鎖脂肪酸油

食用油脂はほとんどの場合、動物性・植物性に関わらず 1 分子のグリセロールと 3 分子の脂肪酸から構成されたトリアシルグリセロール (triacylglycerol, TG) の形態をとる。食用油脂中の TG においては、炭素鎖が 14 以上の長鎖脂肪酸 (long-chain fatty acids, LCFAs) から構成された長鎖脂肪酸油 (long-chain triacylglycerols, LCTs) が多くを占める。炭素鎖が 6-12 の脂肪酸は広義には中鎖脂肪酸 (medium-chain fatty acids, MCFAs) と呼ばれ、ココナッツ油やパーム核油中に、多くは中鎖脂肪酸油 (medium-chain triacylglycerols, MCTs) として天然に存在する (表 1-1)。ココナッツ油中の TG の約半分はラウリン酸 (lauric acid, FA 12:0) から構成されている一方で、商業用の MCTs は主にオクタン酸 (octanoic acid, FA 8:0) とデカン酸 (decanoic acid, FA 10:0) で構成されており¹, 1950 年代に Babayan によって製造方法が確立された² (図 1-1)。

MCFAs は LCFAs と比較して化学的、物理的特性の面で大きな違いが存在する。MCFAs は LCFAs と比較して融点が低い。また、一般的な食用油は炒め物や揚げ物などの加熱調理に使用される場合が多いが、MCTs は発煙点が低いため、加熱調理には適していない。そこで、MCFAs と LCFAs で構成された中長鎖脂肪酸油 (medium-long-chain triacylglycerols, MLCTs) の構造をとることで、発煙点が上昇し、泡立ちが抑制されることで調理適性が付加されている^{3,4}。また、MCTs は一般的な食用油と比べて粘度が低く、流動性や溶解性の点で異なる特性を持っているため、潤滑油や香料の抽出溶媒等の工業用途でも活用されている。

表 1-1. 主な食用植物油脂の脂肪酸組成^a

FA (%)	ココナッツ油	パーム核油	パーム油	大豆油	菜種油	ごま油	コーン油
FA 6:0	0.4	0.2	-	-	-	-	-
FA 8:0	5.8	2.8	-	-	-	-	-
FA 10:0	5.3	3.0	0.0	-	-	-	-
FA 12:0	47.5	47.2	0.3	-	-	-	-
FA 14:0	19.0	16.3	1.0	0.0	0.0	-	-
FA 16:0	9.9	8.9	44.0	10.6	4.1	9.4	11.5
FA 16:1	-	-	0.2	0.0	0.2	0.1	0.0
FA 18:0	3.1	2.7	4.5	4.1	1.7	5.8	1.8
FA 18:1	7.2	16.3	39.7	23.3	63.5	40.4	30.9
FA 18:2	1.7	8.9	9.6	53.7	19.3	43.1	53.5
FA 18:3	-	-	0.2	7.2	9.0	0.3	1.3

日本油脂検査協会 令和元年度食用植物油脂の脂肪酸組成より抜粋・改編

^a 0.0 は 0.1%未満を示す.

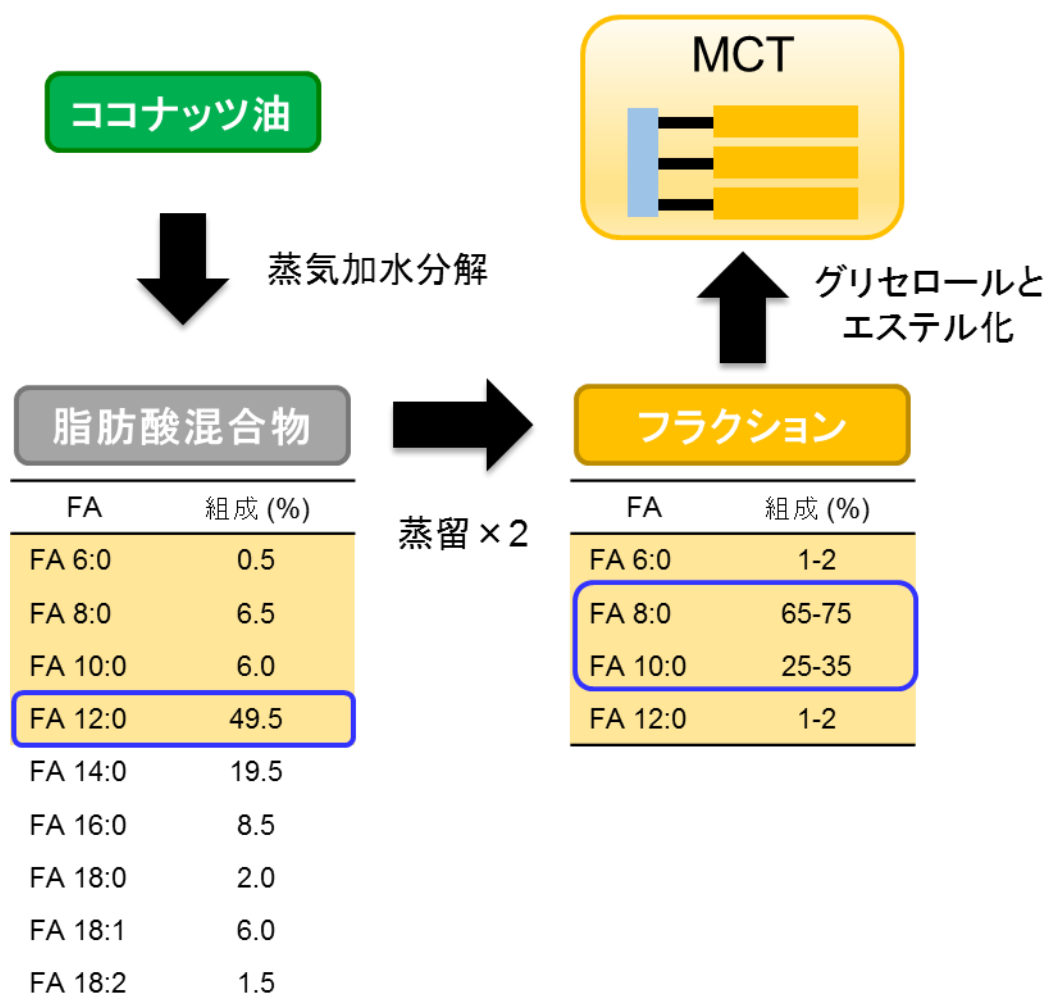


図 1-1. MCTs の製造法

Senior JR, *Medium Chain Triglycerides*. Philadelphia, PA: University of Pennsylvania Press (1968) より抜粋・改編

1.2. 中鎖脂肪酸の消化・吸収・代謝

MCTs は LCTs と比較して、物性面に限らず、摂取時の消化・吸収・代謝の面においても大きく異なる性質を持つ。LCTs は、舌リパーゼや胃リパーゼによる加水分解はごくわずかなため、胃内では LCTs のほとんどは TG の形態で存在し、腸管に送達された後に膵リパーゼによってグリセロール骨格の 1,3 位のエステル結合が加水分解され、2-モノアシルグリセロール (2-monoacylglycerol, 2-MG) と脂肪酸 (fatty acids, FAs) が産生される⁵。2-MGs と FAs は胆汁酸に乳化されることでミセルを形成し、小腸内

腔から小腸上皮細胞内に取り込まれる。小腸上皮細胞で TG として再合成された後に、リポタンパク質となってリンパ管を通り、血流に乗って全身へと輸送される。血液中の TG は全身を巡る過程でリポタンパク質リパーゼの作用によって加水分解される。遊離した FAs は末梢組織へ取り込まれ、骨格筋や心臓では分解されてエネルギーとなり、脂肪組織では蓄積される。

一方、MCTs は、LCTs と比較して、舌リパーゼ、胃リパーゼによって加水分解されやすく、加水分解時にグリセロール骨格の 1,3 位のみではなく 2 位についても加水分解される^{6,7}。そのため、MCTs は腸管内ではほぼ完全にグリセロールと MCFA s に消化され、また MG はほとんど存在しないことから貯蔵中性脂質である TG に再合成されにくい性質を有する⁸。さらに、MCFA s は鎖長が短いため胆汁酸によるミセル形成を必要とせずに小腸内腔から小腸上皮細胞に吸収され、門脈を通じて肝臓に直接運ばれやすいと考えられている^{9,10} (図 1-2)。

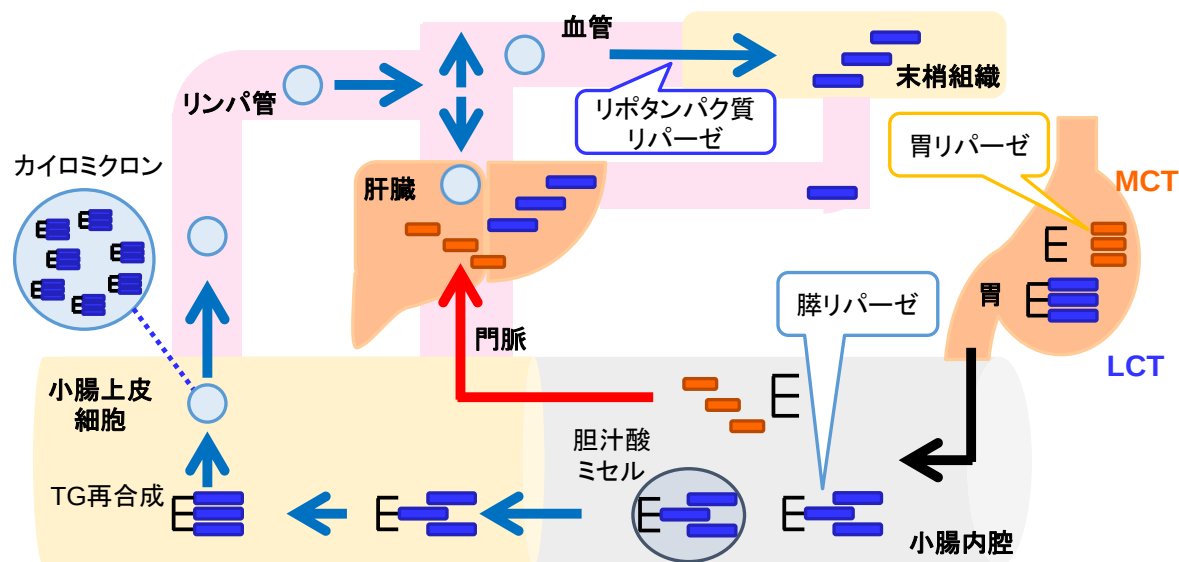


図 1-2. MCTs の消化・吸収

肝臓では、LCFA s はミトコンドリアに入る前に細胞質でアシル-CoA に変換される必要がある。カルニチンパルミトイルトランスフェラーゼ 1 (carnitine palmitoyltransferase 1, CPT1) はミトコンドリア外膜に局在するβ酸化の律速酵素であ

り、長鎖アシル-CoA を長鎖アシルカルニチンに変換し、ミトコンドリアに輸送する。ラット肝の灌流試験において、CPT1 阻害剤を添加すると、オレイン酸 (oleic acid, FA 18:1) の β 酸化は阻害された一方で、FA 8:0 の β 酸化は阻害されなかったという報告から、肝臓に送り込まれた MCFAs の大部分はカルニチンを介さずに直接ミトコンドリア内膜を通過すると言われている¹¹。したがって、肝臓に送り込まれた MCFAs は LCFAs よりも β 酸化によるアセチル-CoA への変換速度が速くアセチル-CoA 産生が亢進すると考えられている¹²。 β 酸化によって生成されたアセチル-CoA はクエン酸回路に供給されエネルギー産生に使用されるが、肝臓に大量のアセチル-CoA が存在すると 3-ヒドロキシ酪酸 (3-hydroxybutyric acid, 3-HB) やアセト酢酸 (acetoacetate, AcAc) といったケトン体の産生が亢進することも知られている¹³。ラットから単離した肝細胞を用いた研究では、MCFAs 添加でケトン体が増加することが確認されている¹⁴。同様にヒトでの研究においても長期の MCT 摂取により、血中のケトン体量が増加することが知られている¹⁵。ケトン体は絶食や飢餓状態など糖質が不足する場合に肝臓で産生される物質である。肝臓はケトン体を合成するヒドロキシメチルグルタリル-CoA シンターゼ (hydroxymethylglutaryl-CoA synthase) の活性は高いが、ケトン体を代謝するスクシニル-CoA:3-ケト酸 CoA トランスフェラーゼ (succinyl-CoA:3-ketoacid-CoA transferase, SCOT) の活性が低いと言われている。そのため、ケトン体は速やかに脳、筋肉、心臓など肝臓以外の末梢組織に運ばれ利用される点から、グルコース代替のエネルギー源として注目されている^{16,17}。

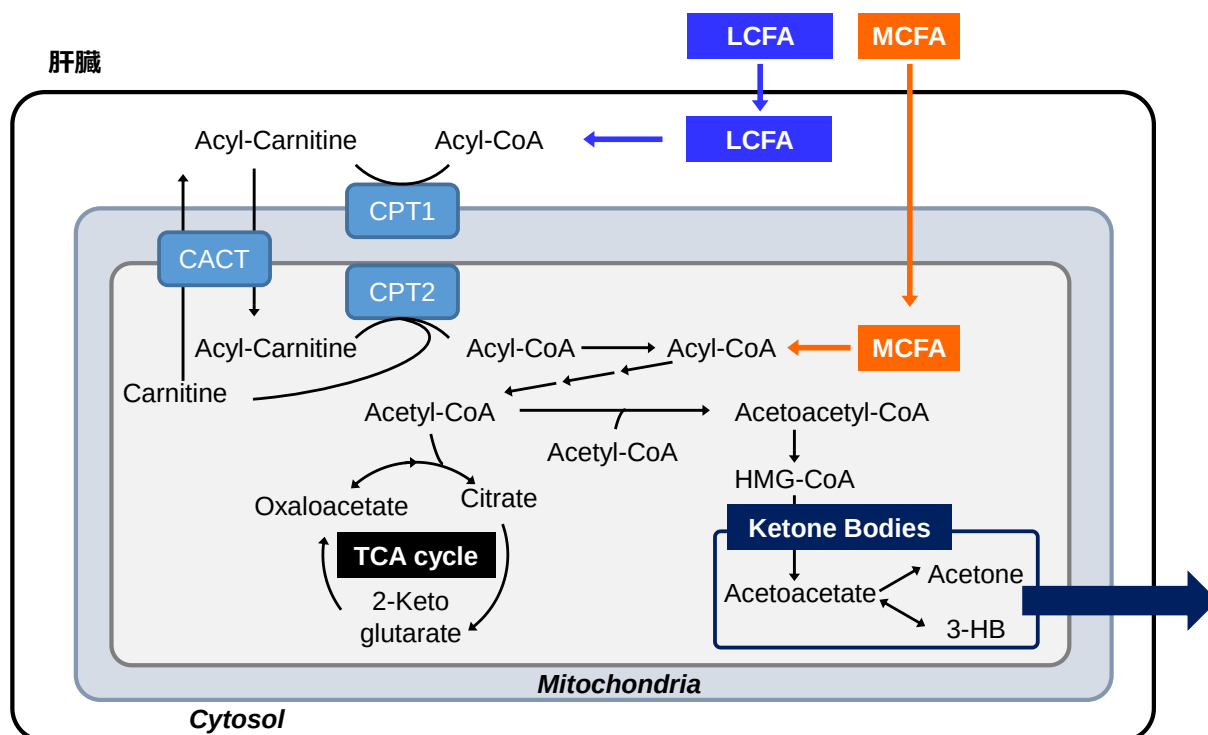


図 1-3. MCFA のβ酸化

1.3. 中鎖脂肪酸の活用

MCTs は、1.2.で述べた特性から様々な臨床領域で研究・活用されてきた。MCTs の製造方法が確立された 1950 年代では、MCTs の特徴的な消化・吸収特性から吸収障害を持つ患者に対する食事療法として活用され始め、その後も栄養補給を目的とした未熟児の粉ミルクや治療食の分野で利用されてきた^{18,19}。1990 年代から 2000 年代にかけて、MCTs 摂取による抗肥満作用が注目され始めた。この年代に実施された、3 週間以上 MCT を含む食事を摂取した健常者を対象とした臨床試験のメタ解析では、MCTs または MCFAs を含む油脂を摂取することで、体重、体脂肪抑制効果を示す報告がなされている²⁰。その一例として、Tsuji らは健常者を対象に 1 日 10 g の MCT 摂取による影響を評価した。その結果、LCT と比較して体重や体脂肪を減少させることをヒト試験で初めて示した¹⁵。近年では、先述したケトン体産性能が注目されており、以前から適用されていた難治性てんかん患者に対する食事療法に加え、アルツハイマー型認知症に代表される他の神経疾患に対する食事療法にも活用されている^{21,22}。ま

た、難治性てんかん患者に対する治療法として使用されていた、MCT を含むケトン食（低炭水化物・高脂肪食）を用いた食事療法を進行性のがん患者に適用し、有望な支持療法となる可能性も示されている²³。

1.4. 肝臓を対象とした中鎖脂肪酸研究の課題

従来、MCFAs の肝臓内での代謝研究は、主に肝細胞を用いた *in vitro* で実施されてきた。例えば、FA 8:0, FA 10:0, FA 18:1 を添加した LO2 細胞に対して遺伝子発現解析を行った結果、FA 18:1 と比較して FA 8:0, FA 10:0 の添加は、脂質合成関連遺伝子発現が下方制御され、脂質分解関連遺伝子発現が上方制御されることで TG 蓄積を抑制するという報告がなされている²⁴。パルミチン酸 (palmitic acid, FA 16:0) とヘキサン酸 (hexanoic acid, FA 6:0), FA 8:0, FA 10:0 を添加した HepG2 細胞を用いた試験においては、FA 16:0 処理は脂質合成関連遺伝子の発現を上方制御する一方で、MCFAs 処理では脂質合成関連遺伝子発現に有意な変化を与えないと報告されている²⁵。一方で、鶏初代培養肝細胞を用いた試験では、FA 8:0 添加による肝細胞内での TG 蓄積は観察されず、細胞外への超低密度リポタンパク質 (very low density lipoprotein, VLDL) -TG の分泌が低下するという報告がなされている²⁶。しかしながら、これらの試験では MCFAs の肝代謝の一部についての報告に留まっており、代謝物に関する定量的な機能解析はなされておらず、MCFAs 代謝の全容、代謝運命に関しては十分な解明には至っていない。また、個々の MCFA の特性についてもすべてが明らかにされているわけではない。

従来の研究では一部の代謝経路に焦点を当てた評価がなされていたが、栄養状態や疾患に応じて MCFAs の組成比率や TG 構造を調整した MCT や MCFAs を含む油脂の提供を可能にするためには、MCFA/LCFA 間、MCFA 種間の包括的かつ定量的な代謝評価が求められる。

1.5. 本研究の目的

本研究では、肝細胞として AML12 (alpha mouse liver 12) 細胞を用いて、MCFAs および LCFAs で処理した AML12 細胞の代謝物を種々のメタボローム解析技術を駆使して、包括的、定量的および動的に評価することで、MCFAs の代謝運命を明らかにすることを目的とした。第二章では、各 FAs で処理した AML12 細胞の親水性代謝物と疎水性代謝物を複数のクロマトグラフィー質量分析法を用いて包括的かつ定量的に解析し、取得した代謝プロファイルから MCFA/LCFA 間、MCFA 種間の代謝評価を実施した。第三章では、MCFA の代謝動態を観察するために、安定同位体でラベリングした FA を用いて AML12 細胞を処理し、代謝ターンオーバー解析を実施した。

第二章 親水性・疎水性代謝物解析による肝細胞における MCFA 代謝評価

2.1. 緒言

近年、肝細胞代謝に対する MCFAs の影響を評価するためにメタボロミクス（代謝物の総体解析）が用いられている。Najbjerg らは、核磁気共鳴（nuclear magnetic resonance, NMR）により、短鎖脂肪酸（short-chain fatty acid, SCFA）に分類される酪酸（butyric acid, FA 4:0）、MCFAs（FA 6:0, FA 12:0）、LCFAs に分類されるミリスチン酸（myristic acid, FA 14:0）と FA 16:0 を含む様々な FA が HepG2 細胞の細胞内代謝物に与える影響について評価した²⁷。¹H NMR で観察された 2385 のスペクトルに基づいた主成分分析（principal component analysis, PCA）から、添加した FA の分子種（SCFA, MCFAs および LCFAs）に対応する 3 つのクラスターが確認された。しかしながら、これらの結果からは肝代謝の質的および量的変化に関する詳細な考察は得られなかった。別の研究では、質量分析（mass spectrometry, MS）に基づく親水性代謝プロファイリングにより AML12 細胞代謝に対する FA 8:0 の影響を評価し、FA 8:0 の添加が細胞内クエン酸回路中間体および細胞外ケトン体の含有量を増加させることを示した²⁸。しかしながら、LCFAs と比較した MCFAs の代謝機能、および MCFA 種間の代謝機能については議論されておらず、疎水性代謝物（脂質）の分析は実施されていない。そのため、従来までの *in vitro* 代謝研究では FA 8:0, FA 10:0, FA 12:0 の分子種の違いが肝細胞代謝に与える影響を LCFAs と比較しながら包括的かつ定量的に評価できていない。

そこで本章では、まず、MCFAs と LCFAs を AML12 細胞に添加した際の表現型解析を実施した。その後、当研究室で開発してきた親水性代謝物および疎水性代謝物のワイドターゲットメタボローム分析法を用いた代謝プロファイリングから、AML12 細胞における MCFAs（FA 8:0, FA 10:0, FA 12:0）と LCFA との代謝の違い、MCFA 種間

での違いを評価することで MCFAs の代謝全容を明らかにすることを目的とした。

2.2. 実験方法

2.2.1. 試薬および実験材料

25 mM グルコース含有 Dulbecco's modified Eagle's medium (DMEM), Ham's F-12 Nutrient Mixture, ペニシリン-ストレプトマイシン溶液 (10000 U/mL ペニシリン, 10000 µg/mL ストレプトマイシン), リン酸緩衝生理食塩水 (phosphate-buffered saline, PBS), およびトリプシン-EDTA 溶液 (0.25% (w/v)トリプシン, 1 mM EDTA) は Thermo Fisher Scientific (Waltham, MA, USA) から購入した。ウシ胎児血清 (Fetal bovine serum, FBS), LC/MS グレードの酢酸アンモニウム, FA 8:0 (純度 ≥99.5%), FA 10:0 (純度 ≥99.5%), FA 12:0 (純度 ≥99.5%), FA 16:0 (純度 ≥99.0%), FA 18:1 (純度 ≥99.0%) は Merck (Darmstadt, Germany) から購入した。脂肪酸フリーのウシ血清アルブミン (bovine serum albumin, BSA) および HPLC-グレードのクロロホルムは、ナカライテスク株式会社 (京都, 日本) から購入した。ジメチルスルホキシド (dimethyl sulfoxide, DMSO) および LC/MS グレードのギ酸は、富士フイルム和光純薬株式会社 (大阪, 日本) から購入した。LC/MS グレードの水, アセトニトリル, メタノール, イソプロパノールは 関東化学株式会社 (東京, 日本) から購入した。超臨界流体クロマトグラフィー (supercritical fluid chromatography, SFC) 移動相には二酸化炭素 (99.9%グレード, 吉田酸素株式会社, 福岡, 日本)を使用した。内部標準物質として使用した *n*-propionyl coenzyme A (3:0-CoA) リチウム塩, および 10-camphorsulfonic acid (純度 99.0%) は Merck から購入した。Mouse SPLASH Lipidomix Mass Spec Standard, MG 18:1 (d₇), および cholesterol (d₇) は Avanti Polar Lipids Inc. (Alabaster, AL, USA) から購入した。¹³C₁₆-パルミチン酸 (¹³C₁₆-FA 16:0, 純度 98.0%) は, Cambridge Isotope Laboratories Inc. (Tewksbury, MA, USA) から購入した。

親水性代謝物および疎水性代謝物同定のためのその他標準物質は, Merck, ナカライテスク株式会社, 富士フイルム和光純薬工業株式会社, および Avanti Polar Lipids Inc.

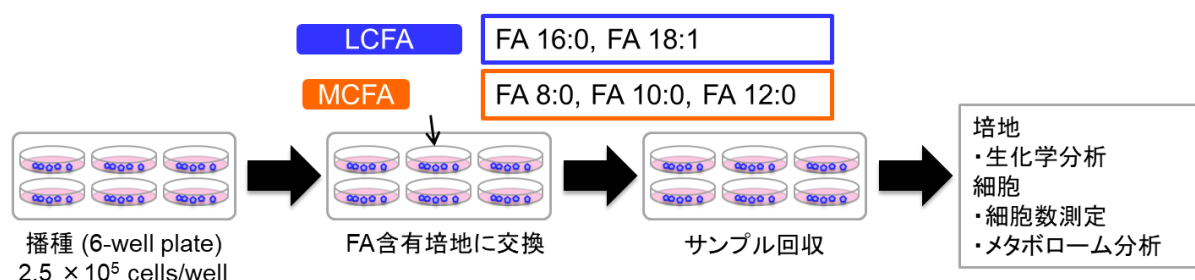
から購入した.

2.2.2. 細胞培養

AML12 細胞 (ATCC, Manassas, VA) は 10% (v/v) FBS および 1% (v/v) ペニシリン-ストレプトマイシン溶液を添加した DMEM/Ham's F-12 Nutrient Mixture 混合培地 (1/1, v/v) (培地 1) を用いて, 150 mm ディッシュ (Corning Inc., NY, USA) で培養した. 培養ディッシュは, ウォータージャケット CO₂ インキュベーター (WCI-165, アステック株式会社, 福岡, 日本) 中で, 37 °C, 5% CO₂ の環境下で培養した. 培養した AML12 細胞は, 80-90% コンフルエントの状態トリプシン-EDTA 溶液で処理後, 剥離した. トリプシン-EDTA 処理した AML12 細胞を 15 mL ファルコンチューブに採取し, 240 ×g, 4°C, 5 分間の条件でスイング式ローターを用いた遠心分離によって培地を除去した. 得られた細胞ペレットを 1 mL の PBS で 3 回洗浄後, 洗浄した細胞ペレットを PBS に再懸濁した. 細胞懸濁液をセルカウンター (Moxi Z, ASONE 株式会社, 大阪, 日本) を用いて計測後, 1×10^4 または 2.5×10^5 個の細胞を, 10% (v/v) FBS および 1% (v/v) ペニシリン-ストレプトマイシン溶液を添加した DMEM 培地 (培地 2) を含む 24-ウェルプレート (Corning Inc.) または 6-ウェルプレート (Corning Inc.) にそれぞれ移した. 各 FA (FA 8:0, FA 10:0, FA 12:0, FA 16:0, FA 18:1) は最終濃度が 500 mM となるように DMSO に溶解した. 1% (w/v) 脂肪酸フリーBSA を添加した DMEM 培地を 0.20 μm シリンジフィルター (Merck Millipore, Darmstadt, Germany) を用いてろ過滅菌した. ろ過滅菌した DMEM-BSA 培地は 10% (v/v) FBS, 1% (v/v) ペニシリン-ストレプトマイシン溶液, および 0.1% (v/v) FA 溶液 (500 mM) または対象として 0.1% (v/v) DMSO と混合した (培地 3). FA 溶液を DMEM-BSA 培地に添加した段階では油滴が存在する場合があるため, FA 溶液または DMSO を添加した培地は転倒混和し, 目視で油滴が存在しないことを確認し実験に使用した.

2.2.3. 培地，細胞の回収およびメタボローム分析サンプル調製

AML12 細胞 (2.5×10^5 細胞) を 2 mL の培地 2 を含む 6-ウェルプレートで 24 時間培養した．培地 2 を培地 3 (DMSO, または 500 μ M の FA 8:0, FA 10:0, FA 12:0, FA 18:1 含有) に置換して 24 時間培養し，その後，培地および細胞を回収した．細胞培養およびサンプル回収のスキームを図 2-1 に示す．



	Seeding	Medium exchange
使用培地	培地2	培地3
Medium composition	DMEM high glucose (25 mM) medium — 10% (v/v) FBS 1% (v/v) penicillin-streptomycin solution (10000 U/mL penicillin, 10000 μ g/mL streptomycin) —	DMEM high glucose (25 mM) medium 1% (w/v) fatty acid-free BSA 10% (v/v) FBS 1% (v/v) penicillin-streptomycin solution (10000 U/mL penicillin, 10000 μ g/mL streptomycin) 0.1% (v/v) FA solution (500 mM) or 0.1% (v/v) DMSO
Incubation time	Overnight	24 時間

図 2-1. 細胞培養およびサンプル回収のスキーム

代謝物の抽出は，Bligh and Dyer 法²⁹を一部改編して実施した．以下に簡潔に示す．
培地 (~2 mL) を回収後，DMSO 処理細胞 (コントロール) または各 FA 処理した細胞を，氷上で 2 mL の PBS で 2 回洗浄し，1 mL の氷冷メタノールをプレートの各ウェルに添加した．スクレイピング処理後，細胞懸濁液 (~1 mL) を 2 mL のエッペンドルフチューブに移した．上記エッペンドルフチューブに 400 μ L のクロロホルム，20 μ L の内部標準液 A，10 μ L の内部標準液 B，10 μ L の内部標準液 C を添加し，1 分間のボルテックス処理後 5 分間の超音波処理を行った．内部標準液の詳細は以下の表 2-1

に示した．その後，16000 ×g，4 °C の条件で 5 分間遠心分離し上清 (700 μL) を新しい 2 mL エッペンドルフチューブに回収し，300 μL のクロロホルムおよび 400 μL の水を添加した後に 16000 ×g，4 °C の条件で 5 分間遠心分離をすることで水相と有機相に相分離した．上相 (水相) 500 μL を新しい 2 mL エッペンドルフチューブに移し，遠心エバポレーターにより真空下で蒸発させた後に，乾固した抽出物を親水性代謝物解析の実施まで-80 °C で保存した．分析時は，乾固した水相に 50 μL の水を添加し再溶解させた．下相 (有機相) 250 μL を別の 2 mL エッペンドルフチューブに移し，メタノールで 2 倍に希釈し疎水性代謝物解析の実施まで-80 °C で保存した．

表 2-1. 内部標準液の組成

内部標準液	標準物質	最終添加量 (nmol)
内部標準液 A (Mouse SPLASH Lipidomix Mass Spec Standard)	phosphatidylcholine (PC) 15:0–18:1 (d ₇)	2.0
	phosphatidylethanolamine (PE) 15:0–18:1 (d ₇)	0.14
	phosphatidylserine (PS) 15:0–18:1 (d ₇)	0.40
	phosphatidylglycerol (PG) 15:0–18:1 (d ₇)	0.10
	phosphatidylinositol (PI) 15:0–18:1 (d ₇)	0.40
	phosphatidic acid (PA) 15:0–18:1 (d ₇)	0.20
	lysophosphatidylcholine (LPC) 18:1 (d ₇)	0.90
	lysophosphatidylethanolamine (LPE) 18:1 (d ₇)	0.040
	cholesteryl ester (ChE) 18:1 (d ₇)	5.0
	DG 15:0–18:1 (d ₇)	0.30
	TG 15:0–18:1 (d ₇)–15:0	0.70
	sphingomyelin (SM) d18:1–18:1 (d ₉)	0.40
	ceramide (Cer) d18:1 (d ₇)–15:0	0.50
	hexosylceramide (HexCer) d18:1 (d ₅)–18:1	0.50
内部標準液 B (メタノール/クロロホルム溶液, 1/1, v/v)	FA 16:0 (¹³ C ₁₆)	0.50
	MG 18:1 (d ₇)	11
	cholesterol (d ₇)	31
	10-camphorsulfonic acid	0.90
内部標準液 C (水)	3:0-CoA	0.40

2.2.4. 親水性代謝物解析

親水性代謝物の分析は、3つの分析プラットフォームを用いて実施した (表 2-2)。

表 2-2. 親水性代謝物の分析法一覧

分析対象	分析法
アニオン性極性代謝物 (有機酸, ヌクレオチド, 3-HB 等)	IC/HRMS/MS
カチオン性極性代謝物 (アミノ酸, 塩基, ヌクレオシド等)	PFPP-LC/HRMS/MS
アシル-CoA, アシルカルニチン	metal-free C18-LC/HRMS/MS

アニオン性極性代謝物 (有機酸, ヌクレオチド, 3-HB 等) はイオンクロマトグラフィー-タンデム質量分析 (IC/HRMS/MS) で測定した^{30,31}。IC/HRMS/MS は Dionex ICS-5000⁺ HPIC system (Thermo Fisher Scientific, Waltham, MA, USA) と Q Exactive ハイブリッド四重極-オービトラップ質量分析計 (Thermo Fisher Scientific) を用いて実施した。サンプルを Q Exactive に注入する前に水酸化カリウム溶媒を水に変化するためのアニオン電解サプレッサーとして Dionex AERS 500e (Thermo Fisher Scientific) を使用した。IC 分離のガードカラムとして Dionex IonPac AG11-HC-4 μm (2 mm i.d. $\times$ 50 mm, 4 μm particle size, Thermo Fisher Scientific), 分析カラムとして Dionex IonPac AS11-HC-4 μm (2 mm i.d. $\times$ 250 mm, 4 μm particle size, Thermo Fisher Scientific) を使用した。IC/HRMS/MS の分析条件を以下に記す。注入量は 5 μL とした。カラム温度は 30 $^{\circ}\text{C}$ に設定した。移動相は水酸化カリウム (1–100 mM), ポストカラムメイクアップポンプ溶媒は 1 mM の酢酸アンモニウムを添加したメタノール溶液を使用した。移動相の流速は 0.3 mL/min, メイクアップポンプの流速は 0.1 mL/min とした。グラジエント条件は, 10–100 mM (0–24 min), 100 mM (24–27 min), 10 mM (27–35 min) に設定した。MS 条件を以下に示す。分析は正, 負イオンモードで実施した。シースガス流速は 50 arb, Aux ガス流速は 10 arb に設定した。スプレー電圧は正イオンモードで 3.5 kV, 負イオンモードで -2.0 kV に設定した。キャピラリー温度は 250 $^{\circ}\text{C}$, S レンズレベルは 50,

ヒーター温度は 400 °C に設定した。質量分解能は 70000 に設定した。Automatic gain control (AGC) target は 1×10^6 , maximum injection time は 200 ミリ秒に設定した。スキャン幅は m/z 70–1050 に設定した。

カチオン性極性代謝物 (アミノ酸、塩基、ヌクレオシド等) は PFPP-LC/HRMS/MS で測定した^{31,32}。PFPP-LC/HRMS/MS は Nexera X2 UHPLC system (株式会社島津製作所、京都、日本) と Q Exactive (Thermo Fisher Scientific) を用いて実施した。LC 分離の分析カラムとして Discovery HS F5 (2.1 mm i.d. $\times$ 150 mm, 3 μ m particle size, Merck) を使用した。PFPP-LC/HRMS/MS の分析条件を以下に記す。注入量は 2 μ L とした。カラム温度は 40 °C に設定した。移動相 A は 0.1% (v/v) ギ酸水溶液を、移動相 B はアセトニトリルを使用した。移動相の流速は 0.25 mL/min とした。グラジエント条件は、0% B (0–5 min), 0–40% B (5–15 min), 40–100% B (15–18 min), 0% B (18–25 min) に設定した。MS 条件を以下に示す。シースガス流速は 40 arb に設定した。キャピラリー温度は 350 °C, ヒーター温度は 300 °C に設定した。その他の MS 条件は IC/HRMS/MS と同条件に設定した。

アシル-CoA, アシルカルニチンの分析は metal-free C18-LC/HRMS/MS で測定した。metal-free C18-LC/HRMS/MS は LC システム (島津製作所) と Q Exactive (Thermo Fisher Scientific) を用いて実施した。LC 分離の分析カラムとして InertSustain C18 メタルフリーカラム (2.1 mm i.d. $\times$ 150 mm, 3 μ m particle size, ジーエルサイエンス株式会社、東京、日本) を使用した。C18-LC/HRMS/MS の分析条件を以下に記す。注入量は 2 μ L とした。カラム温度は 40 °C に設定した。移動相 A は 5 mM の酢酸アンモニウムを添加した水を、移動相 B はアセトニトリルを使用した。移動相の流速は 0.3 mL/min とした。グラジエント条件は、2–95% B (0–13 min), 95% B (13–20 min), 2% B (20–25 min) に設定した。MS 条件を以下に示す。分析は正イオンモードで実施した。スプレー電圧は 3.0 kV に設定した。キャピラリー温度は 300 °C, AGC target は 3×10^6 , maximum injection time は 400 ミリ秒に設定した。スキャン幅は m/z 100–1500 に設定した。その他の MS 条件は IC/HRMS/MS と同条件に設定した。

親水性代謝物の同定は、試料の保持時間 (retention time, RT), HRMS および HRMS/MS スペクトルについて、同条件で分析した標準品との比較によって実施した。親水性代謝物の定量は、HRMS プリカーサーイオンの内部標準物質 (10-camphorsulfonic acid または 3:0-CoA) に対するピーク面積を用いて算出した³³。

3 つの分析プラットフォームは LabSolutions, version 5.80 (島津製作所) と Xcalibur 4.2.47 (Thermo Fisher Scientific) で制御した。

2.2.5. 疎水性代謝物解析

疎水性代謝物である脂質分子は単純脂質、複合脂質、遊離脂肪酸に主に分類される (図 2-2)。疎水性代謝物の分析は、ターゲットとなる脂質クラスに応じて、表に示す 2 つの超臨界流体クロマトグラフィータンデム質量分析 (SFC/MS/MS) で測定した (表 2-3)。SFC/MS/MS は Nexera UC system (島津製作所) と LCMS-8060 三連四重極型質量分析計 (島津製作所) を用いて、多重反応モニタリング (multiple reaction monitoring, MRM) によって代謝物を検出した。

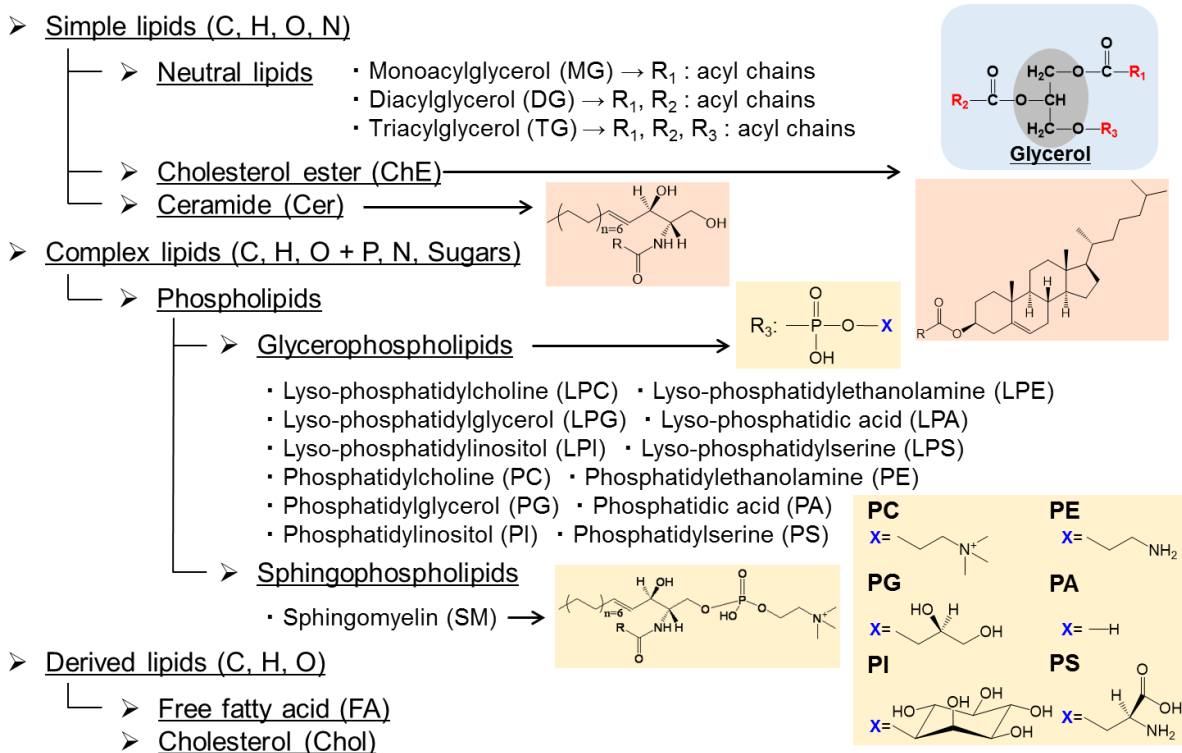


図 2-2. 脂質の分類

略号 : MG, monoacylglycerol; DG, diacylglycerol; TG, triacylglycerol; ChE, cholesterol ester; Chol, cholesterol; Cer, ceramide; LPC, lysophosphatidylcholine; LPE, lysophosphatidylethanolamine; LPG, lysophosphatidylglycerol; LPA, lysophosphatidic acid; LPI, lysophosphatidylinositol; LPS, lysophosphatidylserine; PC, phosphatidylcholine; PE, phosphatidylethanolamine; PG, phosphatidylglycerol; PA, phosphatidic acid; PI, phosphatidylinositol; PS, phosphatidylserine; SM, sphingomyelin; FA, fatty acid.

表 2-3. 疎水性代謝物の分析法一覧

分析対象	分析法
PCs, PEs, PSs, PGs, PIs, PAs, LPCs, LPEs, MGs, DGs, SMs, Cers, and HexCers	DEA-SFC/MS/MS
TGs, FAs, Chol, and ChEs	C18-SFC/MS/MS

SFC 分離のカラムとして, PCs, PEs, PSs, PGs, PIs, PAs, LPCs, LPEs, MGs, DGs, SMs, Cers および HexCers の分析は ACQUITY UPC² Torus diethylamine (DEA)

(3.0 mm i.d. × 100 mm, 1.7 µm particle size, Waters, Milford, MA, USA) (DEA)を使用し³⁴, FAs, TGs, cholesterol, ChEs の分析 ACQUITY UPC² HSS C18 SB column (3.0 mm i.d. × 100 mm, 1.8 µm particle size, Waters) (C18) を使用した³⁵. SFC/MS/MS 分析は LabSolutions, version 5.91 (島津製作所) で制御した.

DEA カラムを用いた SFC/MS/MS (DEA-SFC/MS/MS) の分析条件を以下に記す. 注入量は 2 µL とした. カラム温度は 50 °C に設定した. 移動相 A は超臨界二酸化炭素, 移動相 B とメイクアップポンプ溶媒は 0.1% (w/v) の酢酸アンモニウムを添加した混合溶媒 (メタノール/水, 95/5, v/v) を使用した. 移動相の流速は 1.0 mL/min, メイクアップポンプの流速は 0.1 mL/min とした. 背圧制御装置は 10 MPa に設定した. グラジエント条件は, 1% B (0–1 min), 1–75% B (1–24 min), 75% B (24–26 min), 1% B (26–30 min) に設定した.

MS 条件を以下に示す. 分析は正, 負イオンモードで実施した. スプレー電圧は正イオンモードで 4 kV, 負イオンモードで -3.5 kV に設定した. ネブライザーガス流量は 3.0 L/min, ドライガス流量は 10.0 L/min に設定した. DL 温度は 250 °C, ヒートブロック温度は 400 °C, 検出電圧は 2.16 kV に設定した. MRM 条件を以下に記す.

MRM トランジション数を 150, dwell time を 2 ms, pause time を 2 ms, 正負イオン化切替時間 (polarity switching time) を 5 ms に設定した. PCs, PEs, PSs, PGs, PIs, PAs, LPCs, LPEs, MGs, DGs, SMs, cholesterol, Cers, HexCers に関する他の最適化 MRM パラメータは補足表 1 に記載した.

C18 カラムを用いた SFC/MS/MS (C18-SFC/MS/MS) のグラジエント条件は 0–50% B (0–25 min), 50% B (25–28 min), 0% B (28–30 min) に設定した. FAs, TGs, cholesterol, ChEs の最適化 MRM パラメータは補足表 1 に記載した. その他の分析条件, MS 条件は DEA-SFC/MS/MS と同条件に設定した.

脂質の同定は, 各脂質分子の RT および特徴的な MRM トランジションに基づいて実施した³⁴. 脂質の絶対定量値は検量線に基づいて算出した. MRM の検量線は脂質クラスごとに安定同位体標識された内部標準物質のピーク面積とクロマトグラフィ

一で分析した分析対象物質のピーク面積を比較して、これらの標準溶液を3回分析した結果から作成した。データ処理は LabSolutions, version 5.91 (島津製作所), MRMPROBS 2.86³⁶, および Microsoft Excel 2010 を用いて実施した。

2.2.6. 細胞生存率測定

細胞生存率測定は cell counting kit-8 (CCK-8) assay (株式会社 同仁化学研究所, 熊本, 日本) で測定した。AML12 細胞を 1.0×10^4 細胞/well となるように 24-ウェルプレートに播種し, 0.5 mL の培地 2 で, 37 °C, 5% CO₂ 条件下で培養した (overnight)。

その後, 0.5 mL の培地 3 に交換して, 37 °C, 5% CO₂ 条件下で 24 時間培養した。培養後, CCK-8 溶液を各ウェルに 50 µL ずつ添加し, 37 °C, 5% CO₂ 条件下で 4 時間培養し, 450 nm の吸光度を Synergy HTX Multi-Mode Reader (BioTek Instruments Inc, Winooski, VT, USA) で測定した。

2.2.7. ケトン体測定

培地中の総ケトン体量は, オートワコー総ケトン体 (富士フイルム和光純薬工業) を用いて測定した。培養後の培地 8 µL を 96-ウェルプレートに移し, 135 µL のチオ-NAD 溶液を添加し, 37 °C で 5 分間静置した。次に, 45 µL の酵素溶液を各ウェルに添加し, 37 °C で 5 分間静置後, 405 nm と 600 nm の吸光度を Synergy HTX Multi-Mode Reader (BioTek Instruments Inc) で測定した。

2.2.8. FA 測定

培地中の FA 量は, NEFAC-テストワコー (富士フイルム和光純薬工業) を用いて測定した。培養後の培地 4 µL を 96-ウェルプレートに移し, 60 µL の発色剤 A を添加し, 37 °C で 10 分間静置した。次に, 120 µL の発色剤 B を各ウェルに添加し, 37 °C で 10 分間静置後, 550 nm の吸光度を Synergy HTX Multi-Mode Reader (BioTek Instruments Inc) で測定した。

2.2.9. グルコース測定

培地中のグルコース量は、グルコース CII-テストワコー (富士フイルム和光純薬工業) を用いて測定した。培養後の培地 2 μ L を 96-ウェルプレートに移し、150 μ L の発色剤を添加し、37 °C で 5 分間静置した。505 nm の吸光度を Synergy HTX Multi-Mode Reader (BioTek Instruments Inc) で測定した。

2.2.10. 統計解析

結果は平均値 $\pm$ 標準偏差で表示した。統計解析は R software と Microsoft Excel 2010 を用いた。2 群間の統計学的有意差はスチューデントの *t* 検定を用いて決定した。3 群以上で観測された統計学的有意差は一元配置分散分析 (ANOVA) を実施後、Tukey-Kramer 法による多重比較検定を用いて決定した。2 群間の比較は Volcano plot ($\log_2$ Fold change $> |1|$, false discovery rate (FDR)-adjusted *p*-value < 0.05) に供して実施した。Auto-scaling による主成分分析は MetaboAnalyst 4.0 (<http://www.metaboanalyst.ca/>) を用いた³⁷。

2.3. 結果と考察

2.3.1. MCFAs, LCFAs を添加した AML12 細胞の表現型解析

FA 種による肝細胞の表現型 (細胞生存率, グルコース消費量, FA 消費量, 総ケトン体量) に与える影響を評価するために, AML12 細胞を 0.5 mM の MCFA (FA 8:0, FA 10:0 または FA 12:0) または 0.5 mM の LCFA (FA 16:0, FA 18:1) を添加した培地で処理した。AML12 不死化細胞は, 初代肝細胞の表現型と類似した表現型を示すことが報告されているため, 本研究で使用した³⁸。CCK-8 アッセイによって, 各 FA 処理の 24 時間後の細胞生存率を測定した (図 2-3, A)。対照群である DMSO 処理と比較して, 3 種の MCFA および FA18:1 処理は細胞生存率をわずかに低下させた一方で, FA 16:0 処理は細胞生存率を著しく低下させた。FA 16:0 は活性酸素種の産生を誘発し, 小胞

体ストレスを引き起こすことが知られているため³⁹⁻⁴¹、今回の結果は以前の報告と一致する^{42,43}。また、他の研究者は株化肝細胞において FA 18:1 は FA 16:0 と比較してアポトーシスを引き起こしにくいことを報告している⁴⁴。MCFAs については、LCFA と比較して効果は小さいものの、高濃度の添加で LO2 細胞においてアポトーシスを示すことが報告されている⁴⁵。CCK-8 アッセイは NADH が電子メディエーターを介して水溶性テトラゾリウム塩 WST-8 を橙色に発色する WST-8 ホルマザンに還元するという原理で測定しているため、今回の測定に脂肪酸のβ酸化によって産生される NADH 量が占める割合がどの程度なのか不明ではあるものの、脂肪酸間の比較の際に影響がある可能性は無視できない。一方で、FA 16:0 については DMSO との比較において著しく細胞毒性を示すことは説明可能と考える。以降の実験では、FA 16:0 を除き他の FA (FA 8:0, FA 10:0, FA 12:0, FA 18:1)を用いて AML12 細胞の表現型解析を実施した。

個々の FA を添加し、24 時間培養後の培地中のグルコース、総 FA および総ケトン体濃度を測定した (図 2-3, B, C, D)。各 FA を添加後の培地中の総 FA およびグルコースの濃度について、添加した FA 種による有意な差は観察されなかった。対照的に、FA 8:0 または FA 10:0 処理した細胞の培地中の総ケトン体濃度は FA 18:1 添加の総ケトン体濃度と比較して、それぞれ 3.22 倍および 3.69 倍高かった。この結果は、ラットから単離した肝細胞を用いた以前に報告されている結果と一致した^{14,46}。

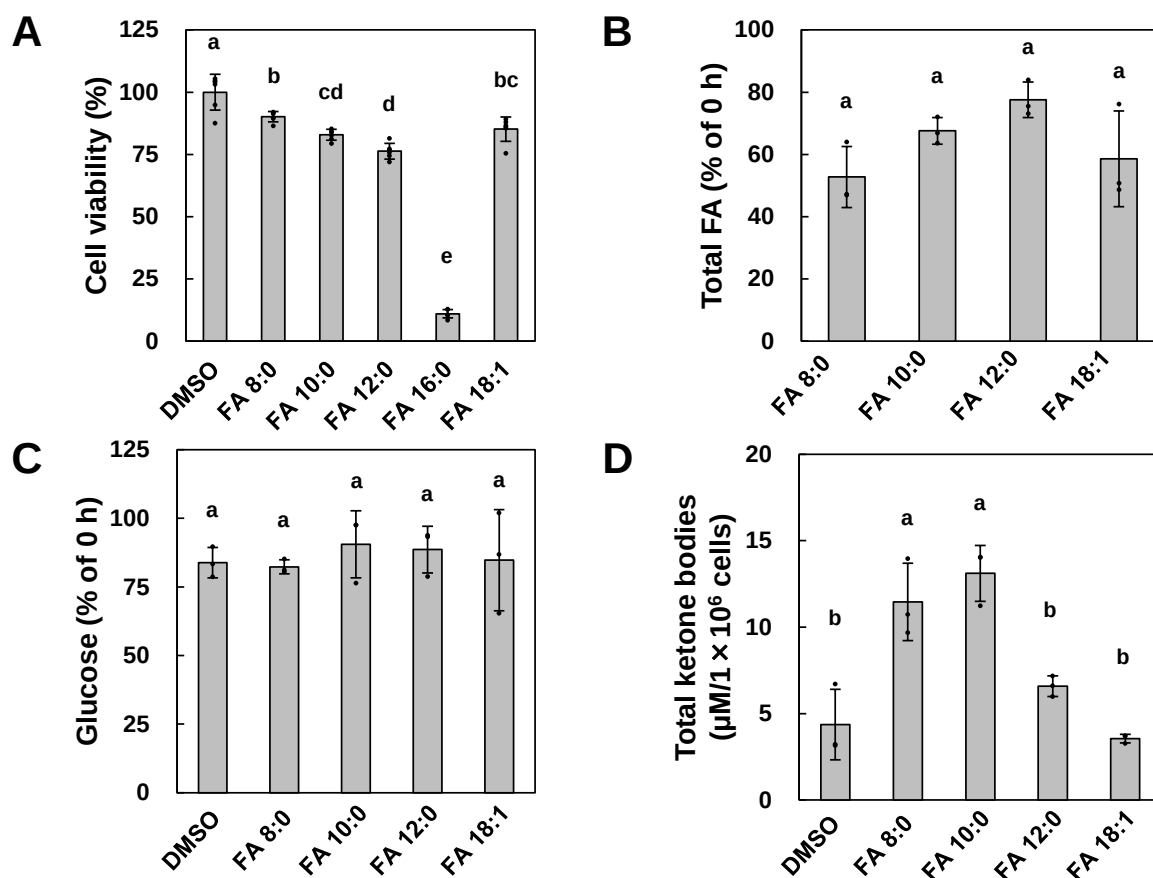


図 2-3. 各 FA で処理した AML12 細胞の表現型解析

(A) CCK-8 アッセイによる細胞生存率 ($n = 6$).

(B) 培地中の総 FA 量 ($n = 3$).

(C) 培地中のグルコース量 ($n = 3$).

(D) 培地中の総ケトン体量 ($n = 3$).

細胞生存率, 総 FA 量, グルコース量, 総ケトン体量はそれぞれ平均値 $\pm$ 標準偏差で示した. 総 FA 量, 総グルコース量は 0 時間の測定値との相対値を示した. 統計解析は ANOVA を実施後, Tukey-Kramer 法による多重比較検定を用いて決定した. 各 FA 処理の異なる文字間に有意な差があることを示す ($p < 0.05$).

2.3.2. AML12 細胞内代謝物の代謝プロファイリング

代謝物の物理化学的性質は多岐にわたるため, 単一の分析系を用いて全ての代謝物

を測定することは困難である．当研究室では，ターゲットとなる代謝物の物理化学的性質に応じた複数のクロマトグラフィー質量分析法を開発し，さらに代謝プロファイリングと動的メタボローム解析が可能な分析プラットフォームを構築してきた．DMSO または FA (FA 8:0, FA 10:0, FA 12:0 または FA 18:1) を添加後 24 時間培養した AML12 細胞内の親水性代謝物と疎水性代謝物の包括的かつ定量解析を 5 つの分析法を用いて実施した．親水性代謝物解析は IC/HRMS/MS, PFPP-LC/HRMS/MS および metal-free C18-LC/HRMS/MS で実施し，疎水性代謝物解析は DEA-SFC/MS/MS および C18-SFC/MS/MS で実施した．AML12 細胞抽出物から 183 種の親水性代謝物と 688 種の疎水性代謝物を同定した．続いて，メタボロミクスデータを用いて PCA を実施し，サンプル間の細胞代謝物のプロファイルの類似性を検討した (図 2-4)．

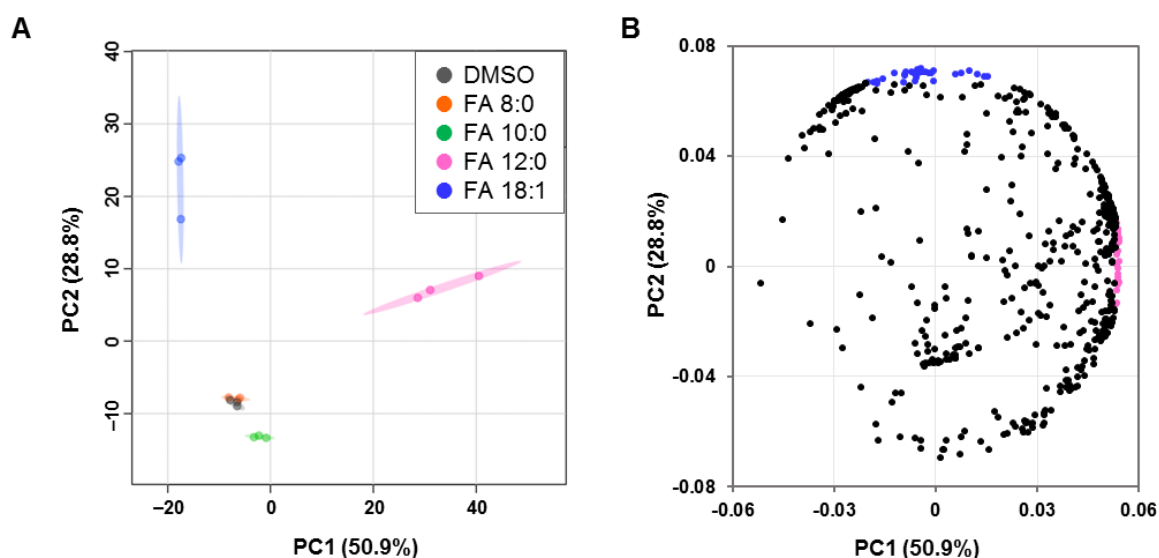


図 2-4. 各 FA で処理した AML12 細胞の代謝プロファイルデータ ($n=3$) を用いた主成分分析結果

(A) PCA スコアプロット．

(B) PCA ローディングプロット．

- : PC1 で上位の代謝物 30 種
- : PC2 で上位の代謝物 30 種
- : その他代謝物

第1主成分 (PC1) と第2主成分 (PC2) を用いた PCA スコアプロットより、3つのクラスター (クラスター1 : DMSO, FA 8:0, FA 10:0; クラスター2 : FA 12:0; クラスター3 : FA 18:1) に分類されることを確認した. MCFA 処理したサンプルのうち, FA 12:0 処理したサンプルは PC1 と PC2 によって FA 8:0 または FA 10:0 処理したサンプルとは別領域にプロットされ, MCFA の代謝は MCFA の種類 (FA 8:0 および FA 10:0 対 FA 12:0) によって明確に異なることが示唆された. 炭素鎖が 14 以上の FAs は水への溶解度が低いことが知られている⁴⁷. また, FA 8:0, FA 10:0, FA 12:0 の融点はそれぞれ 16.3, 31.3, 44.0 °C であることから⁴⁸, 37 °C の培養条件下では FA 12:0 が FA 8:0 および FA 10:0 と異なる物理学的性質を示す可能性がある. 代謝プロファイルの相違は MCFA 種による物理学的特性の違いによることも要因の一つであることが示唆される. 興味深いことに, 培地中のケトン体の量は, FA 8:0 および FA 10:0 処理サンプルと DMSO 処理サンプルの間で有意に異なっていたが, これらのサンプル (特に FA 8:0 および DMSO 処理サンプル) は, 同じ PCA クラスターにプロットされた (図 2-4). これは, FA 8:0 または FA 10:0 処理によって多数の細胞内代謝物は蓄積量が変化しないことを示した. PCA ローディングプロットにおいて PC1 で上位の代謝物は FA 12:0 処理に特徴的な代謝物と考えられる. これら上位の 30 種は全て脂質で, 内 15 種が TG であった (表 2-4). 30 種のうち FA 12:0 を構成脂肪酸とする脂質は 4 種である一方で, FA 14:0 を構成脂肪酸とする脂質は 18 種であった (FA 12:0 および FA 14:0 を 2 個以上構成脂肪酸とする脂質は重複してカウントした). また, PC2 で上位に来る代謝物は FA 18:1 および FA 12:0 処理で特徴的な代謝物と考えられる. 30 種全てが脂質で, 内 29 種が TG であった. 29 種の TG で構成脂肪酸として FA 12:0, FA 18:1 を持つ TG はそれぞれ 0 種, 10 種である一方, FA 14:0, FA 16:0, FA 16:1, FA 18:0 を持つ TG はそれぞれ 10 種, 12 種, 9 種, 9 種であった (上記 FA を 2 種以上構成脂肪酸とする TG は重複してカウントした). よって, FA 18:1 および FA 12:0 は伸長・分解反応を受けた後に脂質に取り込まれることが示唆された.

表 2-4. PC1, PC2 で上位 30 種の代謝物リスト

PC1 上位 30 種		PC2 上位 30 種	
Metabolites	PC1	Metabolites	PC2
ChE (14:0)	0.054179	TG (16:0-18:2-18:2)	0.069088
PE (16:1-16:1)	0.054125	TG (16:0-16:0-20:4)	0.069134
TG (14:0-16:0-20:0)	0.054065	TG (14:0-16:1-18:2)	0.069773
LPE (16:0)	0.054037	TG (14:0-14:0-20:3)	0.070988
PC (14:0-16:1)	0.053937	TG (18:0-18:2-18:2)	0.070229
TG (14:0-18:0-18:0)	0.053902	TG (16:1-18:0-20:3)	0.069834
TG (16:0-16:1-22:0)	0.053856	TG (18:0-18:0-18:2)	0.067376
LPE (18:0)	0.053782	TG (14:0-18:1-22:1)	0.071028
LPE (16:1)	0.053782	TG (14:0-18:1-22:4)	0.07006
DG (14:0-16:0)	0.053773	TG (16:0-16:0-20:2)	0.070401
LPC (14:0)	0.053763	TG (16:0-16:0-18:1)	0.070618
TG (14:0-18:0-22:0)	0.053733	TG (16:0-16:0-20:3)	0.070521
TG (14:0-18:1-20:0)	0.05372	TG (14:0-16:1-18:1)	0.071917
PI (16:1-18:0)	0.053688	TG (16:0-16:1-22:4)	0.071353
TG (14:0-16:0-18:0)	0.053679	TG (14:0-18:0-20:3)	0.069719
TG (14:0-20:0-20:0)	0.053631	TG (14:0-18:0-20:2)	0.068403
LPC (16:0)	0.053617	TG (16:1-18:0-20:1)	0.067388
TG (14:0-18:0-20:0)	0.053572	Cer (d18:1-22:5)	0.069994
TG (12:0-18:0-20:0)	0.053533	TG (16:0-16:0-22:5)	0.070775
TG (14:0-18:0-20:1)	0.053486	TG (14:0-18:1-20:3)	0.070503
PE (16:1-18:0)	0.053443	TG (16:1-16:1-16:1)	0.069302
DG (14:0-18:0)	0.053388	TG (16:0-18:1-20:4)	0.06965
TG (14:0-16:0-16:0)	0.053338	TG (16:0-18:0-18:2)	0.066894
PE (14:0-18:1)	0.053303	TG (14:0-18:1-18:2)	0.070189
LPC (20:5)	0.053247	TG (16:1-18:0-18:2)	0.06829
TG (12:0-14:0-20:0)	0.053244	TG (16:0-16:1-22:1)	0.066572
TG (12:0-16:1-18:0)	0.053236	TG (16:1-18:0-18:1)	0.06735
PE (14:0-20:4)	0.053223	TG (16:0-18:1-22:5)	0.066936
TG (10:0-12:0-18:1)	0.053202	TG (16:0-18:2-20:2)	0.066753
TG (14:0-16:0-22:0)	0.053194	TG (14:0-18:1-18:3)	0.066437

個々の FA 処理による影響を確認するために、volcano plot を用いて各 FA 処理サンプルとコントロール間で、871 種の代謝物プロファイルを比較した (図 2-5). サンプル間で統計的に有意で変動の大きい代謝物は、 $\log_2 \text{fold change} > |1|$ および FDR-adjusted

$p\text{-value} < 0.05$ と定義した. FA 8:0 処理サンプルとコントロールの間では, 代謝物に有意な変動は観測できなかった (表 2-5). オクタノイル-CoA, オクテノイル-CoA およびヘキサノイル-CoA は FA 8:0 処理では検出されたが, DMSO 処理では検出されなかった (図 2-6). 細胞外の高濃度のケトン体量に加え, AML12 細胞におけるこれらのアシル-CoA の存在は, FA 8:0 が β 酸化によって容易に分解され, ケトン体に変換されたことを示唆している.

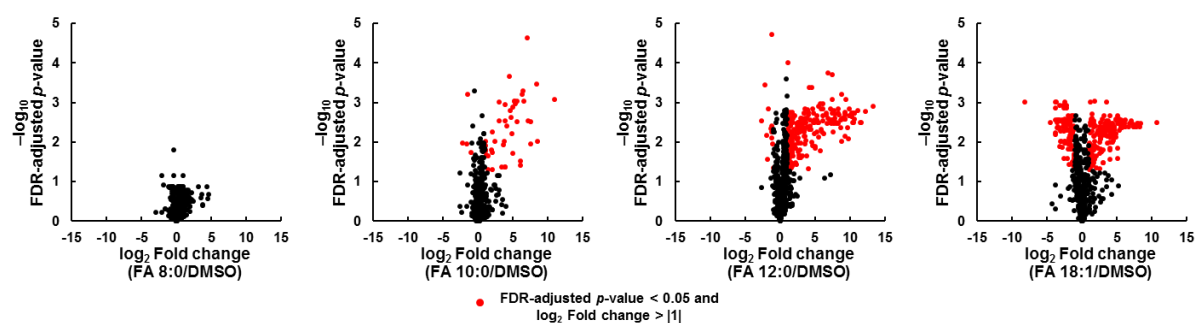


図 2-5. AML12 細胞中の親水性および疎水性代謝物の volcano plot

図の赤丸はサンプル間で統計学的に有意かつ変動の大きい代謝物 ($\log_2$ fold change > |1|および FDR-adjusted p -value < 0.05) を示した。

(A)FA 8:0 処理と DMSO 処理の比較.

(B)FA 10:0 処理と DMSO 処理の比較.

(C)FA 12:0 処理と DMSO 処理の比較.

(D)FA 18:1 処理と DMSO 処理の比較.

表 2-5. サンプル間で統計学的に有意かつ変動の大きい代謝物数

Metabolites	FDR-adjusted p -value < 0.05 ($n = 3$)							
	$\log_2$ Fold change		$\log_2$ Fold change		$\log_2$ Fold change		$\log_2$ Fold change	
	(FA 8:0/DMSO)		(FA 10:0/DMSO)		(FA 12:0/DMSO)		(FA 18:1/DMSO)	
	≥ 1	< -1	≥ 1	< -1	≥ 1	< -1	≥ 1	< -1
Hydrophilic metabolites	0	0	3	3	12	6	3	3
TGs	0	0	37	1	180	0	147	25
Other lipids	0	0	5	0	57	6	27	81
Total	0	0	45	4	249	12	177	109

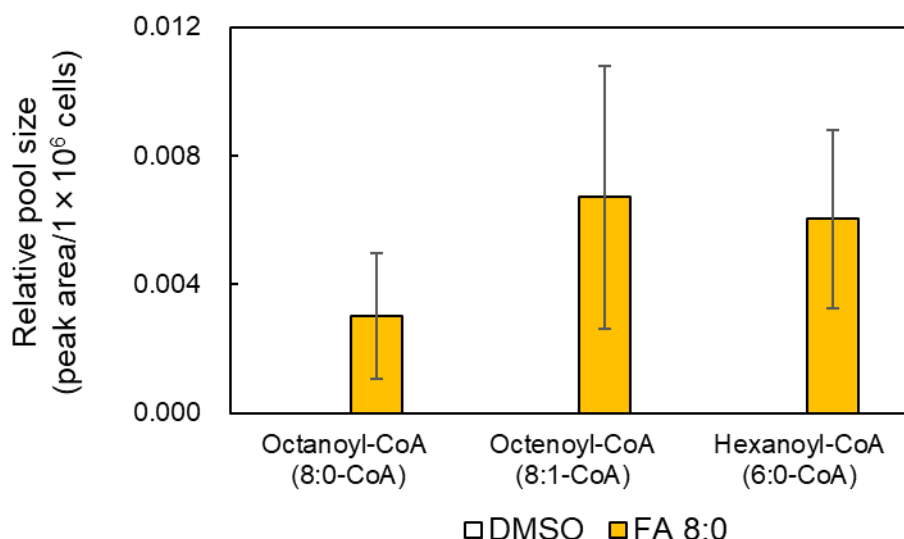


図 2-6. AML12 細胞中のオクタノイル-CoA, オクテノイル-CoA およびヘキサノイル-CoA の蓄積量 ($n = 3$)

蓄積量は平均値 $\pm$ 標準偏差で示した。

他の MCFA 間では、FA 12:0 処理においては 871 代謝物のうち 261 代謝物 (30.0%) が変動し、FA 10:0 処理による 49 代謝物 (5.6%) と比較すると急激に代謝が変動していることが示された。また、FA 10:0 処理、FA 12:0 処理共に処理によって脂質代謝物の増加、特に TG 種の増加が顕著であった。FA 18:1 処理サンプルとコントロール間では 871 代謝物のうち、286 代謝物 (32.8%) が有意に変化した (表 2-4)。183 種の親水性代謝物のうち、有意に変動したのは 6 種 (3.3%) のみであり、688 種の脂質のうち 280 種 (40.7%) が変動していた。FA 18:1 処理においても細胞内の TG 種の増加が確認された一方で、FA 18:1 処理サンプルでは 871 代謝物のうち 109 代謝物 (12.5%) が減少していることが明らかになった。そこで、これらの種について定量的なリピドーム解析を実施した。

2.3.3. 個々の FA 添加後の AML12 細胞内脂質の定量評価

現在までに当研究室では、SFC/TQMS を用いた定量的なリピドーム解析システムを開発し³⁴、血漿、細胞、エクソソームに適用してきた^{49,50}。各 FA で処理した AML12

細胞内の個々の脂質分子の定量データを類似の SFC/TQMS 分析法 (DEA-SFC/MS/MS および C18-SFC/MS/MS) を用いて取得し、脂質クラスごとの定量情報を取得した (図 2-7). TG はグリセロール骨格の *sn*-1, *sn*-2, *sn*-3 の位置に 3 種類の脂肪酸側鎖を有するため、クロマトグラフィーで共溶出した TG の構造異性体を個々に識別できず定量が困難である. 例えば, TG 16:0-18:1-20:4 (MRM transitions, 898.8 > 577.5, 898.8 > 599.5, 898.8 > 625.5) と TG 16:0-18:2-20:3 (MRM transitions, 898.8 > 575.5, 898.8 > 601.5, 898.8 > 625.5) は構造異性体の関係にあるが両 TG 分子が同時溶出した場合, 898.8 > 575.5 の MRM transition は共通するため, それぞれの分子を正確に定量することが難しくなる. また, TG や ChE のような疎水性の高い脂質は DEA カラムで分析するとカラムに保持されずに溶出しピーク形状が悪い点も定量分析に適していない点として挙げられる. よって, 2 種の分析法を用いて実施した. 脂質クラスの著しい変化として, コントロール, FA 8:0 および FA 10:0 処理と比較して, FA 18:1 処理によって細胞内 TG および DG 量は, それぞれ約 9.0 倍および 2.5 倍増加した. さらに, FA 18:1 処理はコントロールと比較して細胞内の ChE および Cer の濃度を増加させ, 有意に HexCer 濃度を減少させた. PA の蓄積は FA 18:1 処理でのみ検出された. PA は DG, PI および PG の前駆体であり, DG は TG, PC, PE および PS の前駆体である (図 2-8). コントロール, FA 8:0, FA 10:0, FA 18:1 処理した細胞サンプル間では, PI, PG, PC, PE, PS に有意な差は認められなかった. この結果は, 肝細胞に取り込まれた FA 18:1 がオレオイル-CoA (18:1-CoA) に変換され, 18:1-CoA によるグリセリド-グリセロール合成がアシルトランスフェラーゼを介して促進されたことを示唆している. 対照的に, FA 8:0 処理では, コントロールと比較して各脂質の濃度に有意差は認められなかった. FA 12:0 処理では, 他の MCFA (FA 8:0 または FA 10:0) 処理とは異なり, DMSO 処理と比較して 15.4 倍高い TG 蓄積を誘導した. この結果は, 単離灌流ラット肝を使用した先行研究の結果と一致している⁵¹. さらに Huh7 肝細胞を使用した他の研究では, FA 12:0 と FA 18:1 処理によって脂肪滴を誘導する一方で FA 8:0, FA 10:0 は誘導しないことが報告されている⁵².

また、FA 12:0 処理では細胞内の LPC, LPE の蓄積量が有意に高値を示した。LPC, LPE の増加はホスホリパーゼの活性化の可能性が考えられる。飽和脂肪酸である FA 16:0 で Chang 肝細胞を処理した試験では、ホスホリパーゼ A₂ (Phospholipase A₂, PLA₂) の阻害剤を添加することで細胞の生存率が改善し、また、LPC (16:0) を添加することで細胞生存率が悪化するという報告がなされている⁵³。よって、今回の FA 12:0 処理による細胞生存率のわずかな低下は PLA₂ 活性化による LPC 産生の影響であることが示唆された。また、PLA₂ 活性化により、PE も酵素反応を受け LPE が産生したものと考えられる。LPE については、通常の濃度以上に Chang 肝細胞に添加した際も生存率に影響を与えなかったことが報告されている。

また、DG, PC, PE, LPC および LPE を構成する脂肪酸量を比較した (図 2-9)。FA 12:0 処理した細胞では蓄積した DG, PC を構成する脂肪酸中に占める FA 12:0 の比率がそれぞれ 30%, 14% (コントロールではそれぞれ 0.4%, 未検出) と顕著に増加していた一方で、PE では 1% (コントロールでは未検出) と増加はわずかであった。よって、FA 12:0 処理では DG から TG と PC に主に代謝される可能性が示された。PE については、特定の脂肪酸の組成が急激に増加するわけではなく、FA 12:0 処理によって全体的に増加する傾向を示した。よって、AML12 細胞は、DG からリン脂質を産生する際に、DG 組成によって産生するリン脂質クラスを選択しているのかもしれない。この仮説を明らかにするためには更なる研究が必要である。

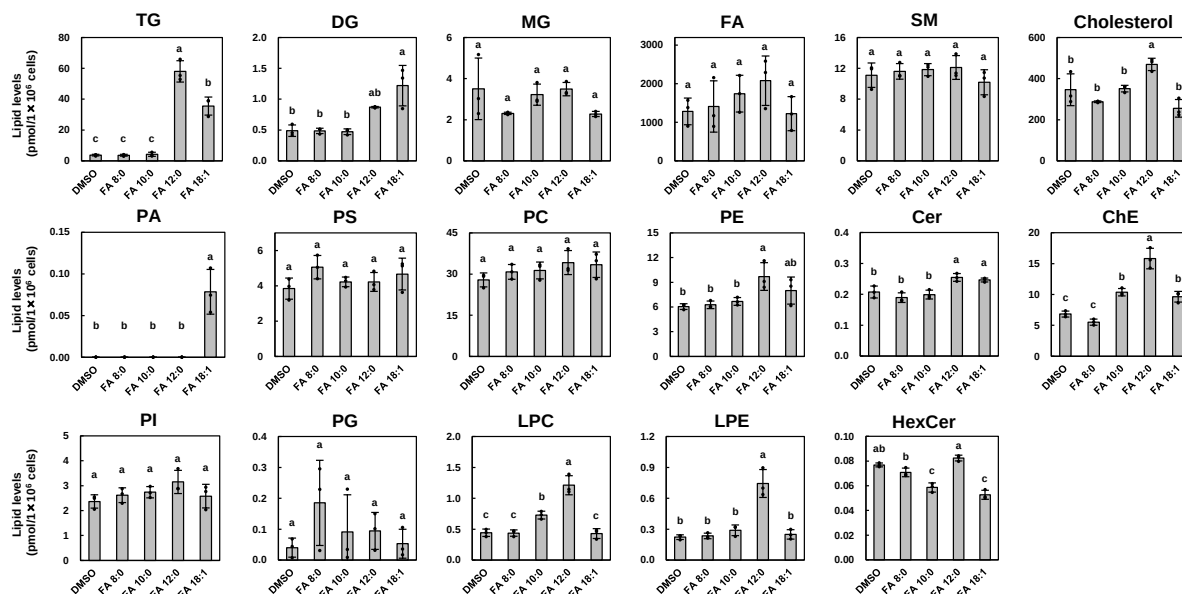


図 2-7. 各 FA で処理した AML12 細胞中の各脂質クラスの蓄積量 ($n = 3$)

蓄積量は平均値 $\pm$ 標準偏差で示した. 統計解析は ANOVA を実施後, Tukey-Kramer 法による多重比較検定を用いて決定した. 各 FA 処理の異なる文字間に有意な差があることを示す ($p < 0.05$).

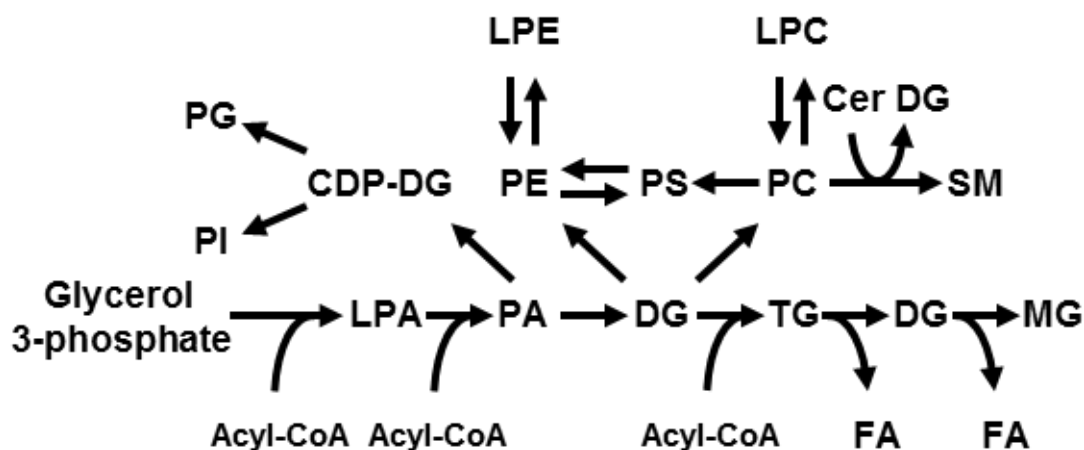


図 2-8. 脂質代謝経路

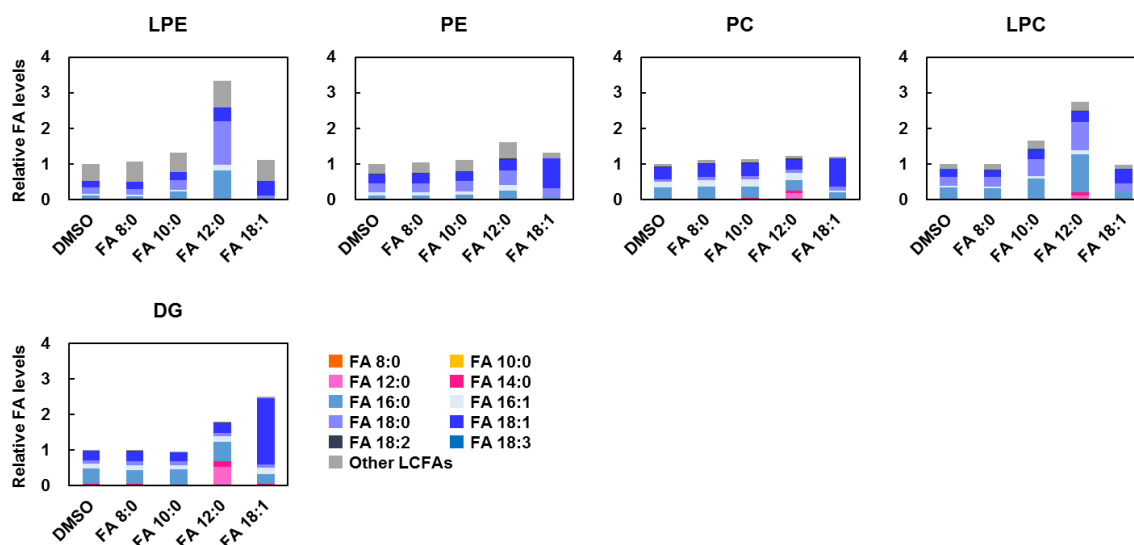


図 2-9. DG, PC, PE, LPC および LPE を構成する脂肪酸量の比較 ($n = 3$)

脂肪酸量は, DMSO 処理時の各脂質を構成する全ての構成脂肪酸の総量を 1 とした場合の相対値で示した.

次に, FA 12:0 または FA 18:1 処理による細胞内 TG 蓄積の増加についてさらに調べるために, 各 FA で処理した細胞内の TG 種の FA 組成を, 検出された個々の TG 種の濃度および TG を構成する脂肪酸アシル鎖の FA 情報に基づいて計算した (表 2-6). TG 蓄積が誘導された FA 12:0 または FA 18:1 で処理された細胞は, コントロールと比較して, 細胞内 TG を構成する全 FA 中で培地に添加した FA が占める比率が有意に高値を示した. すなわち, コントロールでは, FA 12:0 の組成比率は 1%, FA 18:1 の組成比率は 16%である一方, FA 12:0 で処理された細胞では, FA 12:0 の組成比率は 50%, FA 18:1 で処理された細胞では FA 18:1 の組成比率は 65%であった (表 2-6). この結果は, AML12 細胞によって取り込まれた FA12:0 または FA18:1 が, それぞれラウロイル-CoA (12:0-CoA) または 18:1-CoA に変換され, グリセリド-グリセロール合成において基質として 12:0-CoA または 18:1-CoA の利用が増強されることを示した. また, 各 FA で処理した AML12 細胞内の全 TG を構成する各脂肪酸量を, DMSO 処理時の細胞内全 TG を構成する全ての構成脂肪酸の総量を 1 とした場合の相対値として算出した (表 2-7). DMSO 処理と比較して FA 12:0 処理ではほとんどの脂肪酸種に

において脂肪酸量が有意に増加した。また, FA 18:1 処理では, FA 16:1, FA 18:0, FA 18:1, FA 18:2, FA 18:3 および Other LCFAs で有意に増加した。よって, 図 2-7 のローディングプロットの結果と同様, FA 12:0, FA 18:1 は分解や伸長反応を受けた後に脂質に取り込まれることが示唆された。

表 2-6. FA 処理した AML12 細胞内の全 TG の FA 組成 ($n = 3$)

FA composition of whole TGs (%)	FA-treated cell conditions				
	DMSO	FA 8:0	FA 10:0	FA 12:0	FA 18:1
FA 8:0	0.13 $\pm$ 0.02 bc	0.20 $\pm$ 0.06 ab	0.27 $\pm$ 0.08 a	0.06 $\pm$ 0.01 c	0.02 $\pm$ 0.00 c
FA 10:0	0.08 $\pm$ 0.04 b	0.11 $\pm$ 0.03 b	6.19 $\pm$ 1.75 a	0.61 $\pm$ 0.01 b	0.04 $\pm$ 0.00 b
FA 12:0	1.22 $\pm$ 0.19 c	1.56 $\pm$ 0.43 c	4.58 $\pm$ 1.10 b	49.75 $\pm$ 1.11 a	0.33 $\pm$ 0.00 c
FA 16:0	59.76 $\pm$ 2.10 a	29.87 $\pm$ 5.60 b	32.56 $\pm$ 6.36 b	16.52 $\pm$ 0.59 c	8.96 $\pm$ 0.08 c
FA 16:1	6.73 $\pm$ 0.34 bc	8.13 $\pm$ 1.02 ab	7.72 $\pm$ 1.15 ab	5.13 $\pm$ 0.10 c	9.25 $\pm$ 0.02 a
FA 18:0	5.48 $\pm$ 0.24 ab	6.52 $\pm$ 1.31 a	8.09 $\pm$ 1.83 a	2.83 $\pm$ 0.09 bc	2.19 $\pm$ 0.07 c
FA 18:1	15.59 $\pm$ 1.84 c	39.02 $\pm$ 10.47 b	22.94 $\pm$ 15.80 bc	5.57 $\pm$ 0.07 c	65.00 $\pm$ 0.13 a
Others ^a	11.01 $\pm$ 0.34 c	14.61 $\pm$ 2.04 abc	17.65 $\pm$ 3.76 ab	19.52 $\pm$ 0.30 a	14.21 $\pm$ 0.07 bc
Total	100	100	100	100	100

^a Others は FA 14:0, FA 18:2, FA 18:3, FA 20:0, FA 20:1, FA 20:2, FA 20:3, FA 20:4, FA 20:5, FA 22:0, FA 22:1, FA 22:2, FA 22:3, FA 22:4, FA 22:5 および FA 22:6 の総量を示す.

数値は平均値 $\pm$ 標準偏差で示した. 統計解析は ANOVA を実施後, Tukey-Kramer 法による多重比較検定を用いて決定した. 各 FA 処理の異なる文字間に有意な差があることを示す ($p < 0.05$).

表 2-7. FA 処理した AML12 細胞内の全 TG の構成脂肪酸量 ($n = 3$)

構成脂肪酸量	FA-treated cell conditions															
	DMSO				FA 8:0				FA 10:0				FA 12:0			
FA 8:0	0.00	±	0.00	b	0.00	±	0.00	b	0.00	±	0.00	b	0.01	±	0.00	a
FA 10:0	0.00	±	0.00	c	0.00	±	0.00	c	0.07	±	0.00	b	0.09	±	0.01	a
FA 12:0	0.01	±	0.00	b	0.01	±	0.00	b	0.05	±	0.00	b	7.68	±	0.82	a
FA 14:0	0.06	±	0.01	b	0.06	±	0.00	b	0.10	±	0.01	b	2.53	±	0.34	a
FA 16:0	0.60	±	0.07	bc	0.28	±	0.02	c	0.35	±	0.05	c	2.55	±	0.36	a
FA 16:1	0.07	±	0.01	b	0.08	±	0.01	b	0.09	±	0.02	b	0.79	±	0.11	a
FA 18:0	0.05	±	0.01	c	0.06	±	0.01	c	0.09	±	0.01	c	0.44	±	0.06	a
FA 18:1	0.16	±	0.04	b	0.39	±	0.15	b	0.29	±	0.29	b	0.86	±	0.11	b
FA 18:2	0.01	±	0.00	c	0.01	±	0.00	c	0.01	±	0.00	c	0.08	±	0.01	b
FA 18:3	0.00	±	0.00	c	0.00	±	0.00	c	0.00	±	0.00	c	0.00	±	0.00	b
Other LCFAs ^a	0.05	±	0.00	c	0.06	±	0.01	c	0.08	±	0.01	c	0.40	±	0.06	b
Total	1.00	±	0.13	c	0.97	±	0.16	c	1.13	±	0.35	c	15.44	±	1.85	a

^a Other LCFAs は FA 20:0, FA 20:1, FA 20:2, FA 20:3, FA 20:4, FA 20:5, FA 22:0, FA 22:1, FA 22:2, FA 22:3, FA 22:4, FA 22:5 および FA 22:6 の総量を示す.

数値は DMSO 処理時の細胞内全 TG を構成する全ての構成脂肪酸の総量を 1 とした場合の相対値で示し, 平均値 ± 標準偏差で示した. 統計解析は ANOVA を実施後, Tukey-Kramer 法による多重比較検定を用いて決定した. 各 FA 処理の異なる文字間に有意な差があることを示す ($p < 0.05$).

対照的に、他の MCFA (FA 8:0 または FA 10:0) 処理では、全 FA 中で添加した FA が占める比率は FA 12:0 ほどの顕著な増加を示さなかった (表 2-6). 特に FA 8:0 で処理した細胞では、コントロールと比較して添加した FA 8:0 の組成比率の有意な増加を示さなかった. 肝臓の β 酸化では、FA 18:1 とは異なり、FA 8:0 および FA 10:0 は、アシル-CoAs およびアシルカルニチンを形成することなくミトコンドリアに入ることができる¹¹. これらの結果は、FA 8:0 および FA 10:0 が β 酸化の基質として急速に消費されるため、FA 12:0 を除く MCFA (FA 8:0 および FA 10:0) による TG 蓄積の誘導は限定的であることを示唆している⁵⁴. ラット肝のミトコンドリアでは、FA 8:0 と FA 10:0 の酸化速度に対するカルニチンの影響は FA 12:0 と比較して軽微であると報告されている⁵⁵. また、Violante らは CPT1 阻害剤を用いたヒト線維芽細胞試験において、添加した FA に対してカルニチンを使用せずにミトコンドリアを通過した FA の比率を算出した結果、FA 12:0 添加では 25%、FA 10:0 添加では 50%であることを示した⁵⁶. そのため、FA 12:0 は他の MCFA よりもアシル-CoA に変換されやすく、脂質に組み込まれやすい可能性がある. この推測は FA 12:0 の添加時に培地中のケトン体濃度が有意な変化を示さなかった結果によっても説明することができる (図 2-3, D). 以前の研究では、ヒト血漿中のケトン体濃度は、トリオクタノイン (TG 8:0-8:0-8:0) またはトリデカノイン (TG 10:0-10:0-10:0) 摂取時と比較して、トリラウリン (TG 12:0-12:0-12:0) 摂取時で有意に低いことが示されている^{57,58}. これらの結果は、AML12 細胞においては、FA 12:0 は FA 8:0 および FA 10:0 と比較して、カルニチンの影響により酸化が緩やかなためケトン体を生成する可能性が低く、脂質に組み込まれる可能性が高いことを示している. LCFA (FA 18:1) と比較して MCFAs (FA 8:0 または FA 10:0) 処理では肝細胞における TG 蓄積が限定されたという結果は、先行研究の結果と一致する^{24,25}. 先行研究では、FA 8:0 または FA 10:0 処理による TG の蓄積の阻害は、脂肪分解に関与するリパーゼ (脂肪トリグリセリドリパーゼとホルモン感受性リパーゼ) 遺伝子の発現レベルの増加、脂質合成に関与するステロール調節エレメント結合タンパク質や脂肪酸合成酵素の遺伝子発現の減少によって制御されると報告されている. これらの

先行研究で FA 8:0 と FA 10:0 は脂肪肝に有効であると報告されているが、今回の結果からその有効性は FA12:0 には当てはまらないため、FA 12:0 を豊富に含むココナツ油は、脂肪肝を対象とした食事には適していないことが示唆された。

今回の試験では、FA 8:0 処理によって細胞内 TG を構成する FA の中で FA 18:1 が占める比率が増加し、FA 16:0 の比率が減少した。FA 8:0 が脂肪肝モデル肝細胞のリパーゼを上方制御することが報告されている²⁴。また、マウスを用いた研究では、全 FA 中 FA 8:0 を 7.3%含む MCFA が豊富な高脂肪食を摂取することで肝臓のステアロイル-CoA デサチュラーゼのタンパク質発現が増加することが報告されている⁵⁹。FA 8:0 処理によってわずかに細胞生存率が減少した結果 (図 2-3, A) から、FA 8:0 処理は細胞増殖を維持するために、脂肪酸をリモデリング、つまり TG から遊離した FA 16:0 を不飽和・伸長させた後に脂質と再結合させている可能性が示された。この仮説を明らかにするためには、さらなる研究が必要である。

2.4. 小括

本章では、MCFAs および LCFA で処理した AML12 細胞の代謝物について複数のメタボローム分析法を活用し、包括的かつ定量的に評価した。その結果、MCFAs と LCFA では代謝物量への影響が大きく異なることが明らかになった。また、FA 12:0 は FA 8:0 または FA 10:0 と異なる挙動を示し、肝細胞中の特定の脂質 (TG, Cholesterol, ChE, PE, LPE, LPC, Cer, HexCer) を増加させることを示した。以上の結果から推測される AML12 細胞における MCFAs の代謝経路を以下の図 2-10 に示す。

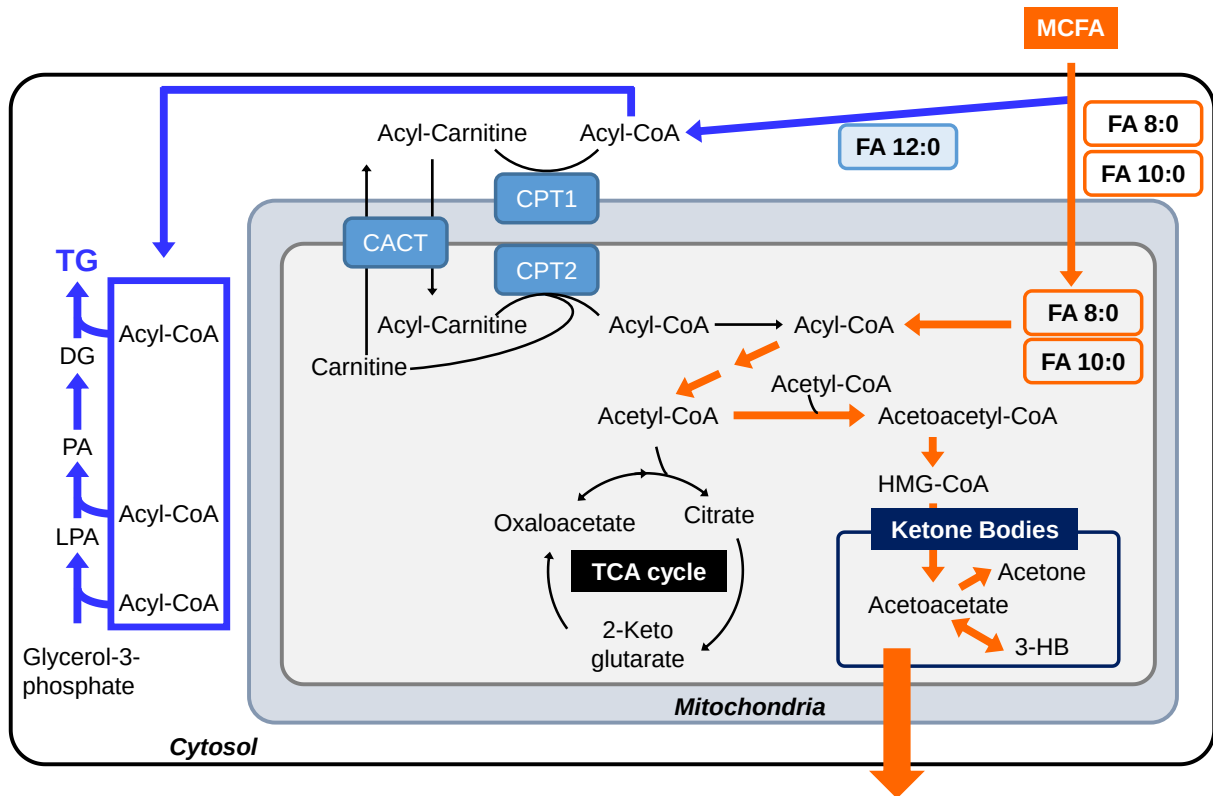


図 2-10. 今回の結果から推測される AML12 細胞における MCFAs の代謝経路

また, FA 8:0 はコントロールと比較して, β 酸化亢進によるケトン体産生を促すことを示した. TG 量については有意な差が見られなかったが, TG 組成が変化することを明らかにした. 一方で, FA 18:1 はグリセロールリン酸経路の TG 合成に関わる脂質を増加させることを示した.

第三章 ^{13}C 標識脂肪酸を用いた動的メタボローム解析による MCFA 代謝動態評価

3.1. 緒言

第二章では複数のメタボローム分析法を利用した代謝プロファイリングにより、AML12 細胞における各 FA 種に特徴的な代謝が明らかとなった。しかしながら、代謝プロファイルの結果は代謝物抽出時における細胞の代謝状態のスナップショットのため、どの代謝経路が律速となっているか、また、活性化、不活性化しているか判断することが困難な場合がある。第二章で測定した、FA 8:0 または FA 18:1 で処理した AML12 細胞中のクエン酸回路中間体の定量結果を以下の図 3-1 に示す。

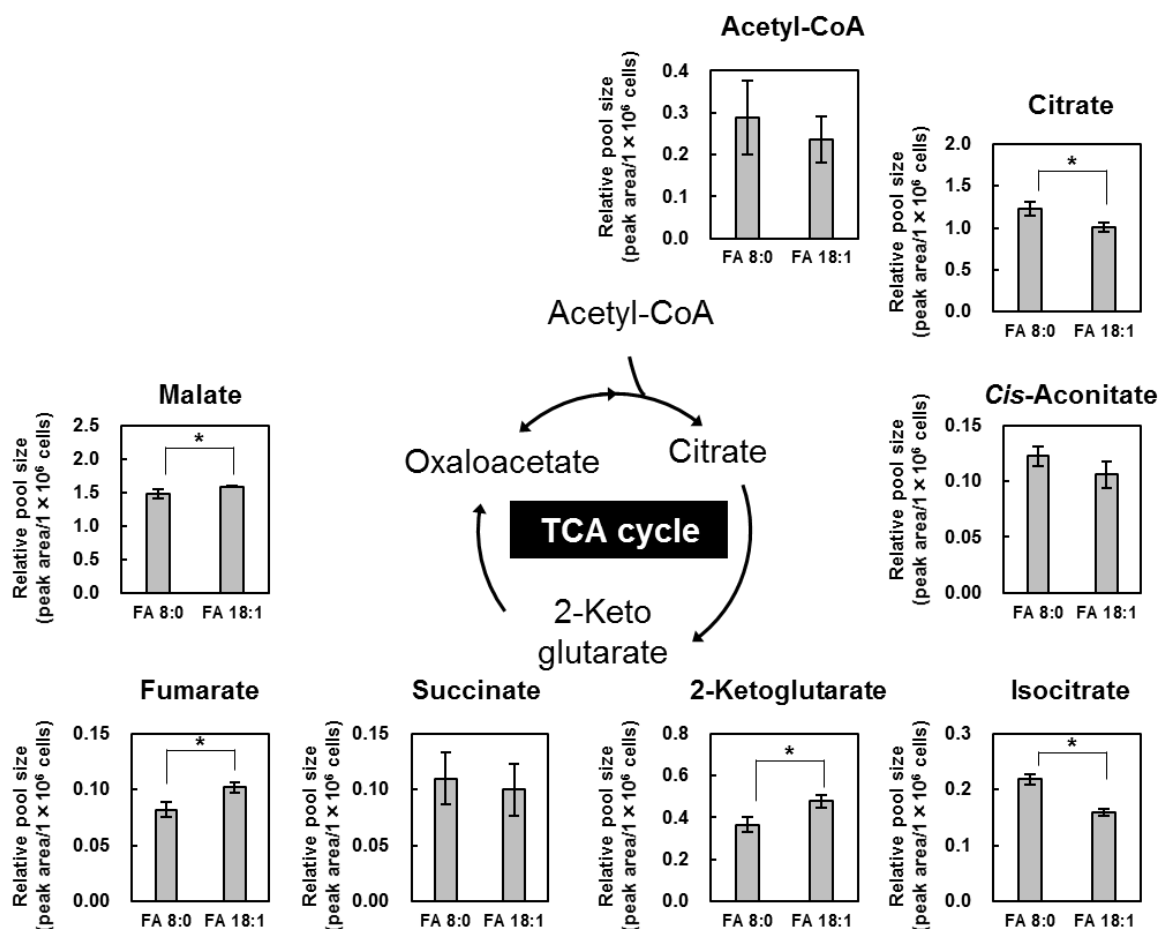


図 3-1. 第二章で測定した FA 8:0 または FA18:1 で処理した AML12 細胞中のクエン酸回路中間体の蓄積量 ($n = 3$)

蓄積量は平均値 $\pm$ 標準偏差で示した. 統計解析はスチューデントの t 検定を用いて決定した (* $p < 0.05$).

第二章の結果から, FA 8:0 処理により β 酸化亢進が示唆されたが, 代謝産物であるアセチル-CoA の蓄積量について有意な差は見られなかった. アセチル-CoA は β 酸化に加え, 解糖系で産生されたピルビン酸 (Pyr) やアミノ酸の代謝産物であると同時に, ケトン体やクエン酸回路中間体に変換される基質でもある. そのため, ある特定の時間の代謝物蓄積量の観測のみでは, MCFA s がどの代謝経路に流れて変換・機能しているかを客観的に評価することができない.

近年の MS の進歩に伴い、安定同位体化合物をトレーサーとして細胞内に取り込ませた試料のメタボローム分析を行うことで、安定同位体の標識化率を指標に代謝フラックス、すなわち代謝動態を観測することが可能となってきた^{60,61}。安定同位体標識された炭素 (^{13}C) を含む化合物を細胞内に取り込ませた後に、代謝物を質量分析することで、 ^{13}C 含有代謝物イオンと非標識の代謝物イオンは異なる質量電荷比 (m/z) で観測され、安定同位体標識された代謝物の m/z は代謝物中の ^{13}C の数に従って増加する (図 3-2)。質量分析で取得した非標識体および標識体の分子イオンの強度比を観測することで、化合物の総炭素中の ^{13}C の存在比率 (標識化率, ^{13}C fraction) を算出することができる (図 3-3)。よって、標識化率を経時的に観測することで、添加した標識代謝物がどの代謝経路に流れ、資化されるかについての情報を定量的に取得できる。

本章では、MCFA と LCFA の資化動態を観測するために、 $^{13}\text{C}_8\text{-FA 8:0}$ または $^{13}\text{C}_{18}\text{-FA 18:1}$ で処理した AML12 細胞で代謝ターンオーバー解析を実施した。

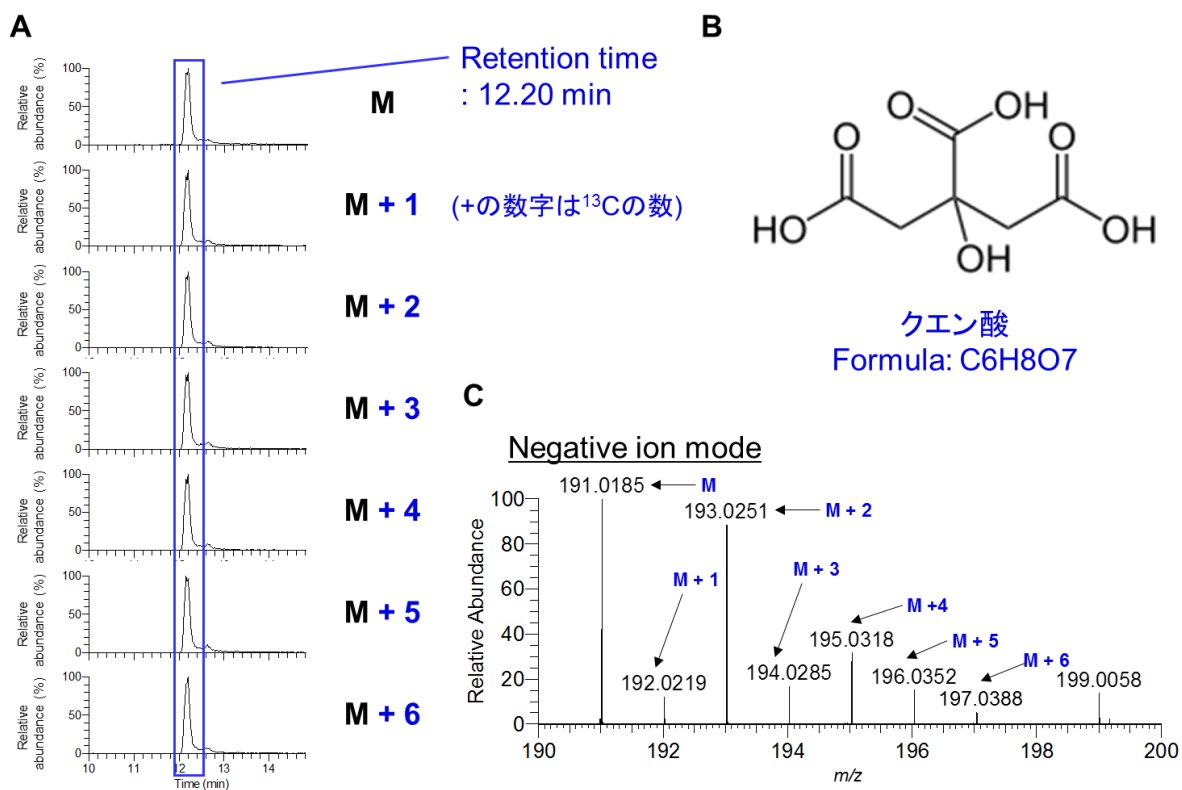


図 3-2. クエン酸のアイソトポマー分布

(A) 非標識体, 標識体のクロマトグラム.

(B) クエン酸の構造式.

(C) 質量分析で取得した MS スペクトル.

A

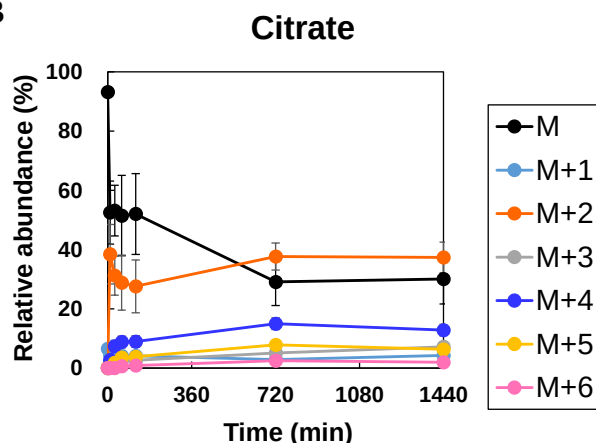
Relative isotopomer abundance (m_i)

$$m_i(\%) = \frac{M_i}{\sum_{j=0}^n M_j} \times 100$$

$$^{13}\text{C fraction} (\%) = \sum_{i=1}^n \frac{i \times m_i}{n}$$

possessing n carbon atoms

B



C

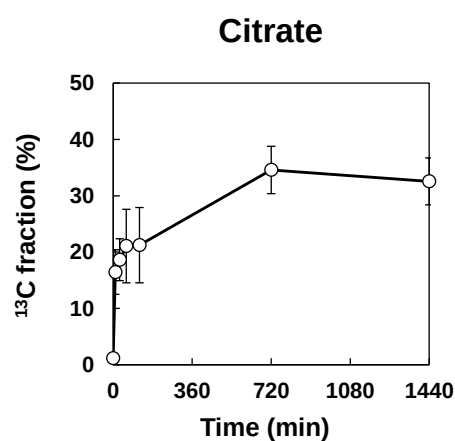


図 3-3. 化合物の標識化率の算出

(A) 左式：代謝物中の各アイソトポマーの存在比率算出式.

右式：代謝物の標識化率算出式.

(B) クエン酸の各アイソトポマーの存在比率動態.

(C) クエン酸の標識化率動態.

3.2. 実験方法

3.2.1. 試薬および実験材料

25 mM グルコース含有 Dulbecco's modified Eagle's medium (DMEM), Ham's F-12 Nutrient Mixture, ペニシリン-ストレプトマイシン溶液 (10000 U/mL ペニシリン, 10000 $\mu\text{g/mL}$ ストレプトマイシン), リン酸緩衝生理食塩水 (phosphate-buffered saline, PBS), およびトリプシン-EDTA 溶液 (0.25% (w/v) トリプシン, 1 mM EDTA) は Thermo Fisher Scientific から購入した. ウシ胎児血清 (Fetal bovine serum, FBS), LC/MS グレー

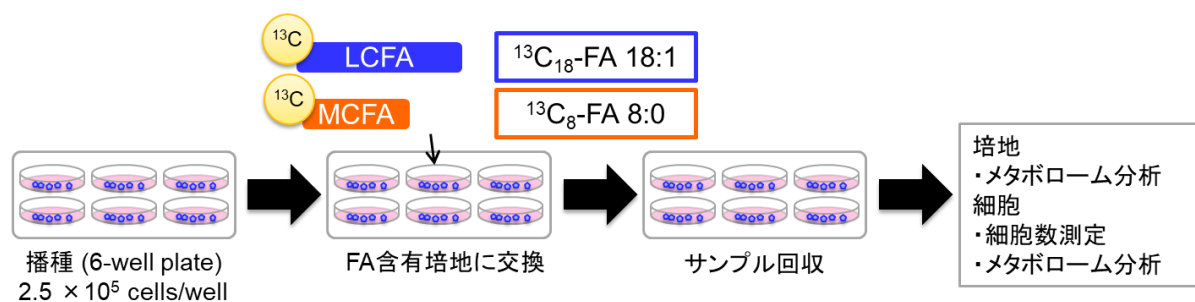
ドの酢酸アンモニウムは Merck から購入した。脂肪酸フリーのウシ血清アルブミン (bovine serum albumin, BSA) および HPLC-グレードのクロロホルムは、ナカライテスク株式会社から購入した。ジメチルスルホキシド (Dimethyl sulfoxide, DMSO) および LC/MS グレードのギ酸は、富士フイルム和光純薬株式会社から購入した。LC/MS グレードの水、アセトニトリル、メタノール、イソプロパノールは関東化学株式会社から購入した。内部標準物質として使用した *n*-propionyl coenzyme A (3:0-CoA) リチウム塩、および 10-camphorsulfonic acid (純度 99.0%) は Merck から購入した。PG 17:0–17:0 は Avanti Polar Lipids Inc. から購入した。 $^{13}\text{C}_8$ -FA 8:0 (純度 95.0%, 同位体濃縮度 99.3 atom % ^{13}C) および $^{13}\text{C}_{18}$ -FA 18:1 (純度 99.0%, 同位体濃縮度 99.0 atom % ^{13}C) は大陽日酸株式会社 (東京, 日本) から購入した。

3.2.2. 細胞培養

$^{13}\text{C}_8$ -FA 8:0 または $^{13}\text{C}_{18}$ -FA 18:1 は最終濃度が 500 mM となるように DMSO に溶解した。1% (w/v) 脂肪酸フリーBSA を添加した DMEM 培地を 0.20 μm シリンジフィルター (Merck) を用いてろ過滅菌した。ろ過滅菌した DMEM-BSA 培地は 10% (v/v) FBS, 1% (v/v) ペニシリン-ストレプトマイシン溶液、および 0.1% (v/v) FA 溶液 (500 mM) または対象として 0.1% (v/v) DMSO と混合した (培地 4)。AML12 細胞の培養条件は FA 添加培地への交換操作を除き、2.2.2.と同様の方法で実施した。

3.2.3. 培地, 細胞の回収およびメタボローム分析サンプル調製

AML12 細胞 (2.5×10^5 細胞) を 2 mL の培地 2 を含む 6-ウェルプレートで 24 時間培養した。培地 2 を各培地 4 (500 μM $^{13}\text{C}_8$ -FA 8:0, または $^{13}\text{C}_{18}$ -FA 18:1) 2 mL に交換し 10–1440 分標識した後、10, 30, 60, 120, 720, 1440 分で各培地と細胞サンプルを回収した。細胞培養およびサンプル回収のスキームを図 3-4 に示す。



	Seeding	Medium exchange
Medium composition	DMEM high glucose (25 mM) medium – 10% (v/v) FBS 1% (v/v) penicillin-streptomycin solution (10000 U/mL penicillin, 10000 mg/mL streptomycin) –	DMEM high glucose (25 mM) medium 1% (w/v) fatty acid-free BSA 10% (v/v) FBS 1% (v/v) penicillin-streptomycin solution (10000 U/mL penicillin, 10000 mg/mL streptomycin) 0.1% (v/v) ¹³ C-labeled FA solution (500 mM) or 0.1% (v/v) DMSO
Incubation time	Overnight	0, 10, 30, 60, 120, 720, and 1440 分

図 3-4. 安定同位体標識 FAs を用いた細胞培養およびサンプル回収のスキーム

細胞内代謝物の抽出操作は使用する内部標準液の組成を除き、2.2.3 と同様の方法で実施した。

スクレイピング処理後，細胞懸濁液（～1 mL）を 2 mL のエッペンドルフチューブに移した．上記エッペンドルフチューブに 400 μL のクロロホルム，10 μL の内部標準液 C，10 μL の内部標準液 D を添加し，1 分間のボルテックス処理後 5 分間の超音波処理を行った．内部標準液の詳細は表 3-1 に示した．その後，16000 ×g，4 °C の条件で 5 分間遠心分離し上清（700 μL）を新しい 2 mL エッペンドルフチューブに回収し，300 μL のクロロホルムおよび 400 μL の水を添加した後に 16000 ×g，4 °C の条件で 5 分間遠心分離をすることで水相と有機相に相分離した．上相（水相）500 μL を新しい 2 mL エッペンドルフチューブに移し，遠心エバポレーターにより真空下で蒸発させた後に，乾固した抽出物を親水性代謝物解析の実施まで-80 °C で保存した．分析時は，乾固した水相に 50 μL の水を添加し再溶解させた．下相（有機相）250 μL を別の 2 mL エッペンドルフチューブに移し，メタノールで 2 倍に希釈し疎水性代謝物解析の実施まで-80 °C で保存した．

表 3-1. 内部標準液の組成

内部標準液	標準物質	最終添加量 (nmol)
内部標準液 C	10-camphorsulfonic acid	0.90
(水)	3:0-CoA	0.40
内部標準液 D	PG 17:0–17:0	0.80
(メタノール溶液)		

培地中の代謝物の抽出操作を簡潔に以下に記す. 2 mL のエッペンドルフチューブに回収した培地サンプル 100 μ L を凍結乾燥後, 最終添加量が 0.50 nmol となるように 10-camphorsulfonic acid 水溶液 50 μ L を添加し, 再溶解した.

3.2.4. 親水性代謝物解析

親水性代謝物解析は 2.2.4 と同様の方法で実施した.

3.2.5. 疎水性代謝物解析

細胞中の TGs を対象とした代謝ターンオーバー解析は LC (島津製作所) と Q Exactive (Thermo Fisher Scientific) を用いて実施した. LC 分離の分析カラムとして, InertSustain C18 column (2.1 mm i.d. $\times$ 150 mm, 3 μ m particle size, ジーエルサイエンス) (C18) を使用した. C18 を用いた LC/HRMS/MS (C18-LC/HRMS/MS) の分析条件を以下に記す. 注入量は 5 μ L とした. カラム温度は 50 $^{\circ}$ C に設定した. 移動相 A は 5 mM の酢酸アンモニウムを添加した混合溶媒 (水/アセトニトリル, 1/2, v/v), 移動相 B は 5 mM の酢酸アンモニウムを添加した混合溶媒 (メタノール/イソプロパノール, 1/19, v/v) を使用した. 移動相の流速は 0.4 mL/min とした. グラジエント条件は, 0–100% B (0–22.5 min), 100% B (22.5–27.5 min), 0% B (27.5–30 min) に設定した. MS 条件を以下に示す. 分析は正イオンモードで実施した. シースガス流速は 40 arb に設定した. ヒーター温度は 425 $^{\circ}$ C に設定した. Automatic gain control (AGC) target は 3×10^6 ,

maximum injection time は 300 ミリ秒に設定した。スキャン幅は m/z 400–2000 に設定した。その他の MS 条件は IC/HRMS/MS と同条件に設定した。

C18-LC/HRMS/MS は LabSolutions, version 5.80 (島津製作所) と Xcalibur 4.2.47 (Thermo Fisher Scientific) で制御した。

3.2.6. 標識化率の算出

3.1 に記載の通り、HRMS から得られた質量スペクトルの同位体分布から、標識化率 (各代謝産物の総炭素に対する ^{13}C の比, ^{13}C fraction) を算出した⁶⁰。標識化率は、安定同位体標識された $^{13}\text{C}_8\text{-FA 8:0}$ または $^{13}\text{C}_{18}\text{-FA 18:1}$ に由来する特定代謝物中の炭素原子の割合を示す。アセチル-CoA の初速は標識処理 0 分から 10 分までの標識化率の変化として定義した。具体的には、標識処理 10 分の標識化率から 0 分の標識化率を減算した値を処理時間 (10 分) で除した値を初速とした。

3.2.7. 統計解析

結果は平均値 $\pm$ 標準偏差で表示した。統計解析は Microsoft Excel 2010 を用いた。2 群間の統計学的有意差はスチューデントの t 検定を用いて決定した。

3.3. 結果と考察

3.3.1. 個々の FA 添加後の AML12 細胞の代謝ターンオーバー解析

第二章と同様に, AML12 細胞を 0.5 mM の $^{13}\text{C}_8\text{-FA 8:0}$ または $^{13}\text{C}_{18}\text{-FA 18:1}$ を添加した培地で処理した. 10–1440 分間標識した後, 各培地および細胞サンプルを回収し, 様々な分析法を用いて親水性および疎水性代謝物のマスペクトルの同位体分布から各代謝物の全炭素に対する標識化率を算出した (図 3-5). クエン酸回路中間体の標識化率は時間が経過するにつれ増加し, ^{13}C 標識 FA 処理 720 分後に同位体定常状態に達した (図 3-6). 同位体定常状態におけるクエン酸回路中間体の標識化率は, $^{13}\text{C}_{18}\text{-FA 18:1}$ 処理と比較して $^{13}\text{C}_8\text{-FA 8:0}$ 処理で有意に高かった.

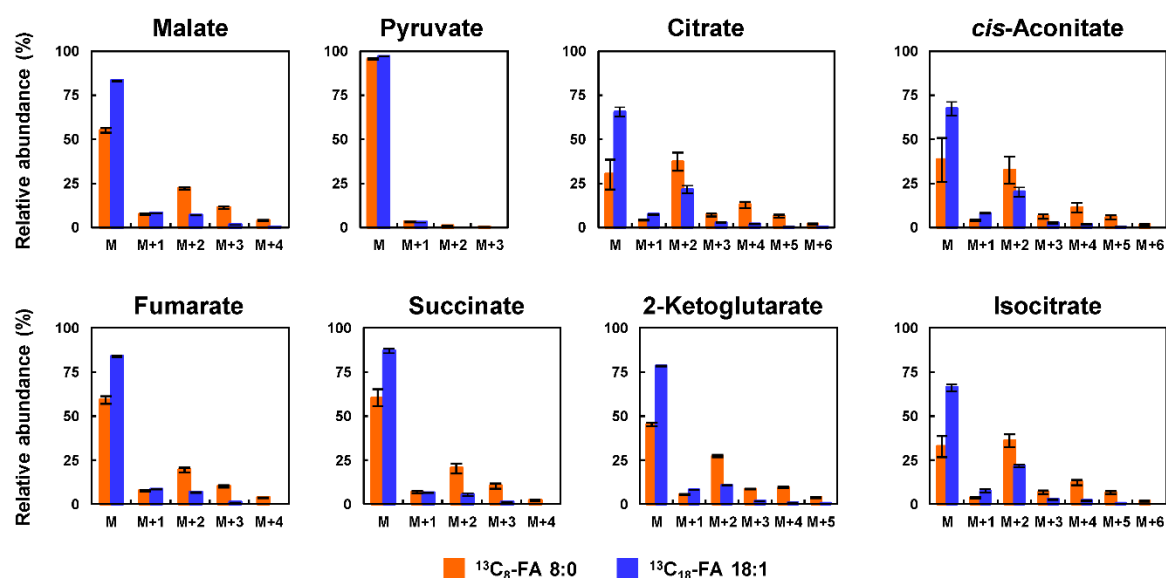


図 3-5. $^{13}\text{C}_8\text{-FA 8:0}$ または $^{13}\text{C}_{18}\text{-FA 18:1}$ で 1440 分処理後の AML12 細胞中のクエン酸回路中間体とピルビン酸のマスペクトルの同位体分布 ($n = 4$)

同位体分布は平均値 $\pm$ 標準偏差で示した.

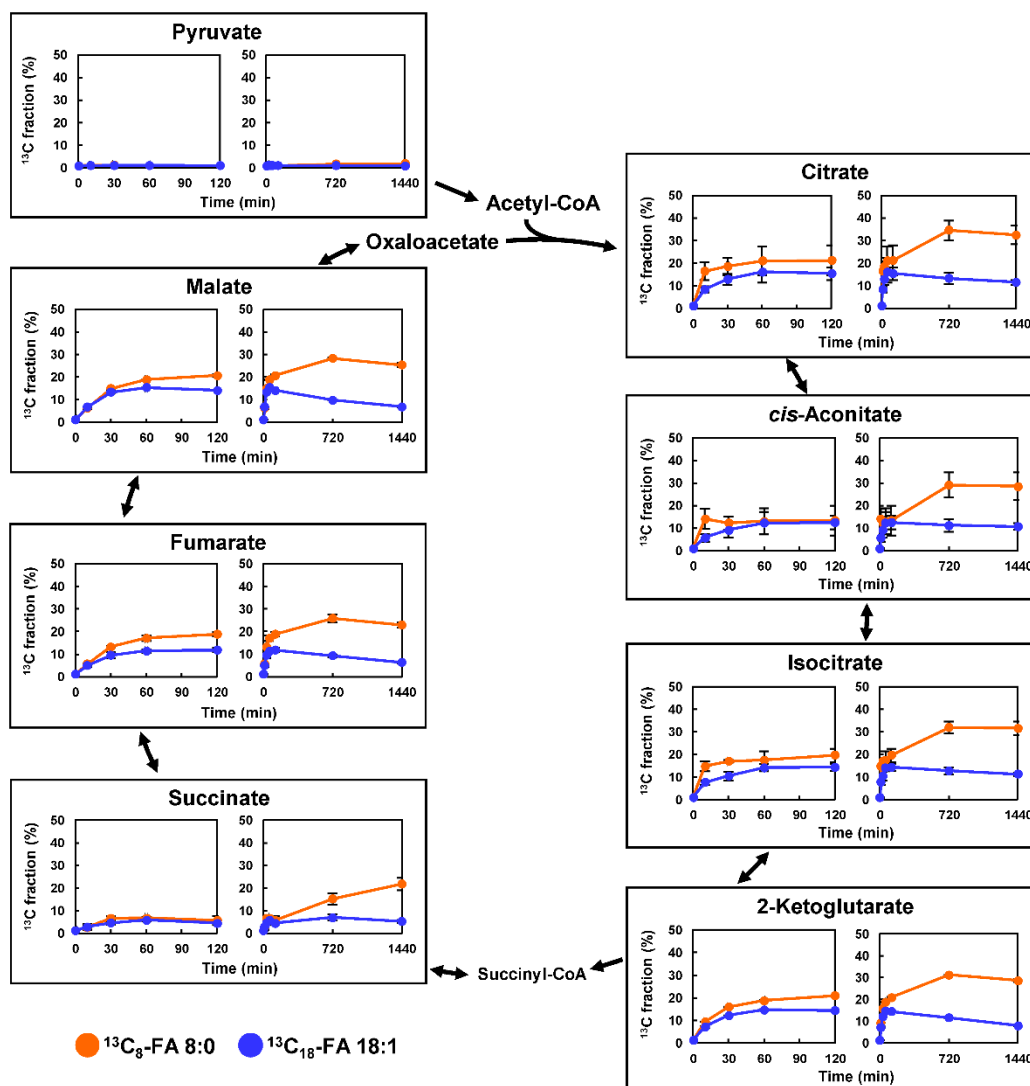


図 3-6. $^{13}\text{C}_8\text{-FA 8:0}$ または $^{13}\text{C}_{18}\text{-FA 18:1}$ で処理した AML12 細胞中のクエン酸回路中間体とピルビン酸の標識化率の経時変化 ($n = 4$)
 標識化率は平均値 $\pm$ 標準偏差で示した.

今回の結果は、FA 8:0 由来の炭素が FA 18:1 由来の炭素よりもクエン酸回路に流れていることを示し、細胞への FA 8:0 処理がクエン酸回路の活性化に寄与していることを示唆している。 $^{13}\text{C}_8\text{-FA 8:0}$ で処理した細胞内の Pyr の標識化率は著しく低値を示したので ($< 1\%$)、 $^{13}\text{C}_8\text{-FA 8:0}$ で処理した細胞のクエン酸回路中間体の高い標識化率は、 β 酸化が仲介するアセチル-CoA 産生の促進による可能性が高いと考えられる。したがって、アシル-CoA の標識化率を同様に計算した (図 3-7).

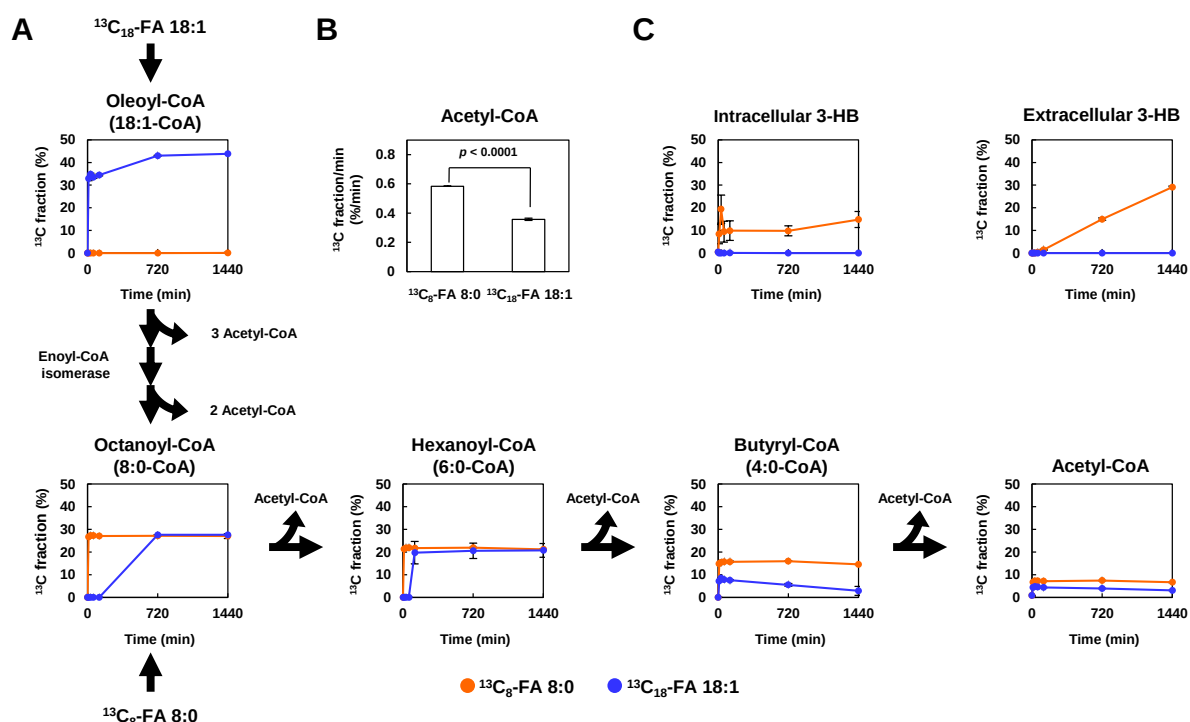


図 3-7. $^{13}\text{C}_8\text{-FA 8:0}$ または $^{13}\text{C}_{18}\text{-FA 18:1}$ で処理によるβ酸化関連代謝物評価 ($n = 4$)

(A) アシル-CoA の標識化率の経時変化.

(B) FA 処理 0–10 分におけるアセチル-CoA の標識化率の初速.

(C) 細胞内および培地中の 3-HB の標識化率の経時変化.

標識化率および標識化率の初速は平均値 ± 標準偏差で示した.

$^{13}\text{C}_8\text{-FA 8:0}$ で処理した細胞では, $^{13}\text{C}_{18}\text{-FA 18:1}$ 処理と比較して, 同位体定常状態でのアセチル-CoA およびその前駆体であるブチリル-CoA (4:0-CoA) の標識化率が有意に増加したことを示した (図 3-7, A). $^{13}\text{C}_8\text{-FA 8:0}$ 処理における標識処理初期 (0–10 分) のアセチル-CoA の標識化速度は, $^{13}\text{C}_{18}\text{-FA 18:1}$ 処理と比較して有意に高値を示した (スチューデントの t 検定, $p < 0.0001$) (図 3-7, B). 今回の結果から, FA 8:0 は FA 18:1 と比較してβ酸化されやすくアセチル-CoA に資化されやすいことを実験的に明らかにした. また, アセチル-CoA はケトン体産生の出発物質であるため, 細胞内および培地中の 3-HB の標識化率を算出した. 細胞内および培地中の 3-HB の標識化率は,

$^{13}\text{C}_8\text{-FA 8:0}$ 処理では標識時間依存的に増加した一方で、 $^{13}\text{C}_{18}\text{-FA 18:1}$ 処理では検出されなかった (図 3-7, C). そのため、第二章において FA 8:0 処理, あるいは FA 10:0 処理時のケトン体量が増加した理由は、 β 酸化による FA 8:0, あるいは FA 10:0 のアセチル-CoA 変換が加速した結果、一時的に細胞内に過剰蓄積したアセチル-CoA を処理するためにケトン体へと変換したためと考えられる. これらの代謝ターンオーバー分析によって、脂肪酸資化に関する定量的な評価を実現し、AML12 細胞において FA 8:0 は主に β 酸化によりアセチル-CoA に変換され、さらにクエン酸回路中間体やケトン体への資化が促進されることを明らかにした. これらの結果は、FA 8:0, FA10:0 で 96% を占める MCT を摂取したラット肝内のアセチル-CoA, 総ケトン体が LCT と比較して上昇することを示した以前の報告と一致している¹².

続いて、アミノ酸についても同様の解析を実施した結果、 $^{13}\text{C}_8\text{-FA 8:0}$ 処理した細胞ではアスパラギン (Asn), アスパラギン酸 (Asp), グルタミン (Gln), グルタミン酸 (Glu) およびプロリン (Pro) の標識化率が $^{13}\text{C}_{18}\text{-FA 18:1}$ 処理した細胞で観察された標識化率と比較して有意に高値を示した (図 3-8). $^{13}\text{C}_8\text{-FA 8:0}$ または $^{13}\text{C}_{18}\text{-FA 18:1}$ に由来する同位体イオンは、他のアミノ酸についてはほとんど観察されなかった. さらに、培地中のアミノ酸についても同様の解析をした結果、培地中の Glu および Pro の標識化率は $^{13}\text{C}_{18}\text{-FA 18:1}$ 処理と比較して、 $^{13}\text{C}_8\text{-FA 8:0}$ 処理で標識時間依存的に増加した (図 3-9). これらのアミノ酸は、2-ケトグルタル酸 (2-KG) を介して生合成される糖原生アミノ酸である. 糖原生アミノ酸は絶食や栄養失調の条件下では糖新生のためにタンパク質分解によって産生されるため、血漿中で上昇することが知られている. 栄養失調ラットを対象とした先行研究では、MCT の摂取により栄養状態の指標となる血漿中のアルブミンが増加し、LCT と比較して血漿中の総アミノ酸および糖原生アミノ酸が減少した点から、MCT 摂取によってタンパク質分解が抑制されることを示唆している⁶². 今回の試験ではグルコースは十分に供給されており、FA 8:0 と FA 18:1 処理で消費されたグルコース量に有意な差は見られなかった (図 2-3, C). これらの結果から、栄養源が十分にある状態においても MCFA はクエン酸回路中間体に資化され、

その後、糖原生アミノ酸合成に利用されることでタンパク質利用を阻害する可能性があることが示された。ケトン体が糖新生を抑制し、タンパク質を貯蔵する傾向があることを示した過去の研究報告はこの推測を支持するものである⁶³。

また、細胞中の 5 種の糖原生アミノ酸への資化について標識処理 60 分までの代謝動態に着目した (図 3-10)。標識処理 10 分後から FA 8:0 処理と FA 18:1 処理の標識化率において有意な差を示すアミノ酸は Glu, Gln であり、標識処理 30 分後から有意な差を示すアミノ酸は Asp, Asn であった。Pro は標識処理 120 分後から有意な差を示した。よって、2-KG から Glu に資化された後に Gln への変換が優先されていると考えられる。次に、Glu とオキサロ酢酸 (Oxa) はアミノ基転移反応によって Asp と 2-KG に変換され、続いて Asp が Asn に変換されたものと考えられる。Pro は、Glu からの変換に複数の反応を要するため、120 分後から有意な差を示したと考えられる。上記反応における Pro の前駆体であるグルタミン酸 5-セミアルデヒドはオルニチン (Orn) の前駆体でもある。Orn から尿素回路によって糖原生アミノ酸であるアルギニン (Arg) が産生されるが、Arg の標識化率は有意な差を示さなかった。グルタミン酸 5-セミアルデヒドから Orn への変換はオルニチンアミノトランスフェラーゼによるアミノ基転移によるもので、反応時に同時に Glu を 2-KG に変換していると考えられる。Glu から 2-KG への変換を介するアミノ基転移反応には、Oxa から Asp への変換を仲介するアスパラギン酸アミノトランスフェラーゼ (aspartate aminotransferase, AST) および Pyr からアラニン (Ala) への変換を仲介するアラニンアミノトランスフェラーゼ (alanine aminotransferase, ALT) が存在する。AST, ALT は肝機能検査の指標とされる酵素である。今回の結果から、細胞内の Asp の標識化率が標識処理 30 分以降で FA 8:0 処理で有意に高値を示すため、FA 8:0 は AST の遺伝子発現や活性に影響を与えている可能性が示された。他の糖原生アミノ酸である His はグルコース 6-リン酸 (G6P) からペントースリン酸経路でリボース 5-リン酸を経て合成されるため、脂肪酸由来の炭素が流れず、標識化率が著しく低値を示したと考えられる。

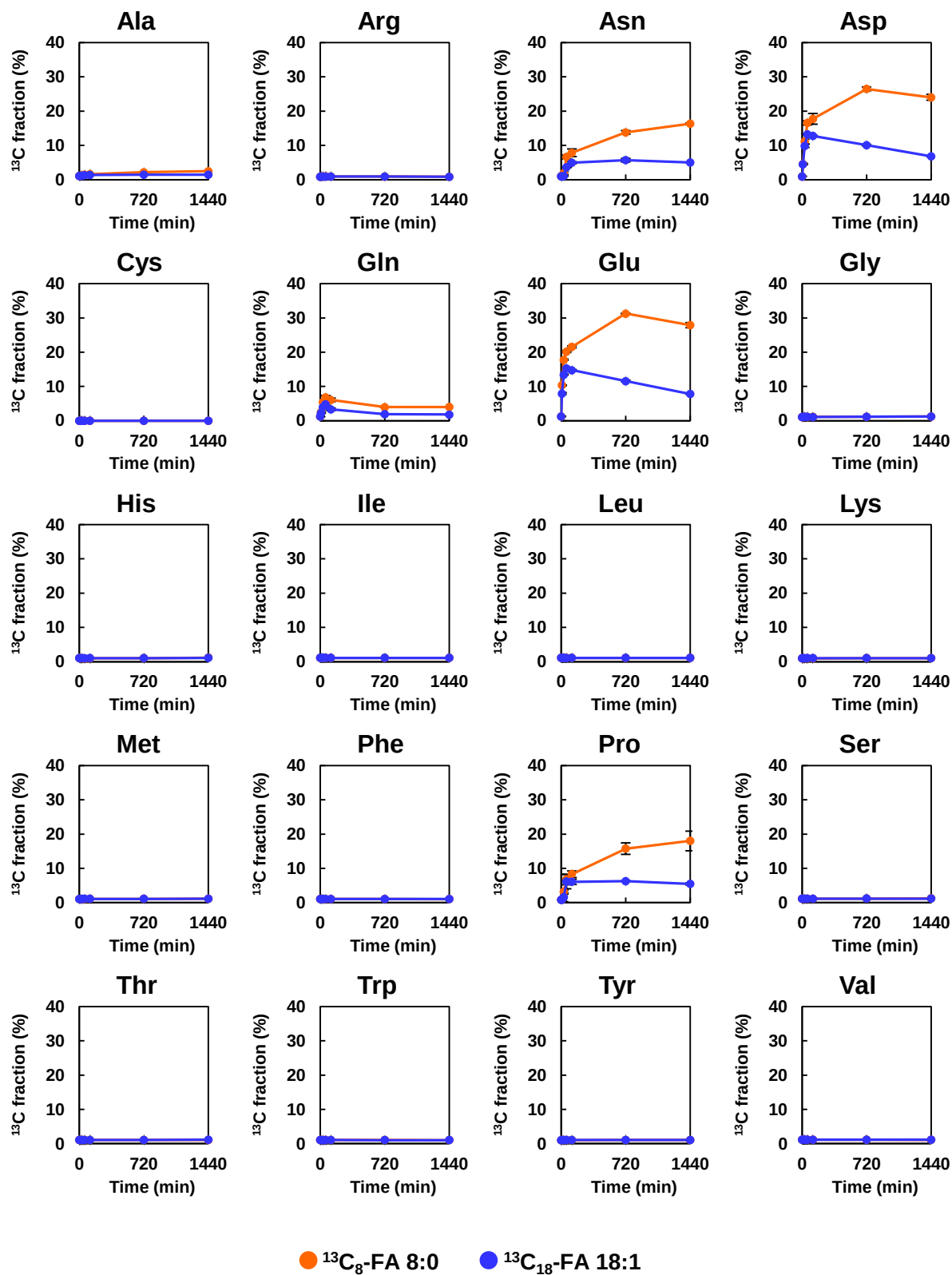


図 3-8. $^{13}\text{C}_8\text{-FA 8:0}$ または $^{13}\text{C}_{18}\text{-FA 18:1}$ で処理した AML12 細胞中のアミノ酸の標識化率の経時変化 ($n = 4$)
 標識化率は平均値 $\pm$ 標準偏差で示した.

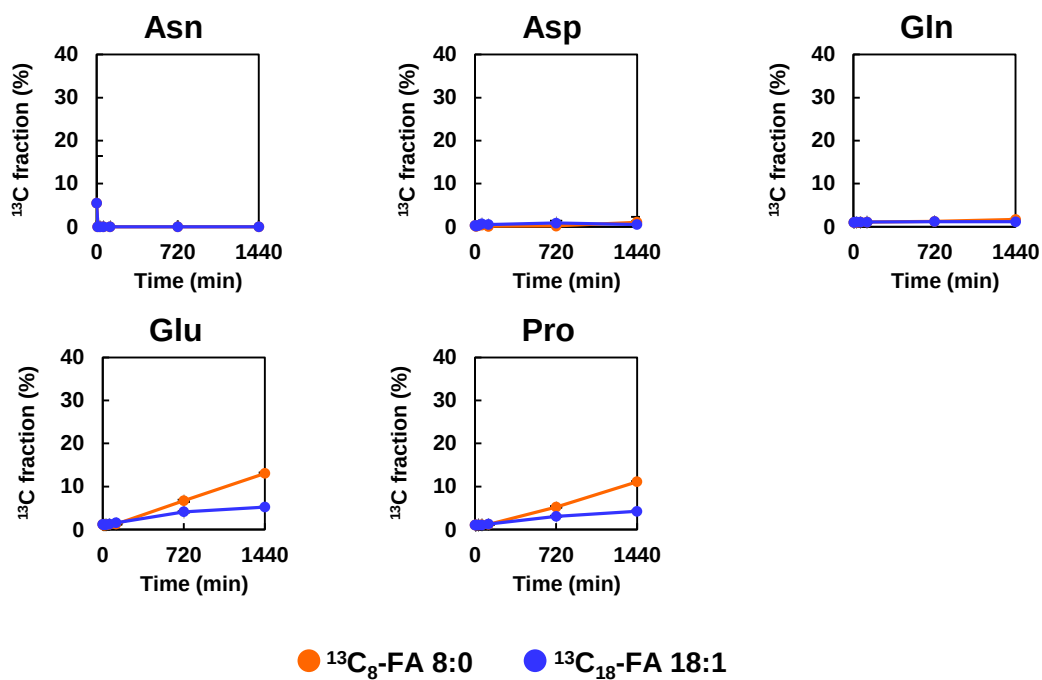


図 3-9. AML12 細胞を $^{13}\text{C}_8\text{-FA 8:0}$ または $^{13}\text{C}_{18}\text{-FA 18:1}$ で処理後の培地中のアミノ酸の標識化率の経時変化 ($n = 4$)

標識化率は平均値 $\pm$ 標準偏差で示した.

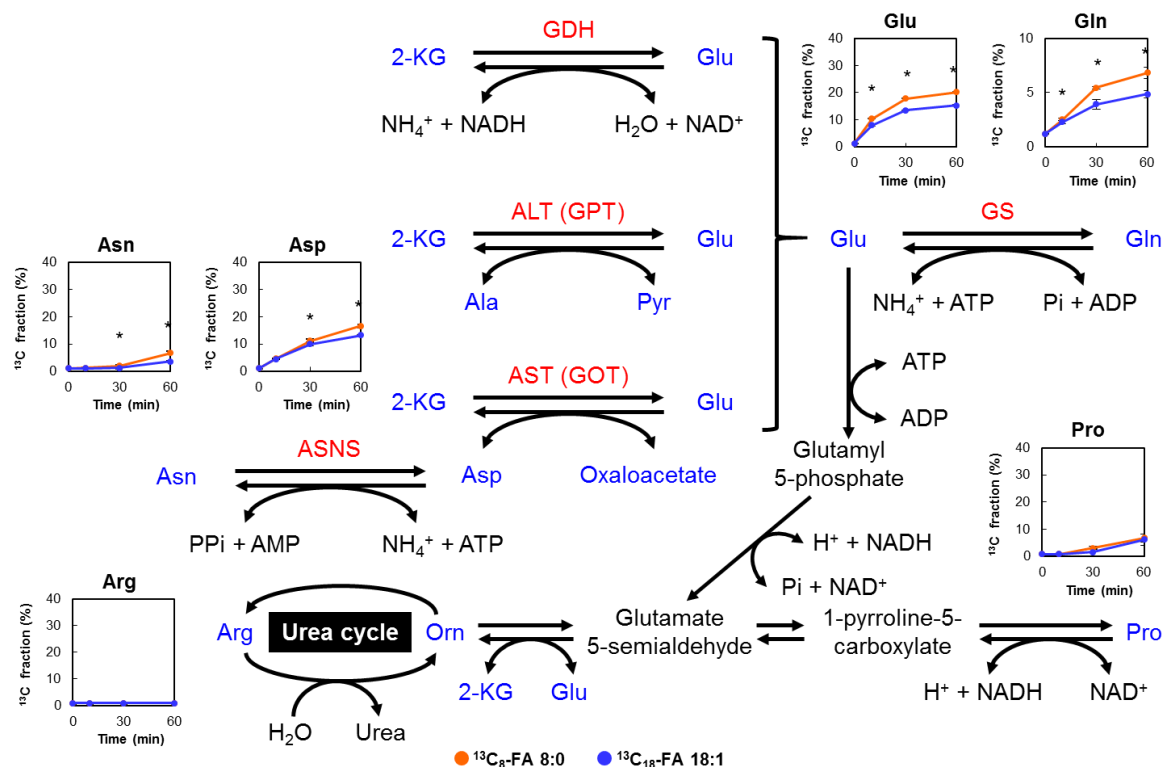


図 3-10. 標識処理 60 分までの AML12 細胞中の糖原生アミノ酸の標識化率の経時変化 ($n = 4$)

標識化率は平均値 $\pm$ 標準偏差で示した. 統計解析はスチューデントの t 検定を用いて決定した (* $p < 0.05$).

安定同位体標識脂肪酸由来の炭素が糖新生に流れているかを確認するために, グルコース 3-リン酸 (G3P) と G6P の標識化率を算出した (図 3-11). G3P および G6P の標識化率は $^{13}\text{C}_8\text{-FA 8:0}$ または $^{13}\text{C}_{18}\text{-FA 18:1}$ 処理のいずれにおいても著しく低値 (約 1%) を示したため, 脂肪酸由来の炭素は糖新生に流れていないと考えられる. そのため, 第二章で議論した TG および DG 増加に寄与する G3P はグルコースからジヒドロキシアセトンリン酸を経て産生されたと考えられる. 今回の考察を更に検証するためには, $^{13}\text{C}_6$ -グルコースと非標識の FA を用いて培養し, 代謝ターンオーバー解析を実施することで確認できると考えられる.

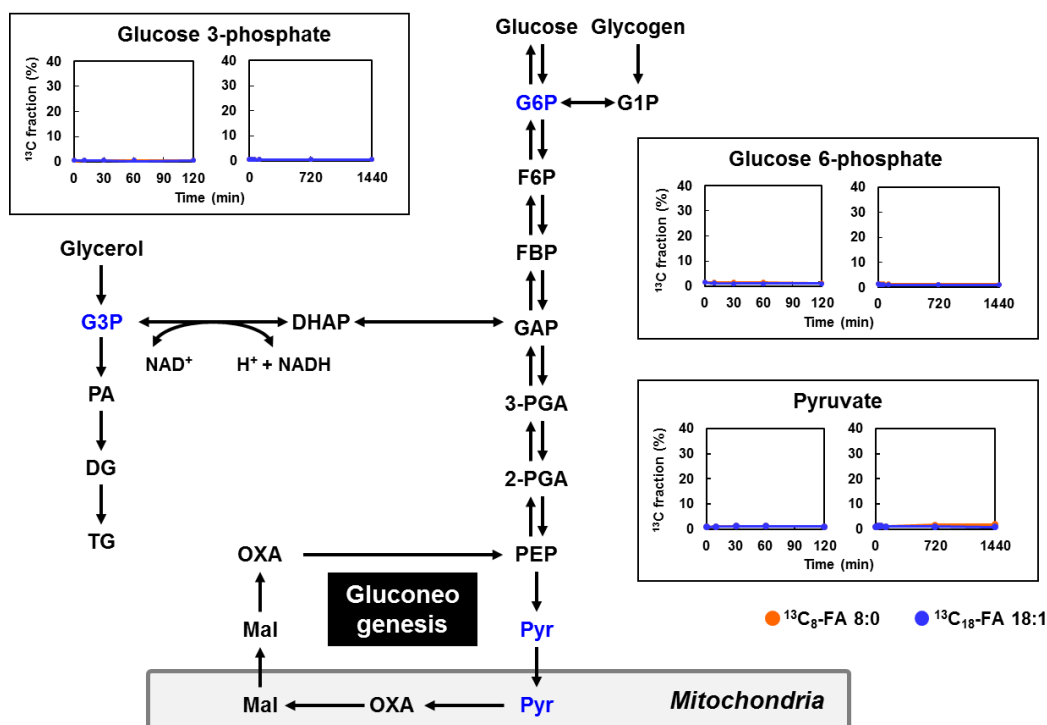


図 3-11. $^{13}\text{C}_8\text{-FA 8:0}$ または $^{13}\text{C}_{18}\text{-FA 18:1}$ で処理した AML12 細胞中の G3P, G6P の標識化率の経時変化 ($n = 4$)

標識化率は平均値 $\pm$ 標準偏差で示した.

略号 : G1P, glucose 1-phosphate; G6P, glucose 6-phosphate; G3P, glucose 3-phosphate; F6P, fructose 6-phosphate; FBP, fructose 1,6-bisphosphate; GAP, glyceraldehyde 3-phosphate; DHAP, dihydroxyacetone phosphate; 3-PGA, 3-phosphoglyceric acid; 2-PGA, 2-phosphoglyceric acid; PEP, phosphoenolpyruvate.

最後に、細胞内 TGs の標識化率を算出し、AML12 細胞が TG の *de novo* 合成に外因性の FA を利用しているか否か評価した. 第二章で実施したリピドーム解析に基づいて、FA 8:0 または FA 18:1 処理した細胞で代表的な 5 種の TG を評価のために選択した. $^{13}\text{C}_{18}\text{-FA18:1}$ で処理した細胞における 3 種の TG (TG 16:0-18:1-18:1, TG 16:1-18:1-18:1 および TG 18:1-18:1-18:1) の相対的な蓄積量および標識化率は $^{13}\text{C}_8\text{-FA 8:0}$ で処理した細胞と比較して有意に高値を示した (図 3-12). 対照的に、FA 8:0 を構成 FA として有する 2 種の TG (TG 8:0-16:0-18:1 および TG 8:0-8:0-8:0) の標識化率は $^{13}\text{C}_8\text{-FA 8:0}$ で処理した細胞において 1%未満であった (図 3-12). これまでの研

究では、グリセロリン酸アシル基転移酵素は長鎖アシル-CoA を基質として優先的に使用することが報告されており⁶⁴、中鎖アシル-CoA (8:0-CoA およびデカノイル-CoA [10:0-CoA]) は TG やリン脂質には取り込まれにくいことが報告されている⁶⁵。HepG2 細胞を FA 8:0 または FA 18:1 で処理した先行研究では、外因性の FA 18:1 を直接取り込んだ TG は検出されたが、外因性の FA 8:0 の TG への直接の取り込みは検出されなかった⁶⁶。ラット肝初代培養細胞を用いた先行研究では、8:0-CoA および 10:0-CoA は DG とリン脂質合成に関わるアシル基転移酵素の基質ではなく、DG から TG 合成に関わる DG アシル基転移酵素の基質としてのみ機能することが示唆されている⁶⁷。一方で、¹³C₈-FA 8:0 で処理した細胞において 3 種の TG (TG 16:0-18:1-18:1, TG 16:1-18:1-18:1 および TG 18:1-18:1-18:1) の蓄積量は、¹³C₁₈-FA 18:1 処理と比較して著しく低値を示すものの、標識化率は時間依存的に増加した。この結果は、FA 8:0 が分解、伸長反応によって別の FAs に変換された後に TG に取り込まれることを示唆している。以上から、今回の試験における TGs のターンオーバー解析の結果は、以前になされている報告を支持するものであり、細胞に取り込まれる FA 8:0 が TG には容易に資化されないことを定量的に示した初めての実験結果である。

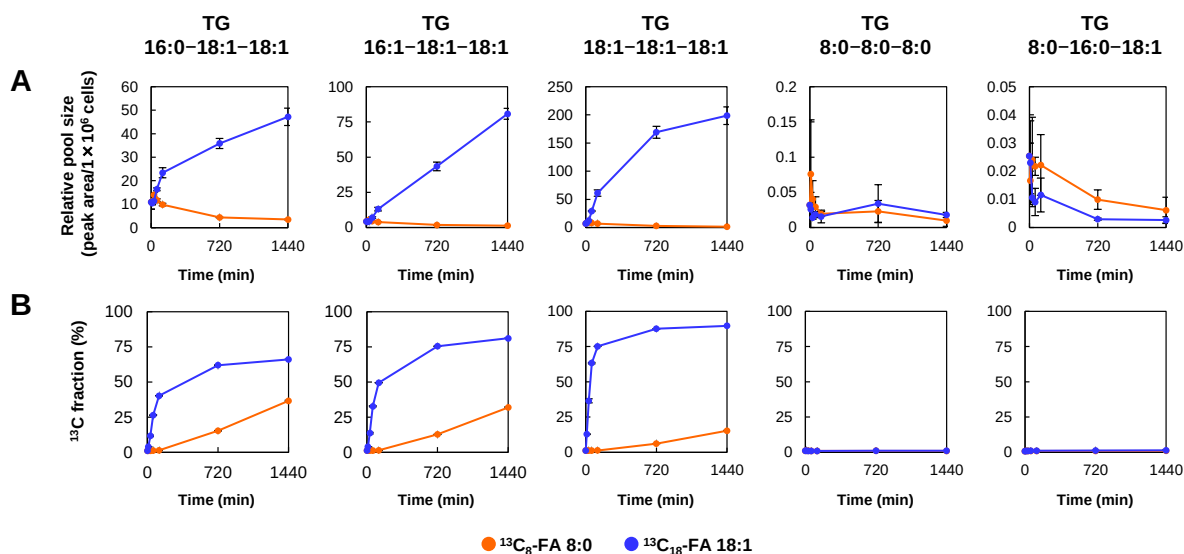
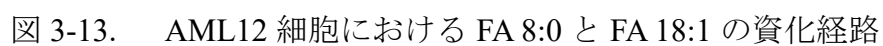


図 3-12. $^{13}\text{C}_8\text{-FA 8:0}$ または $^{13}\text{C}_{18}\text{-FA 18:1}$ で処理した AML12 細胞中の 5 種の TGs の (A) 蓄積量と (B) 標識化率の経時変化 ($n = 4$)

蓄積量，標識化率はそれぞれ平均値 $\pm$ 標準偏差で示した。

3.4. 小括

本章では，メタボローム分析技術と安定同位体標識を組み合わせた代謝ターンオーバー解析によって，FA 8:0 と FA 18:1 の資化動態を観測した．FA 8:0 は β 酸化によって容易にアセチル-CoA に変換され，さらにクエン酸回路中間体やケトン体へと変換されることを明らかにした．また，クエン酸回路中間体である 2-ケトグルタル酸を介して一部の糖原生アミノ酸に変換され，細胞系外へと排出されることを初めて明らかにした．また，TG への資化は限定的であり，一部は分解，伸長反応を受けた後に TG に取り込まれることが示唆された．一方の FA 18:1 は TG 合成の基質として利用されやすいことを示した．以上の結果から，AML12 細胞における FA 8:0 と FA 18:1 の資化経路を正確かつ定量的に評価することに成功した (図 3-13)．



第四章 総括と展望

本研究では、複数のメタボローム分析法を活用して AML12 細胞における MCFAs の代謝機能を評価した。

第二章では、測定対象となる代謝物の物理的特性に応じて、3 種の親水性代謝物解析と 2 種の疎水性代謝物解析を実施することで、各 FA 処理した AML12 細胞から 183 種の親水性代謝物および 688 種の疎水性代謝物の計 871 種の代謝物を同定することに成功した。取得データを用いた代謝プロファイルから、FA 12:0 処理は他の MCFAs 処理 (FA 8:0 および FA 10:0) と比較して代謝プロファイルが大きく異なり、脂質の増加、特に TG, Cholesterol, ChE, PE, LPE, LPC, Cer, HexCer を増加させることを明らかにした。そのため、様々な医療効果を持つと期待されているココナッツ油の過剰摂取は脂肪肝を促進する可能性が示された。一方の FA 8:0 および FA 10:0 による処理はケトン体産生を亢進することを示した。特に FA 8:0 はコントロールと比較して TG 組成を変化させるものの、TG 量並びにその他脂質量においても有意な差は見られなかった。LCFAs に分類される FA 18:1 による処理は TG 合成経路に関与する PA, DG, TG 量を増加させ、TG 合成の基質として利用されることが示唆された。

第三章では、メタボローム分析技術と安定同位体標識を組み合わせた代謝ターンオーバー解析を活用し、AML12 細胞を $^{13}\text{C}_8$ -FA 8:0 および $^{13}\text{C}_{18}$ -FA 18:1 で処理することで FA の代謝動態を評価した。その結果、FA 8:0 によるケトン体産生亢進は β 酸化によって FA 8:0 から変換されたアセチル-CoA を基質として産生されることを定量的評価によって明らかにした。また、FA 8:0 から変換されたアセチル-CoA はクエン酸回路中間体、一部の糖原生アミノ酸に資化されることを示した。一方の FA 18:1 は第二章で示唆された TG 合成の基質として資化されることを定量的に示した。本研究では代謝物の網羅的解析に留まっているため、脂質代謝酵素やアミノ酸代謝酵素の遺伝子発現解析を今後実施することで、これらの仮説の検証を進めたいと考える。

本博士論文では、MCFA/LCFA 間、MCFA 種間の包括的かつ定量的な代謝評価によ

って、MCFAs の代謝特性、代謝運命を明らかにした。現在、MCTs およびココナッツ油による様々な医学効果が期待されているが、油脂中の MCFAs の組成によって影響が大きく異なることが示唆された。肝臓は生体内においてケトン体産生のであるため、ケトン体による医学効果を期待する場合は FA 12:0 が豊富なココナッツ油と比較して、FA 8:0 および FA 10:0 が大半を占める MCT が効果的であると考えられる。骨格筋^{68,69}や脂肪細胞^{70,71}においても MCFAs は LCFAs とは異なる特性を示すことが報告されているが、MCFAs 種に起因する代謝の相違を包括的に評価するためには更なる研究が必要である。現在、脳に対する FA 8:0 および FA 10:0 の作用が異なることを示す報告がなされている。ヒト人工多能性幹細胞由来のアストロサイトを用いた研究では、FA 8:0 はアストロサイトでのケトン体産生を促進する一方で、FA 10:0 は解糖系および乳酸産生を促進することが報告されている⁷²。また、別の報告では、FA10:0 処理は FA 8:0 と比較して、細胞内グルタチオン濃度の上昇を示し、 β 酸化経路の途中で逆反応である伸長反応に代謝が流れやすいことが示唆されている⁷³。膠芽腫細胞を用いた研究では、FA 8:0 処理はケトン体産生を増加させる一方で、FA 10:0 処理は主に脂肪酸合成を促進することが示されている⁷⁴。今回実施した代謝プロファイリングおよび代謝ターンオーバー解析手法を動物モデルや他の細胞種へ適用していくことで、MCFA の新たな代謝特性や機能の発見に貢献できると考えられる。

MCTs は栄養補給や疾患の改善を目的とした食事療法への利用が期待されている一方で、消化時の不快感の発生や過剰摂取による副作用も認められている。本研究が、栄養状態や疾患に応じて、構成する FA の種類や結合位置をアレンジした油脂を提供するための一助となり、油脂を通じた世界における健康課題の改善に繋がることを期待して、本博士論文の結びの言葉とする。

謝辞

本研究を遂行するにあたり，格別なる御指導と御鞭撻を賜りました九州大学大学院システム生命科学府システム生命科学専攻の馬場健史教授，和泉自泰准教授に謹んで感謝の意を表します．博士論文の主査を快諾して下さい，御指導，御助言，および御校閲を賜りました諸橋憲一郎教授に厚く御礼を申し上げます．副査を快諾して下さい，御指導，御助言，および御校閲を賜りました神田大輔教授，久保田浩行教授に厚く御礼申し上げます．

研究に関する技術や知識等，数多くの御指導および，研究室生活全般において大変お世話になりました九州大学大学院システム生命科学府システム生命科学専攻生命医科学講座メタボロミクス分野の方々に深く感謝致します．特に，質量分析計の操作方法等の技術的な御指導を頂きました，高橋政友特任助教，細胞培養手法等について技術的な御指導を頂きました，秦康祐博士，中谷航太博士，データ解析方法等について御指導頂きました，中尾素直博士，油屋駿介博士に心より御礼申し上げます．

本研究を遂行する機会を下さいました，日清オイリオグループ株式会社 山内勝昭執行役員，上田善博理事（前中央研究所長），福島朱美前理事，土屋欣也理事（現中央研究所長），佐藤知栄実氏に厚く御礼申し上げます．本研究の遂行および論文執筆等多岐にわたり御指導を頂きました村野賢博博士に厚く御礼申し上げます．本研究に温かい御支援と御協力を頂きました日清オイリオグループ株式会社 中央研究所の皆様に深く感謝致します．

最後に，常日頃より私を支えてくれている妻・弥生に心より感謝致します．

引用文献

- (1) Dayrit, F. M. The Properties of Lauric Acid and Their Significance in Coconut Oil. *J. Am. Oil Chem. Soc.* **2015**, 92, 1–15.
- (2) Babayan, V. K. Medium-Chain Triglycerides-Their Composition, Preparation, and Application. *J. Am. Oil Chem. Soc.* **1968**, 45, 23–25.
- (3) Takeuchi, H.; Sekine, S.; Seto, A. Medium-Chain Fatty Acids – Nutritional Function and Application to Cooking Oil. *Lipid Technol.* **2008**, 20, 9–12.
- (4) Zhou, S.; Wang, Y.; Jacoby, J. J.; Jiang, Y.; Zhang, Y.; Yu, L. L. Effects of Medium- and Long-Chain Triacylglycerols on Lipid Metabolism and Gut Microbiota Composition in C57BL/6J Mice. *J. Agric. Food Chem.* **2017**, 65, 6599–6607.
- (5) Pan, X.; Hussain, M. M. Gut Triglyceride Production. *Biochim. Biophys. Acta - Mol. Cell Biol. Lipids* **2012**, 1821, 727–735.
- (6) Liao, T. H.; Hamosh, P.; Hamosh, M. Fat Digestion by Lingual Lipase: Mechanism of Lipolysis in the Stomach and Upper Small Intestine. *Pediatr. Res.* **1984**, 18, 402–409.
- (7) Liao, T. H.; Hamosh, P.; Hamosh, M. Gastric Lipolysis in the Developing Rat Ontogeny of the Lipases Active in the Stomach. *Biochim. Biophys. Acta* **1983**, 754, 1–9.
- (8) Bach, A. C.; Babayan, V. K. Medium-Chain Triglycerides: An Update. *Am. J. Clin. Nutr.* **1982**, 36, 950–962.
- (9) Papamandjaris, A. A.; Macdougall, D. E.; Jones, P. J. H. Medium Chain Fatty Acid Metabolism and Energy Expenditure: Obesity Treatment Implications. *Life Sci.* **1998**, 62, 1203–1215.
- (10) Bloom, B.; Chaikoff, I. L.; Reinhardt, W. O. Intestinal Lymph as Pathway for Transport of Absorbed Fatty Acids of Different Chain Lengths. *Am. J. Physiol. Content* **1951**, 166, 451–455.

- (11) Williamson, J. R.; Browning, E. T.; Scholz, R.; Kreisberg, R. A.; Fritz, I. B. Inhibition of Fatty Acid Stimulation of Gluconeogenesis by (+)-Decanoylcarnitine in Perfused Rat Liver. *Diabetes* **1968**, *17*, 194–208.
- (12) Bach, A.; Phan, T.; Metais, P. Effect of the Fatty Acid Composition of Ingested Rats on Rat Liver Intermediary Metabolism. *Horm. Metab. Res.* **1976**, *8*, 375–379.
- (13) Bach, A.; Debry, G.; Metais, P. Hepatic Metabolism of Medium Chain Triglycerides. *Bibl. Nutr. Dieta* **1977**, *25*, 24–35.
- (14) Lopes-Cardozo, M.; Van den Bergh, S. G. Ketogenesis in Isolated Rat Liver Mitochondria. III. Relationship with the Rate of β -Oxidation. *Biochim. Biophys. Acta - Bioenerg.* **1974**, *357*, 53–62.
- (15) Tsuji, H.; Kasai, M.; Takeuchi, H.; Nakamura, M.; Okazaki, M.; Kondo, K. Dietary Medium-Chain Triacylglycerols Suppress Accumulation of Body Fat in a Double-Blind, Controlled Trial in Healthy Men and Women. *J. Nutr.* **2001**, *131*, 2853–2859.
- (16) Newman, J. C.; Verdin, E. Ketone Bodies as Signaling Metabolites. *Trends Endocrinol. Metab.* **2014**, *25*, 42–52.
- (17) Puchalska, P.; Crawford, P. A. Multi-Dimensional Roles of Ketone Bodies in Fuel Metabolism, Signaling, and Therapeutics. *Cell Metab.* **2017**, *25*, 262–284.
- (18) Marten, B.; Pfeuffer, M.; Schrezenmeir, J. Medium-Chain Triglycerides. *Int. Dairy J.* **2006**, *16*, 1374–1382.
- (19) Bach, A. C.; Frey, A.; Lutz, O. Clinical and Experimental Effects of Medium-Chain-Triglyceride-Based Fat Emulsions-A Review. *Clin. Nutr.* **1989**, *8*, 223–235.
- (20) Mumme, K.; Stonehouse, W. Effects of Medium-Chain Triglycerides on Weight Loss and Body Composition: A Meta-Analysis of Randomized Controlled Trials. *J. Acad. Nutr. Diet.* **2015**, *115*, 249–263.
- (21) Newport, M. T.; Vanitallie, T. B.; Kashiwaya, Y.; King, M. T.; Veech, R. L. A New Way to Produce Hyperketonemia: Use of Ketone Ester in a Case of Alzheimer's

- Disease. *Alzheimer's Dement.* **2015**, *11*, 99–103.
- (22) Augustin, K.; Khabbush, A.; Williams, S.; Eaton, S.; Orford, M.; Cross, J. H.; Heales, S. J. R.; Walker, M. C.; Williams, R. S. B. Mechanisms of Action for the Medium-Chain Triglyceride Ketogenic Diet in Neurological and Metabolic Disorders. *Lancet Neurol.* **2018**, *17*, 84–93.
 - (23) Hagihara, K.; Kajimoto, K.; Osaga, S.; Nagai, N. Promising Effect of a New Ketogenic Diet Regimen In. *Nutrients* **2020**, *12*, 1473.
 - (24) Wang, B.; Fu, J.; Li, L.; Gong, D.; Wen, X.; Yu, P.; Zeng, Z. Medium-Chain Fatty Acid Reduces Lipid Accumulation by Regulating Expression of Lipid-Sensing Genes in Human Liver Cells with Steatosis. *Int. J. Food Sci. Nutr.* **2016**, *67*, 288–297.
 - (25) Rial, S. A.; Ravaut, G.; Malaret, T. B.; Bergeron, K. F.; Mounier, C. Hexanoic, Octanoic and Decanoic Acids Promote Basal and Insulin-Induced Phosphorylation of the Akt-MTOR Axis and a Balanced Lipid Metabolism in the HEPG2 Hepatoma Cell Line. *Molecules* **2018**, *23*, 1–16.
 - (26) Tachibana, S.; Sato, K.; Cho, Y.; Chiba, T.; Schneider, W. J.; Akiba, Y. Octanoate Reduces Very Low-Density Lipoprotein Secretion by Decreasing the Synthesis of Apolipoprotein B in Primary Cultures of Chicken Hepatocytes. *Biochim. Biophys. Acta* **2005**, *1737*, 36–43.
 - (27) Najbjerg, H.; Young, J. F.; Bertram, H. C. NMR-Based Metabolomics Reveals That Conjugated Double Bond Content and Lipid Storage Efficiency in HepG2 Cells Are Affected by Fatty Acid Cis/Trans Configuration and Chain Length. *J. Agric. Food Chem.* **2011**, *59*, 8994–9000.
 - (28) McDonnell, E.; Crown, S. B.; Fox, D. B.; Kitir, B.; Ilkayeva, O. R.; Olsen, C. A.; Grimsrud, P. A.; Hirschey, M. D. Lipids Reprogram Metabolism to Become a Major Carbon Source for Histone Acetylation. *Cell Rep.* **2016**, *17*, 1463–1472.
 - (29) Bligh, E. G.; Dyer, W. J. A Rapid Method of Total Lipid Extraction and Purification.

- Can. J. Biochem. Physiol.* **1959**, 37, 911–917.
- (30) Hu, S.; Wang, J.; Ji, E. H.; Christison, T.; Lopez, L.; Huang, Y. Targeted Metabolomic Analysis of Head and Neck Cancer Cells Using High Performance Ion Chromatography Coupled with a Q Exactive HF Mass Spectrometer. *Anal. Chem.* **2015**, 87, 6371–6379.
- (31) Izumi, Y.; Matsuda, F.; Hirayama, A.; Ikeda, K.; Kita, Y.; Horie, K.; Saigusa, D.; Saito, K.; Sawada, Y.; Nakanishi, H.; Okahashi, N.; Takahashi, M.; Nakao, M.; Hata, K.; Hoshi, Y.; Morihara, M.; Tanabe, K.; Bamba, T.; Oda, Y. Inter-Laboratory Comparison of Metabolite Measurements for Metabolomics Data Integration. *Metabolites* **2019**, 9, 257.
- (32) Yoshida, H.; Mizukoshi, T.; Hirayama, K.; Miyano, H. Comprehensive Analytical Method for the Determination of Hydrophilic Metabolites by High-Performance Liquid Chromatography and Mass Spectrometry. *J. Agric. Food Chem.* **2007**, 55, 551–560.
- (33) Sumner, L. W.; Amberg, A.; Barrett, D.; Beale, M. H.; Beger, R.; Daykin, C. A.; Fan, T. W. M.; Fiehn, O.; Goodacre, R.; Griffin, J. L.; Hankemeier, T.; Hardy, N.; Harnly, J.; Higashi, R.; Kopka, J.; Lane, A. N.; Lindon, J. C.; Marriott, P.; Nicholls, A. W.; Reily, M. D.; Thaden, J. J.; Viant, M. R. Proposed Minimum Reporting Standards for Chemical Analysis: Chemical Analysis Working Group (CAWG) Metabolomics Standards Initiative (MSI). *Metabolomics* **2007**, 3, 211–221.
- (34) Takeda, H.; Izumi, Y.; Takahashi, M.; Paxton, T.; Tamura, S.; Koike, T.; Yu, Y.; Kato, N.; Nagase, K.; Shiomi, M.; Bamba, T. Widely-Targeted Quantitative Lipidomics Method by Supercritical Fluid Chromatography Triple Quadrupole Mass Spectrometry. *J. Lipid Res.* **2018**, 59, 1283–1293.
- (35) Ogawa, T.; Izumi, Y.; Kusumoto, K.; Fukusaki, E.; Bamba, T. Wide Target Analysis of Acylglycerols in Miso (Japanese Fermented Soybean Paste) by Supercritical Fluid Chromatography Coupled with Triple Quadrupole Mass Spectrometry and the Analysis

- of the Correlation between Taste and Both Acylglycerols and Free Fatty. *Rapid Commun. Mass Spectrom.* **2017**, *31*, 928–936.
- (36) Tsugawa, H.; Arita, M.; Kanazawa, M.; Ogiwara, A.; Bamba, T.; Fukusaki, E. MRMPROBS: A Data Assessment and Metabolite Identification Tool for Large-Scale Multiple Reaction Monitoring Based Widely Targeted Metabolomics. *Anal. Chem.* **2013**, *85*, 5191–5199.
- (37) Chong, J.; Soufan, O.; Li, C.; Caraus, I.; Li, S.; Bourque, G.; Wishart, D. S.; Xia, J. MetaboAnalyst 4.0: Towards More Transparent and Integrative Metabolomics Analysis. *Nucleic Acids Res.* **2018**, *46*, W486–W494.
- (38) Nagarajan, SR; Paul-Heng, M; Krycer, JR; Fazakarley, DJ; Sharland, AF; Hoy, A. Lipid and Glucose Metabolism in Hepatocyte Cell Lines and Primary Mouse Hepatocytes: A Comprehensive Resource For. *Am J Physiol Endocrinol Metab* **2019**, *316*, 578–589.
- (39) Marra, F.; Svegliati-Baroni, G. Lipotoxicity and the Gut-Liver Axis in NASH Pathogenesis. *J. Hepatol.* **2018**, *68*, 280–295.
- (40) Ertunc, M. E.; Hotamisligil, G. S. Lipid Signaling and Lipotoxicity in Metaflammation: Indications for Metabolic Disease Pathogenesis and Treatment. *J. Lipid Res.* **2016**, *57*, 2099–2114.
- (41) Wei, Y.; Wang, D.; Topczewski, F.; Pagliassotti, M. J. Saturated Fatty Acids Induce Endoplasmic Reticulum Stress and Apoptosis Independently of Ceramide in Liver Cells. *Am. J. Physiol. - Endocrinol. Metab.* **2006**, *291*, 275–281.
- (42) Yang, L.; Wei, J.; Sheng, F.; Li, P. Attenuation of Palmitic Acid–Induced Lipotoxicity by Chlorogenic Acid through Activation of SIRT1 in Hepatocytes. *Mol. Nutr. Food Res.* **2019**, *63*, 1–12.
- (43) Demirel, T.; Batirel, S. Palmitic Acid Induces Endoplasmic Reticulum Stress in AML12 Liver Cells. *Marmara Med. J.* **2018**, *31*, 40–46.

- (44) Ricchi, M.; Odoardi, M. R.; Carulli, L.; Anzivino, C.; Ballestri, S.; Pinetti, A.; Fantoni, L. I.; Marra, F.; Bertolotti, M.; Banni, S.; Lonardo, A.; Carulli, N.; Loria, P. Differential Effect of Oleic and Palmitic Acid on Lipid Accumulation and Apoptosis in Cultured Hepatocytes. *J. Gastroenterol. Hepatol.* **2009**, *24*, 830–840.
- (45) Li, L.; Wang, B.; Yu, P.; Wen, X.; Gong, D.; Zeng, Z. Medium and Long Chain Fatty Acids Differentially Modulate Apoptosis and Release of Inflammatory Cytokines in Human Liver Cells. *J. Food Sci.* **2016**, *81*, H1546–H1552.
- (46) Mannaerts, G. P.; Thomas, J.; Debeer, L. J.; McGarry, J. D.; Foster, D. W. Hepatic Fatty Acid Oxidation and Ketogenesis after Clofibrate Treatment. *Biochim. Biophys. Acta* **1978**, *529*, 201–211.
- (47) Dayrit, F. M. Lauric Acid Is a Medium-Chain Fatty Acid, Coconut Oil Is a Medium-Chain Triglyceride. *Philipp. J. Sci.* **2014**, *143*, 157–166.
- (48) Schönfeld, P.; Wojtczak, L. Short- and Medium-Chain Fatty Acids in Energy Metabolism: The Cellular Perspective. *J. Lipid Res.* **2016**, *57*, 943–954.
- (49) Takeda, H.; Izumi, Y.; Tamura, S.; Koike, T.; Koike, Y.; Shiomi, M.; Bamba, T. Lipid Profiling of Serum and Lipoprotein Fractions in Response to Pitavastatin Using an Animal Model of Familial Hypercholesterolemia. *J. Proteome Res.* **2020**, *19*, 1100–1108.
- (50) Nishida-Aoki, N.; Izumi, Y.; Takeda, H.; Takahashi, M.; Ochiya, T.; Bamba, T. Lipidomic Analysis of Cells and Extracellular Vesicles from High-and Low-Metastatic Triple-Negative Breast Cancer. *Metabolites* **2020**, *10*, 67.
- (51) Kohout, M.; Kohoutova, B.; Heimberg, M. The Regulation of Hepatic Triglyceride Metabolism by Free Fatty Acids. *J. Biol. Chem.* **1971**, *246*, 5067–5074.
- (52) Fujimoto, Y.; Onoduka, J.; Homma, K. J.; Yamaguchi, S.; Mori, M.; Higashi, Y.; Makita, M.; Kinoshita, T.; Noda, J. I.; Itabe, H.; Takano, T. Long-Chain Fatty Acids Induce Lipid Droplet Formation in a Cultured Human Hepatocyte in a Manner

- Dependent of Acyl-CoA Synthetase. *Biol. Pharm. Bull.* **2006**, 29, 2174–2180.
- (53) Myoung, S. H.; Sun, Y. P.; Shinzawa, K.; Kim, S.; Kun, W. C.; Lee, J. H.; Choon, H. K.; Lee, K. W.; Lee, J. H.; Cheol, K. P.; Woo, J. C.; Jae, S. H.; Yan, J. J.; Song, D. K.; Tsujimoto, Y.; Lee, M. S. Lysophosphatidylcholine as a Death Effector in the Lipoapoptosis of Hepatocytes. *J. Lipid Res.* **2008**, 49, 84–97.
- (54) Boomgaarden, I.; Vock, C.; Klapper, M.; Döring, F. Comparative Analyses of Disease Risk Genes Belonging to the Acyl-CoA Synthetase Medium-Chain (ACSM) Family in Human Liver and Cell Lines. *Biochem. Genet.* **2009**, 47, 739–748.
- (55) Lopes-Cardozo, M.; Van den Bergh, S. G. Ketogenesis in Isolated Rat Liver Mitochondria. II. Factors Affecting the Rate of β -Oxidation. *Biochim. Biophys. Acta - Bioenerg.* **1974**, 357, 43–52.
- (56) Violante, S.; IJlst, L.; Te Brinke, H.; Koster, J.; De Almeida, I. T.; Wanders, R. J. A.; Ventura, F. V.; Houten, S. M. Peroxisomes Contribute to the Acylcarnitine Production When the Carnitine Shuttle Is Deficient. *Biochim. Biophys. Acta* **2013**, 1831, 1467–1474.
- (57) Vandenberghe, C.; St-Pierre, V.; Pierotti, T.; Fortier, M.; Castellano, C. A.; Cunnane, S. C. Tricaprylin Alone Increases Plasma Ketone Response More than Coconut Oil or Other Medium-Chain Triglycerides: An Acute Crossover Study in Healthy Adults. *Curr. Dev. Nutr.* **2017**, 1, e000257.
- (58) St-Pierre, V.; Vandenberghe, C.; Lowry, C. M.; Fortier, M.; Castellano, C. A.; Wagner, R.; Cunnane, S. C. Plasma Ketone and Medium Chain Fatty Acid Response in Humans Consuming Different Medium Chain Triglycerides during a Metabolic Study Day. *Front. Nutr.* **2019**, 6, 46.
- (59) Turner, N.; Hariharan, K.; TidAng, J.; Frangioudakis, G.; Beale, S. M.; Wright, L. E.; Zeng, X. Y.; Leslie, S. J.; Li, J. Y.; Kraegen, E. W.; Cooney, G. J.; Ye, J. M. Enhancement of Muscle Mitochondrial Oxidative Capacity and Alterations in Insulin

- Action Are Lipid Species Dependent: Potent Tissue-Specific Effects of Medium-Chain Fatty Acids. *Diabetes* **2009**, *58*, 2547–2554.
- (60) Hasunuma, T.; Harada, K.; Miyazawa, S. I.; Kondo, A.; Fukusaki, E.; Miyake, C. Metabolic Turnover Analysis by a Combination of in Vivo ^{13}C -Labelling from $^{13}\text{CO}_2$ and Metabolic Profiling with CE-MS/MS Reveals Rate-Limiting Steps of the C_3 Photosynthetic Pathway in *Nicotiana Tabacum* Leaves. *J. Exp. Bot.* **2010**, *61*, 1041–1051.
- (61) Hasunuma, T.; Kikuyama, F.; Matsuda, M.; Aikawa, S.; Izumi, Y.; Kondo, A. Dynamic Metabolic Profiling of Cyanobacterial Glycogen Biosynthesis under Conditions of Nitrate Depletion. *J. Exp. Bot.* **2013**, *64*, 2943–2954.
- (62) Kojima, K.; Ogawa, A.; Nakamura, R.; Kasai, M. Effect of Dietary Medium-Chain Triacylglycerol on Serum Albumin and Nitrogen Balance in Malnourished Rats. *J. Clin. Biochem. Nutr.* **2008**, *42*, 45–49.
- (63) Fery, F.; Plat, L.; Melot, C.; Balasse, E. O. Role of Fat-Derived Substrates in the Regulation of Gluconeogenesis during Fasting. *Am. J. Physiol. Metab.* **1996**, *270*, E822–E830.
- (64) Daae, L. N. W. The Acylation of Glycerophosphate in Rat Liver Mitochondria and Microsomes as a Function of Fatty Acid Chain-Length. *FEBS Lett.* **1972**, *27*, 46–48.
- (65) McGarry, J. D.; Foster, D. W. Regulation of Hepatic Fatty Acid Oxidation and Ketone Body Production. *Annu. Rev. Biochem.* **1980**, *49*, 395–420.
- (66) Guo, W.; Choi, J. K.; Kirkland, J. L.; Corkey, B. E.; Hamilton, J. A. Esterification of Free Fatty Acids in Adipocytes: A Comparison between Octanoate and Oleate. *Biochem. J.* **2000**, *349*, 463–471.
- (67) Mayorek, N.; Bar Tana, J. Medium Chain Fatty Acids as Specific Substrates for Diglyceride Acyltransferase in Cultured Hepatocytes. *J. Biol. Chem.* **1983**, *258*, 6789–6792.

- (68) Ishizawa, R.; Masuda, K.; Sakata, S.; Nakatani, A. Effects of Different Fatty Acid Chain Lengths on Fatty Acid Oxidation-Related Protein Expression Levels in Rat Skeletal Muscles. *J. Oleo Sci.* **2015**, *64*, 415–421.
- (69) Montgomery, M. K.; Osborne, B.; Brown, S. H. J.; Small, L.; Mitchell, T. W.; Cooney, G. J.; Turner, N. Contrasting Metabolic Effects of Medium-versus Long-Chain Fatty Acids in Skeletal Muscle. *J. Lipid Res.* **2013**, *54*, 3322–3333.
- (70) Guo, W.; Lei, T.; Wang, T.; Corkey, B. E.; Han, J. Octanoate Inhibits Triglyceride Synthesis in 3T3-L1 and Human Adipocytes. *J. Nutr.* **2003**, *133*, 2512–2518.
- (71) Guo, W.; Xie, W.; Han, J. Modulation of Adipocyte Lipogenesis by Octanoate: Involvement of Reactive Oxygen Species. *Nutr. Metabol.* **2006**, *3*, 1–8.
- (72) Thevenet, J.; De Marchi, U.; Domingo, J. S.; Christinat, N.; Bultot, L.; Lefebvre, G.; Sakamoto, K.; Descombes, P.; Masoodi, M.; Wiederkehr, A. Medium-Chain Fatty Acids Inhibit Mitochondrial Metabolism in Astrocytes Promoting Astrocyte-Neuron Lactate and Ketone Body Shuttle Systems. *FASEB J.* **2016**, *30*, 1913–1926.
- (73) Sonnay, S.; Chakrabarti, A.; Thevenet, J.; Wiederkehr, A.; Christinat, N.; Masoodi, M. Differential Metabolism of Medium-Chain Fatty Acids in Differentiated Human-Induced Pluripotent Stem Cell-Derived Astrocytes. *Front. Physiol.* **2019**, *10*, 657.
- (74) Damiano, F.; De Benedetto, G. E.; Longo, S.; Giannotti, L.; Fico, D.; Siculella, L.; Giudetti, A. M. Decanoic Acid and Not Octanoic Acid Stimulates Fatty Acid Synthesis in U87MG Glioblastoma Cells: A Metabolomics Study. *Front. Neurosci.* **2020**, *14*, 1–11.

論文目録

本博士論文に關与する論文

1. **Fushimi, T.**; Izumi, Y.; Takahashi, M.; Hata, K.; Murano, Y.; Bamba, T. Dynamic Metabolome Analysis Reveals the Metabolic Fate of Medium-Chain Fatty Acids in AML12 Cells. *J. Agric. Food Chem.* **2020**, 68, 11997–12010.

補足資料

補足表 1. 第二章で同定した疎水性代謝物の MRM 条件

Lipid	Molecular formula	Exact mass	Method	Precursor ion	Product ion (s) <i>m/z</i>	MRM transition (s) <i>m/z</i>
Cer (d18:1-14:0)	C ₃₂ H ₆₃ NO ₃	509.48	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[C ₁₈ H ₃₄ N] ⁺ (264.3)	510.5 > 264.25
Cer (d18:1-16:0)	C ₃₄ H ₆₇ NO ₃	537.51	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[C ₁₈ H ₃₄ N] ⁺ (264.3)	538.5 > 264.25
Cer (d18:1-16:1)	C ₃₄ H ₆₅ NO ₃	535.50	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[C ₁₈ H ₃₄ N] ⁺ (264.3)	536.5 > 264.25
Cer (d18:1-18:0)	C ₃₆ H ₇₁ NO ₃	565.54	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[C ₁₈ H ₃₄ N] ⁺ (264.3)	566.55 > 264.25
Cer (d18:1-18:2)	C ₃₆ H ₆₉ NO ₃	561.51	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[C ₁₈ H ₃₄ N] ⁺ (264.3)	562.5 > 264.25
Cer (d18:1-20:0)	C ₃₈ H ₇₅ NO ₃	593.57	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[C ₁₈ H ₃₄ N] ⁺ (264.3)	594.6 > 264.25
Cer (d18:1-20:2)	C ₃₈ H ₇₃ NO ₃	589.54	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[C ₁₈ H ₃₄ N] ⁺ (264.3)	590.55 > 264.25
Cer (d18:1-20:4)	C ₃₈ H ₆₇ NO ₃	585.51	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[C ₁₈ H ₃₄ N] ⁺ (264.3)	586.5 > 264.25
Cer (d18:1-22:0)	C ₄₀ H ₇₉ NO ₃	621.61	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[C ₁₈ H ₃₄ N] ⁺ (264.3)	622.6 > 264.25
Cer (d18:1-22:1)	C ₄₀ H ₇₇ NO ₃	619.59	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[C ₁₈ H ₃₄ N] ⁺ (264.3)	620.6 > 264.25
Cer (d18:1-22:2)	C ₄₀ H ₇₅ NO ₃	617.57	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[C ₁₈ H ₃₄ N] ⁺ (264.3)	618.6 > 264.25
Cer (d18:1-22:3)	C ₄₀ H ₇₃ NO ₃	615.56	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[C ₁₈ H ₃₄ N] ⁺ (264.3)	616.55 > 264.25
Cer (d18:1-22:4)	C ₄₀ H ₇₁ NO ₃	613.54	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[C ₁₈ H ₃₄ N] ⁺ (264.3)	614.55 > 264.25
Cer (d18:1-22:5)	C ₄₀ H ₆₉ NO ₃	611.53	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[C ₁₈ H ₃₄ N] ⁺ (264.3)	612.55 > 264.25
DG (12:0-12:0)	C ₂₇ H ₅₂ O ₅	456.38	DEA-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	474.4 > 257.2
DG (12:0-14:0)	C ₂₉ H ₅₆ O ₅	484.41	DEA-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	502.45 > 285.25, 502.45 > 257.2
DG (12:0-16:0)	C ₃₁ H ₆₀ O ₅	512.44	DEA-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	530.5 > 313.25, 530.5 > 257.2
DG (12:0-16:1)	C ₃₁ H ₅₈ O ₅	510.43	DEA-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	528.45 > 311.25, 528.45 > 257.2
DG (12:0-18:0)	C ₃₃ H ₆₄ O ₅	540.48	DEA-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	558.5 > 341.3, 558.5 > 257.2

DG (12:0–18:1)	C ₃₃ H ₆₂ O ₅	538.46	DEA-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	556.5 > 339.3, 556.5 > 257.2
DG (14:0–16:0)	C ₃₃ H ₆₄ O ₅	540.48	DEA-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	558.5 > 313.25, 558.5 > 285.25
DG (14:0–16:1)	C ₃₃ H ₆₂ O ₅	538.46	DEA-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	556.5 > 311.25, 556.5 > 285.25
DG (14:0–18:0)	C ₃₅ H ₆₈ O ₅	568.51	DEA-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	586.55 > 341.3, 586.55 > 285.25
DG (14:0–18:1)	C ₃₅ H ₆₆ O ₅	566.49	DEA-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	584.5 > 339.3, 584.5 > 285.25
DG (16:0–16:0)	C ₃₅ H ₆₈ O ₅	568.51	DEA-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	586.55 > 313.25
DG (16:0–16:1)	C ₃₅ H ₆₆ O ₅	566.49	DEA-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	584.5 > 311.25, 584.5 > 313.25
DG (16:0–18:0)	C ₃₇ H ₇₂ O ₅	596.54	DEA-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	614.55 > 341.3, 614.55 > 313.25
DG (16:0–18:1)	C ₃₇ H ₇₀ O ₅	594.52	DEA-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	612.55 > 339.3, 612.55 > 313.25
DG (16:0–18:2)	C ₃₇ H ₆₈ O ₅	592.51	DEA-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	610.55 > 337.25, 610.55 > 313.25
DG (16:0–20:0)	C ₃₉ H ₇₆ O ₅	624.57	DEA-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	642.6 > 369.35, 642.6 > 313.25
DG (16:0–20:1)	C ₃₉ H ₇₄ O ₅	622.55	DEA-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	640.6 > 367.3, 640.6 > 313.25
DG (16:0–20:4)	C ₃₉ H ₆₈ O ₅	616.51	DEA-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	634.55 > 361.25, 634.55 > 313.25
DG (16:1–16:1)	C ₃₅ H ₆₄ O ₅	564.48	DEA-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	582.5 > 311.25
DG (16:1–18:0)	C ₃₇ H ₇₀ O ₅	594.52	DEA-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	612.55 > 341.3, 612.55 > 311.25
DG (16:1–18:1)	C ₃₇ H ₆₈ O ₅	592.51	DEA-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	610.55 > 339.3, 610.55 > 311.25
DG (16:1–20:0)	C ₃₉ H ₇₄ O ₅	622.55	DEA-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	640.6 > 369.35, 640.6 > 311.25
DG (18:0–18:0)	C ₃₉ H ₇₆ O ₅	624.57	DEA-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	642.6 > 341.3
DG (18:0–18:1)	C ₃₉ H ₇₄ O ₅	622.55	DEA-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	640.6 > 339.3, 640.6 > 341.3
DG (18:1–18:1)	C ₃₉ H ₇₂ O ₅	620.54	DEA-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	638.55 > 339.3
DG (18:1–20:1)	C ₄₁ H ₇₆ O ₅	648.57	DEA-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	666.6 > 367.3, 666.6 > 339.3
HexCer (d18:1–10:0)	C ₃₄ H ₆₅ NO ₈	615.47	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[C ₁₈ H ₃₄ N] ⁺ (264.3)	616.5 > 264.25
HexCer (d18:1–12:0)	C ₃₆ H ₆₉ NO ₈	643.50	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[C ₁₈ H ₃₄ N] ⁺ (264.3)	644.5 > 264.25
HexCer (d18:1–16:0)	C ₄₀ H ₇₇ NO ₈	699.56	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[C ₁₈ H ₃₄ N] ⁺ (264.3)	700.55 > 264.25
HexCer (d18:1–22:0)	C ₄₆ H ₈₉ NO ₈	783.66	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[C ₁₈ H ₃₄ N] ⁺ (264.3)	784.65 > 264.25

HexCer (d18:1–22:2)	C ₄₆ H ₈₅ NO ₈	779.63	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[C ₁₈ H ₃₄ N] ⁺ (264.3)	780.65 > 264.25
LPC (12:0)	C ₂₀ H ₄₂ NO ₇ P	439.27	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[C ₅ H ₁₅ O ₄ NP] ⁺	440.3 > 184.05
LPC (14:0)	C ₂₂ H ₄₆ NO ₇ P	467.30	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[C ₅ H ₁₅ O ₄ NP] ⁺	468.3 > 184.05
LPC (16:0)	C ₂₄ H ₅₀ NO ₇ P	495.33	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[C ₅ H ₁₅ O ₄ NP] ⁺	496.35 > 184.05
LPC (16:1)	C ₂₄ H ₄₈ NO ₇ P	493.32	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[C ₅ H ₁₅ O ₄ NP] ⁺	494.3 > 184.05
LPC (18:0)	C ₂₆ H ₅₄ NO ₇ P	523.36	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[C ₅ H ₁₅ O ₄ NP] ⁺	524.35 > 184.05
LPC (18:1)	C ₂₆ H ₅₂ NO ₇ P	521.35	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[C ₅ H ₁₅ O ₄ NP] ⁺	522.35 > 184.05
LPC (18:2)	C ₂₆ H ₅₀ NO ₇ P	519.33	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[C ₅ H ₁₅ O ₄ NP] ⁺	520.35 > 184.05
LPC (18:3)	C ₂₆ H ₄₈ NO ₇ P	517.32	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[C ₅ H ₁₅ O ₄ NP] ⁺	518.3 > 184.05
LPC (20:0)	C ₂₈ H ₅₈ NO ₇ P	551.40	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[C ₅ H ₁₅ O ₄ NP] ⁺	552.4 > 184.05
LPC (20:1)	C ₂₈ H ₅₆ NO ₇ P	549.38	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[C ₅ H ₁₅ O ₄ NP] ⁺	550.4 > 184.05
LPC (20:2)	C ₂₈ H ₅₄ NO ₇ P	547.36	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[C ₅ H ₁₅ O ₄ NP] ⁺	548.35 > 184.05
LPC (20:3)	C ₂₈ H ₅₂ NO ₇ P	545.35	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[C ₅ H ₁₅ O ₄ NP] ⁺	546.35 > 184.05
LPC (20:4)	C ₂₈ H ₅₀ NO ₇ P	543.33	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[C ₅ H ₁₅ O ₄ NP] ⁺	544.35 > 184.05
LPC (20:5)	C ₂₈ H ₄₈ NO ₇ P	541.32	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[C ₅ H ₁₅ O ₄ NP] ⁺	542.3 > 184.05
LPC (22:0)	C ₃₀ H ₆₂ NO ₇ P	579.43	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[C ₅ H ₁₅ O ₄ NP] ⁺	580.45 > 184.05
LPC (22:1)	C ₃₀ H ₆₀ NO ₇ P	577.41	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[C ₅ H ₁₅ O ₄ NP] ⁺	578.4 > 184.05
LPC (22:3)	C ₃₀ H ₅₆ NO ₇ P	573.38	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[C ₅ H ₁₅ O ₄ NP] ⁺	574.4 > 184.05
LPC (22:4)	C ₃₀ H ₅₄ NO ₇ P	571.36	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[C ₅ H ₁₅ O ₄ NP] ⁺	572.35 > 184.05
LPC (22:5)	C ₃₀ H ₅₂ NO ₇ P	569.35	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[C ₅ H ₁₅ O ₄ NP] ⁺	570.35 > 184.05
LPC (22:6)	C ₃₀ H ₅₀ NO ₇ P	567.33	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[C ₅ H ₁₅ O ₄ NP] ⁺	568.35 > 184.05
LPE (16:0)	C ₂₁ H ₄₄ NO ₇ P	453.29	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[M + H - C ₂ H ₈ O ₄ NP] ⁺	454.3 > 313.25
LPE (16:1)	C ₂₁ H ₄₂ NO ₇ P	451.27	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[M + H - C ₂ H ₈ O ₄ NP] ⁺	452.3 > 311.25
LPE (18:0)	C ₂₃ H ₄₈ NO ₇ P	481.32	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[M + H - C ₂ H ₈ O ₄ NP] ⁺	482.3 > 341.3
LPE (18:1)	C ₂₃ H ₄₆ NO ₇ P	479.30	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[M + H - C ₂ H ₈ O ₄ NP] ⁺	480.3 > 339.3

LPE (20:1)	C ₂₅ H ₅₀ NO ₇ P	507.33	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[M + H - C ₂ H ₈ O ₄ NP] ⁺	508.35 > 367.3
LPE (20:2)	C ₂₅ H ₄₈ NO ₇ P	505.32	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[M + H - C ₂ H ₈ O ₄ NP] ⁺	506.3 > 365.3
LPE (20:4)	C ₂₅ H ₄₄ NO ₇ P	501.29	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[M + H - C ₂ H ₈ O ₄ NP] ⁺	502.3 > 361.25
LPE (22:4)	C ₂₇ H ₄₈ NO ₇ P	529.32	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[M + H - C ₂ H ₈ O ₄ NP] ⁺	530.3 > 389.3
LPE (22:5)	C ₂₇ H ₄₆ NO ₇ P	527.30	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[M + H - C ₂ H ₈ O ₄ NP] ⁺	528.3 > 387.3
LPE (22:6)	C ₂₇ H ₄₄ NO ₇ P	525.29	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[M + H - C ₂ H ₈ O ₄ NP] ⁺	526.3 > 385.25
MG (10:0)	C ₁₃ H ₂₆ O ₄	246.18	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[M + H - H ₂ O] ⁺	247.2 > 229.2
MG (12:0)	C ₁₅ H ₃₀ O ₄	274.21	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[M + H - H ₂ O] ⁺	275.2 > 257.2
MG (14:0)	C ₁₇ H ₃₄ O ₄	302.25	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[M + H - H ₂ O] ⁺	303.25 > 285.25
MG (16:0)	C ₁₉ H ₃₈ O ₄	330.28	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[M + H - H ₂ O] ⁺	331.3 > 313.25
MG (16:1)	C ₁₉ H ₃₆ O ₄	328.26	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[M + H - H ₂ O] ⁺	329.25 > 311.25
MG (18:0)	C ₂₁ H ₄₂ O ₄	358.31	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[M + H - H ₂ O] ⁺	359.3 > 341.3
MG (18:1)	C ₂₁ H ₄₀ O ₄	356.29	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[M + H - H ₂ O] ⁺	357.3 > 339.3
MG (18:2)	C ₂₁ H ₃₈ O ₄	354.28	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[M + H - H ₂ O] ⁺	355.3 > 337.25
MG (20:2)	C ₂₃ H ₄₂ O ₄	382.31	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[M + H - H ₂ O] ⁺	383.3 > 365.3
PA (18:0–18:1)	C ₃₉ H ₇₅ O ₈ P	702.52	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	701.5 > 283.25, 701.5 > 281.25
PC (10:0–16:0)	C ₃₄ H ₆₈ NO ₈ P	649.47	DEA-SFC/MS/MS	[M + CH ₃ COO] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	708.5 > 171.15, 708.5 > 255.25
PC (10:0–16:1)	C ₃₄ H ₆₆ NO ₈ P	647.45	DEA-SFC/MS/MS	[M + CH ₃ COO] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	706.45 > 171.15, 706.45 > 253.2
PC (10:0–18:0)	C ₃₆ H ₇₂ NO ₈ P	677.50	DEA-SFC/MS/MS	[M + CH ₃ COO] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	736.5 > 171.15, 736.5 > 283.25
PC (10:0–18:1)	C ₃₆ H ₇₀ NO ₈ P	675.48	DEA-SFC/MS/MS	[M + CH ₃ COO] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	734.5 > 171.15, 734.5 > 281.25
PC (12:0–12:0)	C ₃₂ H ₆₄ NO ₈ P	621.44	DEA-SFC/MS/MS	[M + CH ₃ COO] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	680.45 > 199.15
PC (12:0–14:0)	C ₃₄ H ₆₈ NO ₈ P	649.47	DEA-SFC/MS/MS	[M + CH ₃ COO] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	708.5 > 199.15, 708.5 > 227.2
PC (12:0–16:0)	C ₃₆ H ₇₂ NO ₈ P	677.50	DEA-SFC/MS/MS	[M + CH ₃ COO] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	736.5 > 199.15, 736.5 > 255.25
PC (12:0–16:1)	C ₃₆ H ₇₀ NO ₈ P	675.48	DEA-SFC/MS/MS	[M + CH ₃ COO] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	734.5 > 199.15, 734.5 > 253.2
PC (12:0–18:0)	C ₃₈ H ₇₆ NO ₈ P	705.53	DEA-SFC/MS/MS	[M + CH ₃ COO] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	764.55 > 199.15, 764.55 > 283.25

PC (12:0–18:1)	C ₃₈ H ₇₄ NO ₈ P	703.52	DEA-SFC/MS/MS	[M + CH ₃ COO] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	762.55 > 199.15, 762.55 > 281.25
PC (12:0–18:2)	C ₃₈ H ₇₂ NO ₈ P	701.50	DEA-SFC/MS/MS	[M + CH ₃ COO] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	760.5 > 199.15, 760.5 > 279.25
PC (12:0–20:4)	C ₄₀ H ₇₂ NO ₈ P	725.50	DEA-SFC/MS/MS	[M + CH ₃ COO] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	784.5 > 199.15, 784.5 > 303.25
PC (14:0–14:0)	C ₃₆ H ₇₂ NO ₈ P	677.50	DEA-SFC/MS/MS	[M + CH ₃ COO] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	736.5 > 227.2
PC (14:0–16:0)	C ₃₈ H ₇₆ NO ₈ P	705.53	DEA-SFC/MS/MS	[M + CH ₃ COO] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	764.55 > 227.2, 764.55 > 255.25
PC (14:0–16:1)	C ₃₈ H ₇₄ NO ₈ P	703.52	DEA-SFC/MS/MS	[M + CH ₃ COO] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	762.55 > 227.2, 762.55 > 253.2
PC (14:0–18:1)	C ₄₀ H ₇₈ NO ₈ P	731.55	DEA-SFC/MS/MS	[M + CH ₃ COO] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	790.55 > 227.2, 790.55 > 281.25
PC (14:0–18:2)	C ₄₀ H ₇₆ NO ₈ P	729.53	DEA-SFC/MS/MS	[M + CH ₃ COO] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	788.55 > 227.2, 788.55 > 279.25
PC (16:0–16:0)	C ₄₀ H ₈₀ NO ₈ P	733.56	DEA-SFC/MS/MS	[M + CH ₃ COO] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	792.6 > 255.25
PC (16:0–16:1)	C ₄₀ H ₇₈ NO ₈ P	731.55	DEA-SFC/MS/MS	[M + CH ₃ COO] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	790.55 > 255.25, 790.55 > 253.2
PC (16:0–18:0)	C ₄₂ H ₈₄ NO ₈ P	761.59	DEA-SFC/MS/MS	[M + CH ₃ COO] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	820.6 > 255.25, 820.6 > 283.25
PC (16:0–18:1)	C ₄₂ H ₈₂ NO ₈ P	759.58	DEA-SFC/MS/MS	[M + CH ₃ COO] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	818.6 > 255.25, 818.6 > 281.25
PC (16:0–18:2)	C ₄₂ H ₈₀ NO ₈ P	757.56	DEA-SFC/MS/MS	[M + CH ₃ COO] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	816.6 > 255.25, 816.6 > 279.25
PC (16:0–18:3)	C ₄₂ H ₇₈ NO ₈ P	755.55	DEA-SFC/MS/MS	[M + CH ₃ COO] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	814.55 > 255.25, 814.55 > 277.2
PC (16:0–20:0)	C ₄₄ H ₈₈ NO ₈ P	789.62	DEA-SFC/MS/MS	[M + CH ₃ COO] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	848.65 > 255.25, 848.65 > 311.3
PC (16:0–20:1)	C ₄₄ H ₈₆ NO ₈ P	787.61	DEA-SFC/MS/MS	[M + CH ₃ COO] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	846.6 > 255.25, 846.6 > 309.3
PC (16:0–20:2)	C ₄₄ H ₈₄ NO ₈ P	785.59	DEA-SFC/MS/MS	[M + CH ₃ COO] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	844.6 > 255.25, 844.6 > 307.25
PC (16:0–20:3)	C ₄₄ H ₈₂ NO ₈ P	783.58	DEA-SFC/MS/MS	[M + CH ₃ COO] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	842.6 > 255.25, 842.6 > 305.25
PC (16:0–20:4)	C ₄₄ H ₈₀ NO ₈ P	781.56	DEA-SFC/MS/MS	[M + CH ₃ COO] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	840.6 > 255.25, 840.6 > 303.25
PC (16:0–20:5)	C ₄₄ H ₇₈ NO ₈ P	779.55	DEA-SFC/MS/MS	[M + CH ₃ COO] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	838.55 > 255.25, 838.55 > 301.2
PC (16:0–22:4)	C ₄₆ H ₈₄ NO ₈ P	809.59	DEA-SFC/MS/MS	[M + CH ₃ COO] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	868.6 > 255.25, 868.6 > 331.25
PC (16:0–22:5)	C ₄₆ H ₈₂ NO ₈ P	807.58	DEA-SFC/MS/MS	[M + CH ₃ COO] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	866.6 > 255.25, 866.6 > 329.25
PC (16:0–22:6)	C ₄₆ H ₈₀ NO ₈ P	805.56	DEA-SFC/MS/MS	[M + CH ₃ COO] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	864.6 > 255.25, 864.6 > 327.25
PC (16:1–16:1)	C ₄₀ H ₇₆ NO ₈ P	729.53	DEA-SFC/MS/MS	[M + CH ₃ COO] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	788.55 > 253.2
PC (16:1–18:0)	C ₄₂ H ₈₂ NO ₈ P	759.58	DEA-SFC/MS/MS	[M + CH ₃ COO] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	818.6 > 253.2, 818.6 > 283.25

PC (16:1–18:1)	C ₄₂ H ₈₀ NO ₈ P	757.56	DEA-SFC/MS/MS	[M + CH ₃ COO] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	816.6 > 253.2, 816.6 > 281.25
PC (16:1–18:2)	C ₄₂ H ₇₈ NO ₈ P	755.55	DEA-SFC/MS/MS	[M + CH ₃ COO] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	814.55 > 253.2, 814.55 > 279.25
PC (16:1–20:0)	C ₄₄ H ₈₆ NO ₈ P	787.61	DEA-SFC/MS/MS	[M + CH ₃ COO] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	846.6 > 253.2, 846.6 > 311.3
PC (16:1–20:1)	C ₄₄ H ₈₄ NO ₈ P	785.59	DEA-SFC/MS/MS	[M + CH ₃ COO] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	844.6 > 253.2, 844.6 > 309.3
PC (16:1–20:4)	C ₄₄ H ₇₈ NO ₈ P	779.55	DEA-SFC/MS/MS	[M + CH ₃ COO] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	838.55 > 253.2, 838.55 > 303.25
PC (18:0–18:0)	C ₄₄ H ₈₈ NO ₈ P	789.62	DEA-SFC/MS/MS	[M + CH ₃ COO] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	848.65 > 283.25
PC (18:0–18:1)	C ₄₄ H ₈₆ NO ₈ P	787.61	DEA-SFC/MS/MS	[M + CH ₃ COO] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	846.6 > 283.25, 846.6 > 281.25
PC (18:0–18:2)	C ₄₄ H ₈₄ NO ₈ P	785.59	DEA-SFC/MS/MS	[M + CH ₃ COO] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	844.6 > 283.25, 844.6 > 279.25
PC (18:0–20:3)	C ₄₆ H ₈₆ NO ₈ P	811.61	DEA-SFC/MS/MS	[M + CH ₃ COO] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	870.6 > 283.25, 870.6 > 305.25
PC (18:0–20:4)	C ₄₆ H ₈₄ NO ₈ P	809.59	DEA-SFC/MS/MS	[M + CH ₃ COO] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	868.6 > 283.25, 868.6 > 303.25
PC (18:1–18:1)	C ₄₄ H ₈₄ NO ₈ P	785.59	DEA-SFC/MS/MS	[M + CH ₃ COO] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	844.6 > 281.25
PC (18:1–18:2)	C ₄₄ H ₈₂ NO ₈ P	783.58	DEA-SFC/MS/MS	[M + CH ₃ COO] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	842.6 > 281.25, 842.6 > 279.25
PC (18:1–20:0)	C ₄₆ H ₉₀ NO ₈ P	815.64	DEA-SFC/MS/MS	[M + CH ₃ COO] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	874.65 > 281.25, 874.65 > 311.3
PC (18:1–20:1)	C ₄₆ H ₈₈ NO ₈ P	813.62	DEA-SFC/MS/MS	[M + CH ₃ COO] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	872.65 > 281.25, 872.65 > 309.3
PC (18:1–20:3)	C ₄₆ H ₈₄ NO ₈ P	809.59	DEA-SFC/MS/MS	[M + CH ₃ COO] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	868.6 > 281.25, 868.6 > 305.25
PC (18:1–20:4)	C ₄₆ H ₈₂ NO ₈ P	807.58	DEA-SFC/MS/MS	[M + CH ₃ COO] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	866.6 > 281.25, 866.6 > 303.25
PC (18:1–22:1)	C ₄₈ H ₉₂ NO ₈ P	841.66	DEA-SFC/MS/MS	[M + CH ₃ COO] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	900.65 > 281.25, 900.65 > 337.3
PC (18:1–22:6)	C ₄₈ H ₈₂ NO ₈ P	831.58	DEA-SFC/MS/MS	[M + CH ₃ COO] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	890.6 > 281.25, 890.6 > 327.25
PC (18:2–20:1)	C ₄₆ H ₈₆ NO ₈ P	811.61	DEA-SFC/MS/MS	[M + CH ₃ COO] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	870.6 > 279.25, 870.6 > 309.3
PE (12:0–18:0)	C ₃₅ H ₇₀ NO ₈ P	663.48	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	662.5 > 199.15, 662.5 > 283.25
PE (12:0–18:1)	C ₃₅ H ₆₈ NO ₈ P	661.47	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	660.45 > 199.15, 660.45 > 281.25
PE (14:0–16:1)	C ₃₅ H ₆₈ NO ₈ P	661.47	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	660.45 > 227.2, 660.45 > 253.2
PE (14:0–18:1)	C ₃₇ H ₇₂ NO ₈ P	689.50	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	688.5 > 227.2, 688.5 > 281.25
PE (14:0–20:4)	C ₃₉ H ₇₀ NO ₈ P	711.48	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	710.5 > 227.2, 710.5 > 303.25
PE (16:0–16:0)	C ₃₇ H ₇₄ NO ₈ P	691.52	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	690.5 > 255.25

PE (16:0–16:1)	C ₃₇ H ₇₂ NO ₈ P	689.50	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	688.5 > 255.25, 688.5 > 253.2
PE (16:0–18:0)	C ₃₉ H ₇₈ NO ₈ P	719.55	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	718.55 > 255.25, 718.55 > 283.25
PE (16:0–18:1)	C ₃₉ H ₇₆ NO ₈ P	717.53	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	716.5 > 255.25, 716.5 > 281.25
PE (16:0–18:2)	C ₃₉ H ₇₄ NO ₈ P	715.52	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	714.5 > 255.25, 714.5 > 279.25
PE (16:0–20:1)	C ₄₁ H ₈₀ NO ₈ P	745.56	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	744.55 > 255.25, 744.55 > 309.3
PE (16:0–20:2)	C ₄₁ H ₇₈ NO ₈ P	743.55	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	742.55 > 255.25, 742.55 > 307.25
PE (16:0–20:3)	C ₄₁ H ₇₆ NO ₈ P	741.53	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	740.5 > 255.25, 740.5 > 305.25
PE (16:0–20:4)	C ₄₁ H ₇₄ NO ₈ P	739.52	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	738.5 > 255.25, 738.5 > 303.25
PE (16:0–20:5)	C ₄₁ H ₇₂ NO ₈ P	737.50	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	736.5 > 255.25, 736.5 > 301.2
PE (16:0–22:4)	C ₄₃ H ₇₈ NO ₈ P	767.55	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	766.55 > 255.25, 766.55 > 331.25
PE (16:0–22:5)	C ₄₃ H ₇₆ NO ₈ P	765.53	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	764.5 > 255.25, 764.5 > 329.25
PE (16:0–22:6)	C ₄₃ H ₇₄ NO ₈ P	763.52	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	762.5 > 255.25, 762.5 > 327.25
PE (16:1–16:1)	C ₃₇ H ₇₀ NO ₈ P	687.48	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	686.5 > 253.2
PE (16:1–18:0)	C ₃₉ H ₇₆ NO ₈ P	717.53	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	716.5 > 253.2, 716.5 > 283.25
PE (16:1–18:1)	C ₃₉ H ₇₄ NO ₈ P	715.52	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	714.5 > 253.2, 714.5 > 281.25
PE (16:1–18:2)	C ₃₉ H ₇₂ NO ₈ P	713.50	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	712.5 > 253.2, 712.5 > 279.25
PE (16:1–20:1)	C ₄₁ H ₇₈ NO ₈ P	743.55	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	742.55 > 253.2, 742.55 > 309.3
PE (16:1–20:3)	C ₄₁ H ₇₄ NO ₈ P	739.52	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	738.5 > 253.2, 738.5 > 305.25
PE (16:1–20:4)	C ₄₁ H ₇₂ NO ₈ P	737.50	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	736.5 > 253.2, 736.5 > 303.25
PE (16:1–22:4)	C ₄₃ H ₇₆ NO ₈ P	765.53	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	764.5 > 253.2, 764.5 > 331.25
PE (18:0–18:0)	C ₄₁ H ₈₂ NO ₈ P	747.58	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	746.55 > 283.25
PE (18:0–18:1)	C ₄₁ H ₈₀ NO ₈ P	745.56	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	744.55 > 283.25, 744.55 > 281.25
PE (18:0–18:2)	C ₄₁ H ₇₈ NO ₈ P	743.55	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	742.55 > 283.25, 742.55 > 279.25
PE (18:0–18:3)	C ₄₁ H ₇₆ NO ₈ P	741.53	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	740.5 > 283.25, 740.5 > 277.2
PE (18:0–20:2)	C ₄₃ H ₈₂ NO ₈ P	771.58	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	770.55 > 283.25, 770.55 > 307.25

PE (18:0–20:3)	C ₄₃ H ₈₀ NO ₈ P	769.56	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	768.55 > 283.25, 768.55 > 305.25
PE (18:0–20:4)	C ₄₃ H ₇₈ NO ₈ P	767.55	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	766.55 > 283.25, 766.55 > 303.25
PE (18:0–20:5)	C ₄₃ H ₇₆ NO ₈ P	765.53	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	764.5 > 283.25, 764.5 > 301.2
PE (18:0–22:3)	C ₄₅ H ₈₄ NO ₈ P	797.59	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	796.6 > 283.25, 796.6 > 333.3
PE (18:0–22:4)	C ₄₅ H ₈₂ NO ₈ P	795.58	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	794.55 > 283.25, 794.55 > 331.25
PE (18:0–22:5)	C ₄₅ H ₈₀ NO ₈ P	793.56	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	792.55 > 283.25, 792.55 > 329.25
PE (18:0–22:6)	C ₄₅ H ₇₈ NO ₈ P	791.55	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	790.55 > 283.25, 790.55 > 327.25
PE (18:1–18:1)	C ₄₁ H ₇₈ NO ₈ P	743.55	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	742.55 > 281.25
PE (18:1–18:2)	C ₄₁ H ₇₆ NO ₈ P	741.53	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	740.5 > 281.25, 740.5 > 279.25
PE (18:1–18:3)	C ₄₁ H ₇₄ NO ₈ P	739.52	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	738.5 > 281.25, 738.5 > 277.2
PE (18:1–20:0)	C ₄₃ H ₈₄ NO ₈ P	773.59	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	772.6 > 281.25, 772.6 > 311.3
PE (18:1–20:1)	C ₄₃ H ₈₂ NO ₈ P	771.58	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	770.55 > 281.25, 770.55 > 309.3
PE (18:1–20:2)	C ₄₃ H ₈₀ NO ₈ P	769.56	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	768.55 > 281.25, 768.55 > 307.25
PE (18:1–20:3)	C ₄₃ H ₇₈ NO ₈ P	767.55	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	766.55 > 281.25, 766.55 > 305.25
PE (18:1–20:4)	C ₄₃ H ₇₆ NO ₈ P	765.53	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	764.5 > 281.25, 764.5 > 303.25
PE (18:1–20:5)	C ₄₃ H ₇₄ NO ₈ P	763.52	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	762.5 > 281.25, 762.5 > 301.2
PE (18:1–22:4)	C ₄₅ H ₈₀ NO ₈ P	793.56	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	792.55 > 281.25, 792.55 > 331.25
PE (18:1–22:5)	C ₄₅ H ₇₈ NO ₈ P	791.55	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	790.55 > 281.25, 790.55 > 329.25
PE (18:1–22:6)	C ₄₅ H ₇₆ NO ₈ P	789.53	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	788.5 > 281.25, 788.5 > 327.25
PE (20:0–20:4)	C ₄₅ H ₈₂ NO ₈ P	795.58	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	794.55 > 311.3, 794.55 > 303.25
PE (20:1–20:4)	C ₄₅ H ₈₀ NO ₈ P	793.56	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	792.55 > 309.3, 792.55 > 303.25
PG (12:0–18:0)	C ₃₆ H ₇₁ O ₁₀ P	694.48	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	693.45 > 199.15, 693.45 > 283.25
PG (12:0–18:1)	C ₃₆ H ₆₉ O ₁₀ P	692.46	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	691.45 > 199.15, 691.45 > 281.25
PG (14:0–16:0)	C ₃₆ H ₇₁ O ₁₀ P	694.48	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	693.45 > 227.2, 693.45 > 255.25
PG (16:0–16:0)	C ₃₈ H ₇₅ O ₁₀ P	722.51	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	721.5 > 255.25

PG (16:0–16:1)	C ₃₈ H ₇₃ O ₁₀ P	720.49	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	719.5 > 255.25, 719.5 > 253.2
PG (16:0–18:0)	C ₄₀ H ₇₉ O ₁₀ P	750.54	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	749.55 > 255.25, 749.55 > 283.25
PG (16:0–18:1)	C ₄₀ H ₇₇ O ₁₀ P	748.53	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	747.5 > 255.25, 747.5 > 281.25
PG (16:1–18:1)	C ₄₀ H ₇₅ O ₁₀ P	746.51	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	745.5 > 253.2, 745.5 > 281.25
PG (18:1–18:1)	C ₄₂ H ₇₉ O ₁₀ P	774.54	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	773.55 > 281.25
PG (18:1–18:2)	C ₄₂ H ₇₇ O ₁₀ P	772.53	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	771.5 > 281.25, 771.5 > 279.25
PG (18:1–20:4)	C ₄₄ H ₇₇ O ₁₀ P	796.53	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	795.5 > 281.25, 795.5 > 303.25
PG (18:1–22:5)	C ₄₆ H ₇₉ O ₁₀ P	822.54	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	821.55 > 281.25, 821.55 > 329.25
PG (22:6–22:6)	C ₅₀ H ₇₅ O ₁₀ P	866.51	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	865.5 > 327.25
PI (16:0–16:0)	C ₄₁ H ₇₉ O ₁₃ P	810.53	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	809.5 > 255.25
PI (16:0–16:1)	C ₄₁ H ₇₇ O ₁₃ P	808.51	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	807.5 > 255.25, 807.5 > 253.2
PI (16:0–18:0)	C ₄₃ H ₈₃ O ₁₃ P	838.56	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	837.55 > 255.25, 837.55 > 283.25
PI (16:0–18:1)	C ₄₃ H ₈₁ O ₁₃ P	836.54	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	835.55 > 255.25, 835.55 > 281.25
PI (16:0–18:2)	C ₄₃ H ₇₉ O ₁₃ P	834.53	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	833.5 > 255.25, 833.5 > 279.25
PI (16:0–20:2)	C ₄₅ H ₈₃ O ₁₃ P	862.56	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	861.55 > 255.25, 861.55 > 307.25
PI (16:0–20:3)	C ₄₅ H ₈₁ O ₁₃ P	860.54	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	859.55 > 255.25, 859.55 > 305.25
PI (16:0–20:4)	C ₄₅ H ₇₉ O ₁₃ P	858.53	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	857.5 > 255.25, 857.5 > 303.25
PI (16:1–16:1)	C ₄₁ H ₇₅ O ₁₃ P	806.49	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	805.5 > 253.2
PI (16:1–18:0)	C ₄₃ H ₈₁ O ₁₃ P	836.54	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	835.55 > 253.2, 835.55 > 283.25
PI (16:1–18:1)	C ₄₃ H ₇₉ O ₁₃ P	834.53	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	833.5 > 253.2, 833.5 > 281.25
PI (18:0–18:1)	C ₄₅ H ₈₅ O ₁₃ P	864.57	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	863.55 > 283.25, 863.55 > 281.25
PI (18:0–18:2)	C ₄₅ H ₈₃ O ₁₃ P	862.56	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	861.55 > 283.25, 861.55 > 279.25
PI (18:0–20:2)	C ₄₇ H ₈₇ O ₁₃ P	890.59	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	889.6 > 283.25, 889.6 > 307.25
PI (18:0–20:3)	C ₄₇ H ₈₅ O ₁₃ P	888.57	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	887.55 > 283.25, 887.55 > 305.25
PI (18:0–20:4)	C ₄₇ H ₈₃ O ₁₃ P	886.56	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	885.55 > 283.25, 885.55 > 303.25

PI (18:0–20:5)	C ₄₇ H ₈₁ O ₁₃ P	884.54	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	883.55 > 283.25, 883.55 > 301.2
PI (18:0–22:4)	C ₄₉ H ₈₇ O ₁₃ P	914.59	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	913.6 > 283.25, 913.6 > 331.25
PI (18:0–22:5)	C ₄₉ H ₈₅ O ₁₃ P	912.57	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	911.55 > 283.25, 911.55 > 329.25
PI (18:1–18:1)	C ₄₅ H ₈₃ O ₁₃ P	862.56	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	861.55 > 281.25
PI (18:1–18:2)	C ₄₅ H ₈₁ O ₁₃ P	860.54	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	859.55 > 281.25, 859.55 > 279.25
PI (18:1–20:3)	C ₄₇ H ₈₃ O ₁₃ P	886.56	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	885.55 > 281.25, 885.55 > 305.25
PI (18:1–20:4)	C ₄₇ H ₈₁ O ₁₃ P	884.54	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	883.55 > 281.25, 883.55 > 303.25
PI (20:0–20:4)	C ₄₉ H ₈₇ O ₁₃ P	914.59	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	913.6 > 311.3, 913.6 > 303.25
PS (16:0–16:1)	C ₃₈ H ₇₂ NO ₁₀ P	733.49	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	732.5 > 255.25, 732.5 > 253.2
PS (16:0–18:1)	C ₄₀ H ₇₆ NO ₁₀ P	761.52	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	760.5 > 255.25, 760.5 > 281.25
PS (16:1–18:0)	C ₄₀ H ₇₆ NO ₁₀ P	761.52	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	760.5 > 253.2, 760.5 > 283.25
PS (18:0–18:0)	C ₄₂ H ₈₂ NO ₁₀ P	791.57	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	790.55 > 283.25
PS (18:0–18:1)	C ₄₂ H ₈₀ NO ₁₀ P	789.55	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	788.55 > 283.25, 788.55 > 281.25
PS (18:0–18:2)	C ₄₂ H ₇₈ NO ₁₀ P	787.54	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	786.55 > 283.25, 786.55 > 279.25
PS (18:0–20:3)	C ₄₄ H ₈₀ NO ₁₀ P	813.55	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	812.55 > 283.25, 812.55 > 305.25
PS (18:0–20:4)	C ₄₄ H ₇₈ NO ₁₀ P	811.54	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	810.55 > 283.25, 810.55 > 303.25
PS (18:0–22:4)	C ₄₆ H ₈₂ NO ₁₀ P	839.57	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	838.55 > 283.25, 838.55 > 331.25
PS (18:0–22:5)	C ₄₆ H ₈₀ NO ₁₀ P	837.55	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	836.55 > 283.25, 836.55 > 329.25
PS (18:0–22:6)	C ₄₆ H ₇₈ NO ₁₀ P	835.54	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	834.55 > 283.25, 834.55 > 327.25
PS (18:1–18:1)	C ₄₂ H ₇₈ NO ₁₀ P	787.54	DEA-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[Acyl FA - H] ⁻	786.55 > 281.25
SM (d18:1–10:0)	C ₃₃ H ₆₇ N ₂ O ₆ P	618.47	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[C ₅ H ₁₅ O ₄ NP] ⁺ (184.1)	619.5 > 184.05
SM (d18:1–12:0)	C ₃₅ H ₇₁ N ₂ O ₆ P	646.50	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[C ₅ H ₁₅ O ₄ NP] ⁺ (184.1)	647.5 > 184.05
SM (d18:1–14:0)	C ₃₇ H ₇₅ N ₂ O ₆ P	674.54	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[C ₅ H ₁₅ O ₄ NP] ⁺ (184.1)	675.55 > 184.05
SM (d18:1–16:0)	C ₃₉ H ₇₉ N ₂ O ₆ P	702.57	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[C ₅ H ₁₅ O ₄ NP] ⁺ (184.1)	703.55 > 184.05
SM (d18:1–16:1)	C ₃₉ H ₇₇ N ₂ O ₆ P	700.55	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[C ₅ H ₁₅ O ₄ NP] ⁺ (184.1)	701.55 > 184.05

SM (d18:1-18:0)	C ₄₁ H ₈₃ N ₂ O ₆ P	730.60	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[C ₅ H ₁₅ O ₄ NP] ⁺ (184.1)	731.6 > 184.05
SM (d18:1-18:1)	C ₄₁ H ₈₁ N ₂ O ₆ P	728.58	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[C ₅ H ₁₅ O ₄ NP] ⁺ (184.1)	729.6 > 184.05
SM (d18:1-18:2)	C ₄₁ H ₇₉ N ₂ O ₆ P	726.57	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[C ₅ H ₁₅ O ₄ NP] ⁺ (184.1)	727.55 > 184.05
SM (d18:1-18:3)	C ₄₁ H ₇₇ N ₂ O ₆ P	724.55	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[C ₅ H ₁₅ O ₄ NP] ⁺ (184.1)	725.55 > 184.05
SM (d18:1-20:0)	C ₄₃ H ₈₇ N ₂ O ₆ P	758.63	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[C ₅ H ₁₅ O ₄ NP] ⁺ (184.1)	759.65 > 184.05
SM (d18:1-20:1)	C ₄₃ H ₈₅ N ₂ O ₆ P	756.61	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[C ₅ H ₁₅ O ₄ NP] ⁺ (184.1)	757.6 > 184.05
SM (d18:1-20:2)	C ₄₃ H ₈₃ N ₂ O ₆ P	754.60	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[C ₅ H ₁₅ O ₄ NP] ⁺ (184.1)	755.6 > 184.05
SM (d18:1-20:3)	C ₄₃ H ₈₁ N ₂ O ₆ P	752.58	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[C ₅ H ₁₅ O ₄ NP] ⁺ (184.1)	753.6 > 184.05
SM (d18:1-20:4)	C ₄₃ H ₇₉ N ₂ O ₆ P	750.57	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[C ₅ H ₁₅ O ₄ NP] ⁺ (184.1)	751.55 > 184.05
SM (d18:1-20:5)	C ₄₃ H ₇₇ N ₂ O ₆ P	748.55	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[C ₅ H ₁₅ O ₄ NP] ⁺ (184.1)	749.55 > 184.05
SM (d18:1-22:0)	C ₄₅ H ₉₁ N ₂ O ₆ P	786.66	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[C ₅ H ₁₅ O ₄ NP] ⁺ (184.1)	787.65 > 184.05
SM (d18:1-22:1)	C ₄₅ H ₈₉ N ₂ O ₆ P	784.65	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[C ₅ H ₁₅ O ₄ NP] ⁺ (184.1)	785.65 > 184.05
SM (d18:1-22:2)	C ₄₅ H ₈₇ N ₂ O ₆ P	782.63	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[C ₅ H ₁₅ O ₄ NP] ⁺ (184.1)	783.65 > 184.05
SM (d18:1-22:3)	C ₄₅ H ₈₅ N ₂ O ₆ P	780.61	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[C ₅ H ₁₅ O ₄ NP] ⁺ (184.1)	781.6 > 184.05
SM (d18:1-22:4)	C ₄₅ H ₈₃ N ₂ O ₆ P	778.60	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[C ₅ H ₁₅ O ₄ NP] ⁺ (184.1)	779.6 > 184.05
SM (d18:1-22:5)	C ₄₅ H ₈₁ N ₂ O ₆ P	776.58	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[C ₅ H ₁₅ O ₄ NP] ⁺ (184.1)	777.6 > 184.05
SM (d18:1-22:6)	C ₄₅ H ₇₉ N ₂ O ₆ P	774.57	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[C ₅ H ₁₅ O ₄ NP] ⁺ (184.1)	775.55 > 184.05
SM (d18:1-8:0)	C ₃₁ H ₆₃ N ₂ O ₆ P	590.44	DEA-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	[C ₅ H ₁₅ O ₄ NP] ⁺ (184.1)	591.45 > 184.05
Cholesterol	C ₂₇ H ₄₆ O	386.35	C18-SFC/MS/MS	[M + H] ⁺	(147.1)	369.35>147.10, 369.35>287.40
ChE (12:0)	C ₃₉ H ₆₈ O ₂	568.52	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[C ₂₇ H ₄₅] ⁺ (369.4)	586.55>369.35
ChE (14:0)	C ₄₁ H ₇₂ O ₂	596.55	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[C ₂₇ H ₄₅] ⁺ (369.4)	614.60>369.35
ChE (16:0)	C ₄₃ H ₇₆ O ₂	624.58	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[C ₂₇ H ₄₅] ⁺ (369.4)	642.60>369.35
ChE (16:1)	C ₄₃ H ₇₄ O ₂	622.57	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[C ₂₇ H ₄₅] ⁺ (369.4)	640.60>369.35
ChE (18:0)	C ₄₅ H ₈₀ O ₂	652.62	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[C ₂₇ H ₄₅] ⁺ (369.4)	670.65>369.35
ChE (18:1)	C ₄₅ H ₇₈ O ₂	650.60	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[C ₂₇ H ₄₅] ⁺ (369.4)	668.65>369.35

ChE (18:2)	C ₄₅ H ₇₆ O ₂	648.58	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[C ₂₇ H ₄₅] ⁺ (369.4)	666.60>369.35
ChE (18:3)	C ₄₅ H ₇₄ O ₂	646.57	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[C ₂₇ H ₄₅] ⁺ (369.4)	664.60>369.35
ChE (20:0)	C ₄₇ H ₈₄ O ₂	680.65	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[C ₂₇ H ₄₅] ⁺ (369.4)	698.70>369.35
ChE (20:1)	C ₄₇ H ₈₂ O ₂	678.63	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[C ₂₇ H ₄₅] ⁺ (369.4)	696.65>369.35
ChE (20:2)	C ₄₇ H ₈₀ O ₂	676.62	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[C ₂₇ H ₄₅] ⁺ (369.4)	694.65>369.35
ChE (20:3)	C ₄₇ H ₇₈ O ₂	674.60	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[C ₂₇ H ₄₅] ⁺ (369.4)	692.65>369.35
ChE (20:4)	C ₄₇ H ₇₆ O ₂	672.58	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[C ₂₇ H ₄₅] ⁺ (369.4)	690.60>369.35
ChE (20:5)	C ₄₇ H ₇₄ O ₂	670.57	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[C ₂₇ H ₄₅] ⁺ (369.4)	688.60>369.35
ChE (22:0)	C ₄₉ H ₈₈ O ₂	708.68	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[C ₂₇ H ₄₅] ⁺ (369.4)	726.70>369.35
ChE (22:1)	C ₄₉ H ₈₆ O ₂	706.66	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[C ₂₇ H ₄₅] ⁺ (369.4)	724.70>369.35
ChE (22:2)	C ₄₉ H ₈₄ O ₂	704.65	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[C ₂₇ H ₄₅] ⁺ (369.4)	722.70>369.35
ChE (22:3)	C ₄₉ H ₈₂ O ₂	702.63	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[C ₂₇ H ₄₅] ⁺ (369.4)	720.65>369.35
ChE (22:4)	C ₄₉ H ₈₀ O ₂	700.62	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[C ₂₇ H ₄₅] ⁺ (369.4)	718.65>369.35
ChE (22:5)	C ₄₉ H ₇₈ O ₂	698.60	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[C ₂₇ H ₄₅] ⁺ (369.4)	716.65>369.35
ChE (22:6)	C ₄₉ H ₇₆ O ₂	696.58	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[C ₂₇ H ₄₅] ⁺ (369.4)	714.60>369.35
FA (10:0)	C ₁₀ H ₂₀ O ₂	172.15	C18-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[M - H] ⁻	171.15 > 171.15
FA (12:0)	C ₁₂ H ₂₄ O ₂	200.18	C18-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[M - H] ⁻	199.15 > 199.15
FA (14:0)	C ₁₄ H ₂₈ O ₂	228.21	C18-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[M - H] ⁻	227.2 > 227.2
FA (16:0)	C ₁₆ H ₃₂ O ₂	256.24	C18-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[M - H] ⁻	255.25 > 255.25
FA (16:1)	C ₁₆ H ₃₀ O ₂	254.22	C18-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[M - H] ⁻	253.2 > 253.2
FA (18:0)	C ₁₈ H ₃₆ O ₂	284.27	C18-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[M - H] ⁻	283.25 > 283.25
FA (18:1)	C ₁₈ H ₃₄ O ₂	282.26	C18-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[M - H] ⁻	281.25 > 281.25
FA (18:2)	C ₁₈ H ₃₂ O ₂	280.24	C18-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[M - H] ⁻	279.25 > 279.25
FA (18:3)	C ₁₈ H ₃₀ O ₂	278.22	C18-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[M - H] ⁻	277.2 > 277.2
FA (20:0)	C ₂₀ H ₄₀ O ₂	312.30	C18-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[M - H] ⁻	311.3 > 311.3

FA (20:4)	C ₂₀ H ₃₂ O ₂	304.24	C18-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[M - H] ⁻	303.25 > 303.25
FA (22:0)	C ₂₂ H ₄₄ O ₂	340.33	C18-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[M - H] ⁻	339.35 > 339.35
FA (22:2)	C ₂₂ H ₄₀ O ₂	336.30	C18-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[M - H] ⁻	335.3 > 335.3
FA (8:0)	C ₈ H ₁₆ O ₂	144.12	C18-SFC/MS/MS	[M - H] ⁻	[M - H] ⁻	143.1 > 143.1
TG (10:0-10:0-12:0)	C ₃₅ H ₆₆ O ₆	582.49	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	600.5 > 411.35, 600.5 > 383.3
TG (10:0-10:0-14:0)	C ₃₇ H ₇₀ O ₆	610.52	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	628.55 > 439.4, 628.55 > 383.3
TG (10:0-10:0-16:0)	C ₃₉ H ₇₄ O ₆	638.55	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	656.6 > 467.4, 656.6 > 383.3
TG (10:0-10:0-16:1)	C ₃₉ H ₇₂ O ₆	636.53	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	654.55 > 465.4, 654.55 > 383.3
TG (10:0-10:0-18:0)	C ₄₁ H ₇₈ O ₆	666.58	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	684.6 > 495.45, 684.6 > 383.3
TG (10:0-10:0-18:1)	C ₄₁ H ₇₆ O ₆	664.56	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	682.6 > 493.45, 682.6 > 383.3
TG (10:0-12:0-12:0)	C ₃₇ H ₇₀ O ₆	610.52	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	628.55 > 439.4, 628.55 > 411.35
TG (10:0-12:0-14:0)	C ₃₉ H ₇₄ O ₆	638.55	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	656.6 > 467.4, 656.6 > 439.4, 656.6 > 411.35
TG (10:0-12:0-16:0)	C ₄₁ H ₇₈ O ₆	666.58	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	684.6 > 495.45, 684.6 > 467.4, 684.6 > 411.35
TG (10:0-12:0-16:1)	C ₄₁ H ₇₆ O ₆	664.56	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	682.6 > 493.45, 682.6 > 465.4, 682.6 > 411.35
TG (10:0-12:0-18:0)	C ₄₃ H ₈₂ O ₆	694.61	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	712.65 > 523.45, 712.65 > 495.45, 712.65 > 411.35
TG (10:0-12:0-18:1)	C ₄₃ H ₈₀ O ₆	692.60	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	710.65 > 521.45, 710.65 > 493.45, 710.65 > 411.35
TG (10:0-12:0-18:2)	C ₄₃ H ₇₈ O ₆	690.58	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	708.6 > 519.45, 708.6 > 491.4, 708.6 > 411.35
TG (10:0-14:0-14:0)	C ₄₁ H ₇₈ O ₆	666.58	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	684.6 > 495.45, 684.6 > 439.4
TG (10:0-14:0-16:0)	C ₄₃ H ₈₂ O ₆	694.61	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	712.65 > 523.45, 712.65 > 467.4, 712.65 > 439.4
TG (10:0-14:0-16:1)	C ₄₃ H ₈₀ O ₆	692.60	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	710.65 > 521.45, 710.65 > 465.4, 710.65 > 439.4
TG (10:0-14:0-18:0)	C ₄₅ H ₈₆ O ₆	722.64	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	740.7 > 551.5, 740.7 > 495.45, 740.7 > 439.4
TG (10:0-14:0-18:1)	C ₄₅ H ₈₄ O ₆	720.63	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	738.65 > 549.5, 738.65 > 493.45, 738.65 > 439.4
TG (10:0-14:0-18:2)	C ₄₅ H ₈₂ O ₆	718.61	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	736.65 > 547.45, 736.65 > 491.4, 736.65 > 439.4
TG (10:0-16:0-16:0)	C ₄₅ H ₈₆ O ₆	722.64	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	740.7 > 551.5, 740.7 > 467.4
TG (10:0-16:0-16:1)	C ₄₅ H ₈₄ O ₆	720.63	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	738.65 > 549.5, 738.65 > 465.4, 738.65 > 467.4

TG (10:0-16:0-18:0)	C ₄₇ H ₉₀ O ₆	750.67	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	768.7 > 579.55, 768.7 > 495.45, 768.7 > 467.4
TG (10:0-16:0-18:1)	C ₄₇ H ₈₈ O ₆	748.66	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	766.7 > 577.5, 766.7 > 493.45, 766.7 > 467.4
TG (10:0-16:0-18:2)	C ₄₇ H ₈₆ O ₆	746.64	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	764.7 > 575.5, 764.7 > 491.4, 764.7 > 467.4
TG (10:0-16:1-16:1)	C ₄₅ H ₈₂ O ₆	718.61	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	736.65 > 547.45, 736.65 > 465.4
TG (10:0-16:1-18:0)	C ₄₇ H ₈₈ O ₆	748.66	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	766.7 > 577.5, 766.7 > 495.45, 766.7 > 465.4
TG (10:0-16:1-18:1)	C ₄₇ H ₈₆ O ₆	746.64	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	764.7 > 575.5, 764.7 > 493.45, 764.7 > 465.4
TG (10:0-18:0-18:0)	C ₄₉ H ₉₄ O ₆	778.71	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	796.75 > 607.55, 796.75 > 495.45
TG (10:0-18:0-18:1)	C ₄₉ H ₉₂ O ₆	776.69	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	794.7 > 605.55, 794.7 > 493.45, 794.7 > 495.45
TG (10:0-18:0-18:2)	C ₄₉ H ₉₀ O ₆	774.67	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	792.7 > 603.55, 792.7 > 491.4, 792.7 > 495.45
TG (10:0-18:1-18:1)	C ₄₉ H ₉₀ O ₆	774.67	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	792.7 > 603.55, 792.7 > 493.45
TG (10:0-18:1-18:2)	C ₄₉ H ₈₈ O ₆	772.66	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	790.7 > 601.5, 790.7 > 491.4, 790.7 > 493.45
TG (12:0-12:0-12:0)	C ₃₉ H ₇₄ O ₆	638.55	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	656.6 > 439.4
TG (12:0-12:0-14:0)	C ₄₁ H ₇₈ O ₆	666.58	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	684.6 > 467.4, 684.6 > 439.4
TG (12:0-12:0-16:0)	C ₄₃ H ₈₂ O ₆	694.61	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	712.65 > 495.45, 712.65 > 439.4
TG (12:0-12:0-16:1)	C ₄₃ H ₈₀ O ₆	692.60	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	710.65 > 493.45, 710.65 > 439.4
TG (12:0-12:0-18:0)	C ₄₅ H ₈₆ O ₆	722.64	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	740.7 > 523.45, 740.7 > 439.4
TG (12:0-12:0-18:1)	C ₄₅ H ₈₄ O ₆	720.63	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	738.65 > 521.45, 738.65 > 439.4
TG (12:0-12:0-18:2)	C ₄₅ H ₈₂ O ₆	718.61	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	736.65 > 519.45, 736.65 > 439.4
TG (12:0-14:0-14:0)	C ₄₃ H ₈₂ O ₆	694.61	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	712.65 > 495.45, 712.65 > 467.4
TG (12:0-14:0-16:0)	C ₄₅ H ₈₆ O ₆	722.64	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	740.7 > 523.45, 740.7 > 495.45, 740.7 > 467.4
TG (12:0-14:0-16:1)	C ₄₅ H ₈₄ O ₆	720.63	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	738.65 > 521.45, 738.65 > 493.45, 738.65 > 467.4
TG (12:0-14:0-18:0)	C ₄₇ H ₉₀ O ₆	750.67	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	768.7 > 551.5, 768.7 > 523.45, 768.7 > 467.4
TG (12:0-14:0-18:1)	C ₄₇ H ₈₈ O ₆	748.66	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	766.7 > 549.5, 766.7 > 521.45, 766.7 > 467.4
TG (12:0-14:0-18:2)	C ₄₇ H ₈₆ O ₆	746.64	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	764.7 > 547.45, 764.7 > 519.45, 764.7 > 467.4
TG (12:0-16:0-16:0)	C ₄₇ H ₉₀ O ₆	750.67	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	768.7 > 551.5, 768.7 > 495.45

TG (12:0-16:0-16:1)	C ₄₇ H ₈₈ O ₆	748.66	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	766.7 > 549.5, 766.7 > 493.45, 766.7 > 495.45
TG (12:0-16:0-18:0)	C ₄₉ H ₉₄ O ₆	778.71	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	796.75 > 579.55, 796.75 > 523.45, 796.75 > 495.45
TG (12:0-16:0-18:1)	C ₄₉ H ₉₂ O ₆	776.69	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	794.7 > 577.5, 794.7 > 521.45, 794.7 > 495.45
TG (12:0-16:0-18:2)	C ₄₉ H ₉₀ O ₆	774.67	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	792.7 > 575.5, 792.7 > 519.45, 792.7 > 495.45
TG (12:0-16:1-16:1)	C ₄₇ H ₈₆ O ₆	746.64	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	764.7 > 547.45, 764.7 > 493.45
TG (12:0-16:1-18:0)	C ₄₉ H ₉₂ O ₆	776.69	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	794.7 > 577.5, 794.7 > 523.45, 794.7 > 493.45
TG (12:0-16:1-18:1)	C ₄₉ H ₉₀ O ₆	774.67	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	792.7 > 575.5, 792.7 > 521.45, 792.7 > 493.45
TG (12:0-16:1-18:2)	C ₄₉ H ₈₈ O ₆	772.66	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	790.7 > 573.5, 790.7 > 519.45, 790.7 > 493.45
TG (12:0-18:0-18:0)	C ₅₁ H ₉₈ O ₆	806.74	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	824.75 > 607.55, 824.75 > 523.45
TG (12:0-18:0-18:1)	C ₅₁ H ₉₆ O ₆	804.72	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	822.75 > 605.55, 822.75 > 521.45, 822.75 > 523.45
TG (12:0-18:0-18:2)	C ₅₁ H ₉₄ O ₆	802.71	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	820.75 > 603.55, 820.75 > 519.45, 820.75 > 523.45
TG (12:0-18:1-18:1)	C ₅₁ H ₉₄ O ₆	802.71	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	820.75 > 603.55, 820.75 > 521.45
TG (12:0-18:1-18:2)	C ₅₁ H ₉₂ O ₆	800.69	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	818.7 > 601.5, 818.7 > 519.45, 818.7 > 521.45
TG (14:0-14:0-14:0)	C ₄₅ H ₈₆ O ₆	722.64	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	740.7 > 495.45
TG (14:0-14:0-16:0)	C ₄₇ H ₉₀ O ₆	750.67	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	768.7 > 523.45, 768.7 > 495.45
TG (14:0-14:0-16:1)	C ₄₇ H ₈₈ O ₆	748.66	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	766.7 > 521.45, 766.7 > 495.45
TG (14:0-14:0-18:0)	C ₄₉ H ₉₄ O ₆	778.71	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	796.75 > 551.5, 796.75 > 495.45
TG (14:0-14:0-18:1)	C ₄₉ H ₉₂ O ₆	776.69	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	794.7 > 549.5, 794.7 > 495.45
TG (14:0-14:0-18:2)	C ₄₉ H ₉₀ O ₆	774.67	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	792.7 > 547.45, 792.7 > 495.45
TG (14:0-16:0-16:0)	C ₄₉ H ₉₄ O ₆	778.71	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	796.75 > 551.5, 796.75 > 523.45
TG (14:0-16:0-16:1)	C ₄₉ H ₉₂ O ₆	776.69	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	794.7 > 549.5, 794.7 > 521.45, 794.7 > 523.45
TG (14:0-16:0-18:0)	C ₅₁ H ₉₈ O ₆	806.74	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	824.75 > 579.55, 824.75 > 551.5, 824.75 > 523.45
TG (14:0-16:0-18:1)	C ₅₁ H ₉₆ O ₆	804.72	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	822.75 > 577.5, 822.75 > 549.5, 822.75 > 523.45
TG (14:0-16:0-18:2)	C ₅₁ H ₉₄ O ₆	802.71	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	820.75 > 575.5, 820.75 > 547.45, 820.75 > 523.45
TG (14:0-16:1-16:1)	C ₄₉ H ₉₀ O ₆	774.67	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	792.7 > 547.45, 792.7 > 521.45

TG (14:0-16:1-18:0)	C ₅₁ H ₉₆ O ₆	804.72	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	822.75 > 577.5, 822.75 > 551.5, 822.75 > 521.45
TG (14:0-16:1-18:1)	C ₅₁ H ₉₄ O ₆	802.71	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	820.75 > 575.5, 820.75 > 549.5, 820.75 > 521.45
TG (14:0-16:1-18:2)	C ₅₁ H ₉₂ O ₆	800.69	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	818.7 > 573.5, 818.7 > 547.45, 818.7 > 521.45
TG (14:0-18:0-18:0)	C ₅₃ H ₁₀₂ O ₆	834.77	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	852.8 > 607.55, 852.8 > 551.5
TG (14:0-18:0-18:1)	C ₅₃ H ₁₀₀ O ₆	832.75	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	850.8 > 605.55, 850.8 > 549.5, 850.8 > 551.5
TG (14:0-18:0-18:2)	C ₅₃ H ₉₈ O ₆	830.74	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	848.75 > 603.55, 848.75 > 547.45, 848.75 > 551.5
TG (14:0-18:1-18:1)	C ₅₃ H ₉₈ O ₆	830.74	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	848.75 > 603.55, 848.75 > 549.5
TG (14:0-18:1-18:2)	C ₅₃ H ₉₆ O ₆	828.72	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	846.75 > 601.5, 846.75 > 547.45, 846.75 > 549.5
TG (14:0-18:2-18:2)	C ₅₃ H ₉₄ O ₆	826.71	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	844.75 > 599.5, 844.75 > 547.45
TG (16:0-16:0-16:0)	C ₅₁ H ₉₈ O ₆	806.74	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	824.75 > 551.5
TG (16:0-16:0-16:1)	C ₅₁ H ₉₆ O ₆	804.72	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	822.75 > 549.5, 822.75 > 551.5
TG (16:0-16:0-18:0)	C ₅₃ H ₁₀₂ O ₆	834.77	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	852.8 > 579.55, 852.8 > 551.5
TG (16:0-16:0-18:1)	C ₅₃ H ₁₀₀ O ₆	832.75	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	850.8 > 577.5, 850.8 > 551.5
TG (16:0-16:0-18:2)	C ₅₃ H ₉₈ O ₆	830.74	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	848.75 > 575.5, 848.75 > 551.5
TG (16:0-16:1-16:1)	C ₅₁ H ₉₄ O ₆	802.71	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	820.75 > 547.45, 820.75 > 549.5
TG (16:0-16:1-18:0)	C ₅₃ H ₁₀₀ O ₆	832.75	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	850.8 > 577.5, 850.8 > 579.55, 850.8 > 549.5
TG (16:0-16:1-18:1)	C ₅₃ H ₉₈ O ₆	830.74	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	848.75 > 575.5, 848.75 > 577.5, 848.75 > 549.5
TG (16:0-16:1-18:2)	C ₅₃ H ₉₆ O ₆	828.72	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	846.75 > 573.5, 846.75 > 575.5, 846.75 > 549.5
TG (16:0-18:0-18:0)	C ₅₅ H ₁₀₆ O ₆	862.80	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	880.85 > 607.55, 880.85 > 579.55
TG (16:0-18:0-18:1)	C ₅₅ H ₁₀₄ O ₆	860.78	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	878.8 > 605.55, 878.8 > 577.5, 878.8 > 579.55
TG (16:0-18:0-18:2)	C ₅₅ H ₁₀₂ O ₆	858.77	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	876.8 > 603.55, 876.8 > 575.5, 876.8 > 579.55
TG (16:0-18:1-18:1)	C ₅₅ H ₁₀₂ O ₆	858.77	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	876.8 > 603.55, 876.8 > 577.5
TG (16:0-18:1-18:2)	C ₅₅ H ₁₀₀ O ₆	856.75	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	874.8 > 601.5, 874.8 > 575.5, 874.8 > 577.5
TG (16:0-18:2-18:2)	C ₅₅ H ₉₈ O ₆	854.74	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	872.75 > 599.5, 872.75 > 575.5
TG (16:1-16:1-16:1)	C ₅₁ H ₉₂ O ₆	800.69	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	818.7 > 547.45

TG (16:1-16:1-18:0)	C ₅₃ H ₉₈ O ₆	830.74	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	848.75 > 577.5, 848.75 > 547.45
TG (16:1-16:1-18:1)	C ₅₃ H ₉₆ O ₆	828.72	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	846.75 > 575.5, 846.75 > 547.45
TG (16:1-16:1-18:2)	C ₅₃ H ₉₄ O ₆	826.71	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	844.75 > 573.5, 844.75 > 547.45
TG (16:1-18:0-18:0)	C ₅₅ H ₁₀₄ O ₆	860.78	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	878.8 > 607.55, 878.8 > 577.5
TG (16:1-18:0-18:1)	C ₅₅ H ₁₀₂ O ₆	858.77	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	876.8 > 605.55, 876.8 > 575.5, 876.8 > 577.5
TG (16:1-18:0-18:2)	C ₅₅ H ₁₀₀ O ₆	856.75	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	874.8 > 603.55, 874.8 > 573.5, 874.8 > 577.5
TG (16:1-18:1-18:1)	C ₅₅ H ₁₀₀ O ₆	856.75	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	874.8 > 603.55, 874.8 > 575.5
TG (16:1-18:1-18:2)	C ₅₅ H ₉₈ O ₆	854.74	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	872.75 > 601.5, 872.75 > 573.5, 872.75 > 575.5
TG (18:0-18:0-18:0)	C ₅₇ H ₁₁₀ O ₆	890.83	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	908.85 > 607.55
TG (18:0-18:0-18:1)	C ₅₇ H ₁₀₈ O ₆	888.81	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	906.85 > 605.55, 906.85 > 607.55
TG (18:0-18:0-18:2)	C ₅₇ H ₁₀₆ O ₆	886.80	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	904.85 > 603.55, 904.85 > 607.55
TG (18:0-18:1-18:1)	C ₅₇ H ₁₀₆ O ₆	886.80	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	904.85 > 603.55, 904.85 > 605.55
TG (18:0-18:1-18:2)	C ₅₇ H ₁₀₄ O ₆	884.78	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	902.8 > 601.5, 902.8 > 603.55, 902.8 > 605.55
TG (18:0-18:2-18:2)	C ₅₇ H ₁₀₂ O ₆	882.77	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	900.8 > 599.5, 900.8 > 603.55
TG (18:1-18:1-18:1)	C ₅₇ H ₁₀₄ O ₆	884.78	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	902.8 > 603.55
TG (18:1-18:1-18:2)	C ₅₇ H ₁₀₂ O ₆	882.77	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	900.8 > 601.5, 900.8 > 603.55
TG (18:1-18:2-18:2)	C ₅₇ H ₁₀₀ O ₆	880.75	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	898.8 > 599.5, 898.8 > 601.5
TG (18:2-18:2-18:2)	C ₅₇ H ₉₈ O ₆	878.74	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	896.75 > 599.5
TG (8:0-10:0-14:0)	C ₃₅ H ₆₆ O ₆	582.49	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	600.5 > 439.4, 600.5 > 411.35, 600.5 > 355.3
TG (8:0-12:0-12:0)	C ₃₅ H ₆₆ O ₆	582.49	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	600.5 > 439.4, 600.5 > 383.3
TG (8:0-12:0-14:0)	C ₃₇ H ₇₀ O ₆	610.52	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	628.55 > 467.4, 628.55 > 411.35, 628.55 > 383.3
TG (8:0-12:0-16:0)	C ₃₉ H ₇₄ O ₆	638.55	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	656.6 > 495.45, 656.6 > 439.4, 656.6 > 383.3
TG (8:0-12:0-16:1)	C ₃₉ H ₇₂ O ₆	636.53	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	654.55 > 493.45, 654.55 > 437.35, 654.55 > 383.3
TG (8:0-12:0-18:0)	C ₄₁ H ₇₈ O ₆	666.58	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	684.6 > 523.45, 684.6 > 467.4, 684.6 > 383.3
TG (8:0-12:0-18:1)	C ₄₁ H ₇₆ O ₆	664.56	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	682.6 > 521.45, 682.6 > 465.4, 682.6 > 383.3

TG (8:0–14:0–14:0)	C ₃₉ H ₇₄ O ₆	638.55	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	656.6 > 495.45, 656.6 > 411.35
TG (8:0–14:0–16:0)	C ₄₁ H ₇₈ O ₆	666.58	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	684.6 > 523.45, 684.6 > 439.4, 684.6 > 411.35
TG (8:0–14:0–18:0)	C ₄₃ H ₈₂ O ₆	694.61	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	712.65 > 551.5, 712.65 > 467.4, 712.65 > 411.35
TG (8:0–16:0–16:0)	C ₄₃ H ₈₂ O ₆	694.61	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	712.65 > 551.5, 712.65 > 439.4
TG (8:0–16:0–18:1)	C ₄₅ H ₈₄ O ₆	720.63	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	738.65 > 577.5, 738.65 > 465.4, 738.65 > 439.4
TG (8:0–16:0–18:2)	C ₄₅ H ₈₂ O ₆	718.61	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	736.65 > 575.5, 736.65 > 463.4, 736.65 > 439.4
TG (8:0–16:1–18:0)	C ₄₅ H ₈₄ O ₆	720.63	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	738.65 > 577.5, 738.65 > 467.4, 738.65 > 437.35
TG (8:0–18:0–18:0)	C ₄₇ H ₉₀ O ₆	750.67	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	768.7 > 607.55, 768.7 > 467.4
TG (8:0–18:0–18:1)	C ₄₇ H ₈₈ O ₆	748.66	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	766.7 > 605.55, 766.7 > 465.4, 766.7 > 467.4
TG (8:0–8:0–16:0)	C ₃₅ H ₆₆ O ₆	582.49	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	600.5 > 439.4, 600.5 > 327.25
TG (8:0–8:0–18:0)	C ₃₇ H ₇₀ O ₆	610.52	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	628.55 > 467.4, 628.55 > 327.25
TG (8:0–8:0–8:0)	C ₂₇ H ₅₀ O ₆	470.36	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	488.4 > 327.25
TG (10:0–14:0–22:0)	C ₄₉ H ₉₄ O ₆	778.71	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	796.75 > 607.55, 796.75 > 551.5, 796.75 > 439.4
TG (10:0–14:0–22:1)	C ₄₉ H ₉₂ O ₆	776.69	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	794.7 > 605.55, 794.7 > 549.5, 794.7 > 439.4
TG (10:0–16:0–22:0)	C ₅₁ H ₉₈ O ₆	806.74	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	824.75 > 635.6, 824.75 > 551.5, 824.75 > 467.4
TG (10:0–16:0–22:1)	C ₅₁ H ₉₆ O ₆	804.72	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	822.75 > 633.6, 822.75 > 549.5, 822.75 > 467.4
TG (10:0–16:0–22:2)	C ₅₁ H ₉₄ O ₆	802.71	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	820.75 > 631.55, 820.75 > 547.45, 820.75 > 467.4
TG (10:0–18:0–22:0)	C ₅₃ H ₁₀₂ O ₆	834.77	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	852.8 > 663.65, 852.8 > 551.5, 852.8 > 495.45
TG (10:0–18:0–22:1)	C ₅₃ H ₁₀₀ O ₆	832.75	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	850.8 > 661.6, 850.8 > 549.5, 850.8 > 495.45
TG (10:0–18:0–22:4)	C ₅₃ H ₉₄ O ₆	826.71	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	844.75 > 655.55, 844.75 > 543.45, 844.75 > 495.45
TG (10:0–20:0–22:0)	C ₅₅ H ₁₀₆ O ₆	862.80	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	880.85 > 691.65, 880.85 > 551.5, 880.85 > 523.45
TG (10:0–20:1–22:0)	C ₅₅ H ₁₀₄ O ₆	860.78	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	878.8 > 689.65, 878.8 > 551.5, 878.8 > 521.45
TG (12:0–12:0–20:4)	C ₄₇ H ₈₂ O ₆	742.61	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	760.65 > 543.45, 760.65 > 439.4
TG (12:0–12:0–22:0)	C ₄₉ H ₉₄ O ₆	778.71	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	796.75 > 579.55, 796.75 > 439.4
TG (12:0–12:0–22:1)	C ₄₉ H ₉₂ O ₆	776.69	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	794.7 > 577.5, 794.7 > 439.4

TG (12:0-12:0-22:2)	C ₄₉ H ₉₀ O ₆	774.67	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	792.7 > 575.5, 792.7 > 439.4
TG (12:0-12:0-22:3)	C ₄₉ H ₈₈ O ₆	772.66	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	790.7 > 573.5, 790.7 > 439.4
TG (12:0-12:0-22:4)	C ₄₉ H ₈₆ O ₆	770.64	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	788.7 > 571.45, 788.7 > 439.4
TG (12:0-12:0-22:5)	C ₄₉ H ₈₄ O ₆	768.63	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	786.65 > 569.45, 786.65 > 439.4
TG (12:0-12:0-22:6)	C ₄₉ H ₈₂ O ₆	766.61	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	784.65 > 567.45, 784.65 > 439.4
TG (12:0-14:0-20:4)	C ₄₉ H ₈₆ O ₆	770.64	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	788.7 > 571.45, 788.7 > 543.45, 788.7 > 467.4
TG (12:0-14:0-22:0)	C ₅₁ H ₉₈ O ₆	806.74	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	824.75 > 607.55, 824.75 > 579.55, 824.75 > 467.4
TG (12:0-14:0-22:1)	C ₅₁ H ₉₆ O ₆	804.72	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	822.75 > 605.55, 822.75 > 577.5, 822.75 > 467.4
TG (12:0-14:0-22:4)	C ₅₁ H ₉₀ O ₆	798.67	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	816.7 > 599.5, 816.7 > 571.45, 816.7 > 467.4
TG (12:0-14:0-22:5)	C ₅₁ H ₈₈ O ₆	796.66	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	814.7 > 597.5, 814.7 > 569.45, 814.7 > 467.4
TG (12:0-14:0-22:6)	C ₅₁ H ₈₆ O ₆	794.64	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	812.7 > 595.45, 812.7 > 567.45, 812.7 > 467.4
TG (12:0-16:0-20:4)	C ₅₁ H ₉₀ O ₆	798.67	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	816.7 > 599.5, 816.7 > 543.45, 816.7 > 495.45
TG (12:0-16:0-22:0)	C ₅₃ H ₁₀₂ O ₆	834.77	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	852.8 > 635.6, 852.8 > 579.55, 852.8 > 495.45
TG (12:0-16:0-22:1)	C ₅₃ H ₁₀₀ O ₆	832.75	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	850.8 > 633.6, 850.8 > 577.5, 850.8 > 495.45
TG (12:0-16:0-22:2)	C ₅₃ H ₉₈ O ₆	830.74	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	848.75 > 631.55, 848.75 > 575.5, 848.75 > 495.45
TG (12:0-16:0-22:4)	C ₅₃ H ₉₄ O ₆	826.71	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	844.75 > 627.55, 844.75 > 571.45, 844.75 > 495.45
TG (12:0-16:0-22:5)	C ₅₃ H ₉₂ O ₆	824.69	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	842.7 > 625.5, 842.7 > 569.45, 842.7 > 495.45
TG (12:0-16:0-22:6)	C ₅₃ H ₉₀ O ₆	822.67	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	840.7 > 623.5, 840.7 > 567.45, 840.7 > 495.45
TG (12:0-16:1-20:4)	C ₅₁ H ₈₈ O ₆	796.66	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	814.7 > 597.5, 814.7 > 543.45, 814.7 > 493.45
TG (12:0-16:1-22:0)	C ₅₃ H ₁₀₀ O ₆	832.75	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	850.8 > 633.6, 850.8 > 579.55, 850.8 > 493.45
TG (12:0-16:1-22:4)	C ₅₃ H ₉₂ O ₆	824.69	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	842.7 > 625.5, 842.7 > 571.45, 842.7 > 493.45
TG (12:0-16:1-22:5)	C ₅₃ H ₉₀ O ₆	822.67	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	840.7 > 623.5, 840.7 > 569.45, 840.7 > 493.45
TG (12:0-18:0-20:4)	C ₅₃ H ₉₄ O ₆	826.71	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	844.75 > 627.55, 844.75 > 543.45, 844.75 > 523.45
TG (12:0-18:0-22:0)	C ₅₅ H ₁₀₆ O ₆	862.80	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	880.85 > 663.65, 880.85 > 579.55, 880.85 > 523.45
TG (12:0-18:0-22:1)	C ₅₅ H ₁₀₄ O ₆	860.78	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	878.8 > 661.6, 878.8 > 577.5, 878.8 > 523.45

TG (12:0–18:0–22:5)	C ₅₅ H ₉₆ O ₆	852.72	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	870.75 > 653.55, 870.75 > 569.45, 870.75 > 523.45
TG (12:0–18:1–20:4)	C ₅₃ H ₉₂ O ₆	824.69	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	842.7 > 625.5, 842.7 > 543.45, 842.7 > 521.45
TG (12:0–18:1–22:0)	C ₅₅ H ₁₀₄ O ₆	860.78	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	878.8 > 661.6, 878.8 > 579.55, 878.8 > 521.45
TG (12:0–18:1–22:1)	C ₅₅ H ₁₀₂ O ₆	858.77	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	876.8 > 659.6, 876.8 > 577.5, 876.8 > 521.45
TG (12:0–18:1–22:3)	C ₅₅ H ₉₈ O ₆	854.74	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	872.75 > 655.55, 872.75 > 573.5, 872.75 > 521.45
TG (12:0–18:1–22:5)	C ₅₅ H ₉₄ O ₆	850.71	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	868.75 > 651.55, 868.75 > 569.45, 868.75 > 521.45
TG (12:0–20:0–22:0)	C ₅₇ H ₁₁₀ O ₆	890.83	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	908.85 > 691.65, 908.85 > 579.55, 908.85 > 551.5
TG (12:0–20:0–22:1)	C ₅₇ H ₁₀₈ O ₆	888.81	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	906.85 > 689.65, 906.85 > 577.5, 906.85 > 551.5
TG (12:0–20:1–22:0)	C ₅₇ H ₁₀₈ O ₆	888.81	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	906.85 > 689.65, 906.85 > 579.55, 906.85 > 549.5
TG (12:0–20:1–22:1)	C ₅₇ H ₁₀₆ O ₆	886.80	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	904.85 > 687.65, 904.85 > 577.5, 904.85 > 549.5
TG (14:0–14:0–20:4)	C ₅₁ H ₉₀ O ₆	798.67	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	816.7 > 571.45, 816.7 > 495.45
TG (14:0–14:0–20:5)	C ₅₁ H ₈₈ O ₆	796.66	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	814.7 > 569.45, 814.7 > 495.45
TG (14:0–14:0–22:0)	C ₅₃ H ₁₀₂ O ₆	834.77	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	852.8 > 607.55, 852.8 > 495.45
TG (14:0–14:0–22:1)	C ₅₃ H ₁₀₀ O ₆	832.75	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	850.8 > 605.55, 850.8 > 495.45
TG (14:0–14:0–22:2)	C ₅₃ H ₉₈ O ₆	830.74	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	848.75 > 603.55, 848.75 > 495.45
TG (14:0–14:0–22:4)	C ₅₃ H ₉₄ O ₆	826.71	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	844.75 > 599.5, 844.75 > 495.45
TG (14:0–16:0–20:4)	C ₅₃ H ₉₄ O ₆	826.71	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	844.75 > 599.5, 844.75 > 571.45, 844.75 > 523.45
TG (14:0–16:0–20:5)	C ₅₃ H ₉₂ O ₆	824.69	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	842.7 > 597.5, 842.7 > 569.45, 842.7 > 523.45
TG (14:0–16:0–22:0)	C ₅₅ H ₁₀₆ O ₆	862.80	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	880.85 > 635.6, 880.85 > 607.55, 880.85 > 523.45
TG (14:0–16:0–22:1)	C ₅₅ H ₁₀₄ O ₆	860.78	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	878.8 > 633.6, 878.8 > 605.55, 878.8 > 523.45
TG (14:0–16:0–22:4)	C ₅₅ H ₉₈ O ₆	854.74	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	872.75 > 627.55, 872.75 > 599.5, 872.75 > 523.45
TG (14:0–16:0–22:5)	C ₅₅ H ₉₆ O ₆	852.72	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	870.75 > 625.5, 870.75 > 597.5, 870.75 > 523.45
TG (14:0–16:1–22:0)	C ₅₅ H ₁₀₄ O ₆	860.78	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	878.8 > 633.6, 878.8 > 607.55, 878.8 > 521.45
TG (14:0–16:1–22:1)	C ₅₅ H ₁₀₂ O ₆	858.77	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	876.8 > 631.55, 876.8 > 605.55, 876.8 > 521.45
TG (14:0–16:1–22:4)	C ₅₅ H ₉₆ O ₆	852.72	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	870.75 > 625.5, 870.75 > 599.5, 870.75 > 521.45

TG (14:0–16:1–22:5)	C ₅₅ H ₉₄ O ₆	850.71	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	868.75 > 623.5, 868.75 > 597.5, 868.75 > 521.45
TG (14:0–18:0–20:4)	C ₅₅ H ₉₈ O ₆	854.74	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	872.75 > 627.55, 872.75 > 571.45, 872.75 > 551.5
TG (14:0–18:0–22:0)	C ₅₇ H ₁₁₀ O ₆	890.83	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	908.85 > 663.65, 908.85 > 607.55, 908.85 > 551.5
TG (14:0–18:0–22:1)	C ₅₇ H ₁₀₈ O ₆	888.81	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	906.85 > 661.6, 906.85 > 605.55, 906.85 > 551.5
TG (14:0–18:1–20:4)	C ₅₅ H ₉₆ O ₆	852.72	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	870.75 > 625.5, 870.75 > 571.45, 870.75 > 549.5
TG (14:0–18:1–22:0)	C ₅₇ H ₁₀₈ O ₆	888.81	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	906.85 > 661.6, 906.85 > 607.55, 906.85 > 549.5
TG (14:0–18:1–22:1)	C ₅₇ H ₁₀₆ O ₆	886.80	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	904.85 > 659.6, 904.85 > 605.55, 904.85 > 549.5
TG (14:0–18:1–22:4)	C ₅₇ H ₁₀₀ O ₆	880.75	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	898.8 > 653.55, 898.8 > 599.5, 898.8 > 549.5
TG (14:0–20:0–22:1)	C ₅₉ H ₁₁₂ O ₆	916.85	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	934.9 > 689.65, 934.9 > 605.55, 934.9 > 579.55
TG (14:0–20:1–22:0)	C ₅₉ H ₁₁₂ O ₆	916.85	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	934.9 > 689.65, 934.9 > 607.55, 934.9 > 577.5
TG (14:0–20:1–22:1)	C ₅₉ H ₁₁₀ O ₆	914.83	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	932.85 > 687.65, 932.85 > 605.55, 932.85 > 577.5
TG (16:0–16:0–20:4)	C ₅₅ H ₉₈ O ₆	854.74	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	872.75 > 599.5, 872.75 > 551.5
TG (16:0–16:0–20:5)	C ₅₅ H ₉₆ O ₆	852.72	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	870.75 > 597.5, 870.75 > 551.5
TG (16:0–16:0–22:0)	C ₅₇ H ₁₁₀ O ₆	890.83	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	908.85 > 635.6, 908.85 > 551.5
TG (16:0–16:0–22:1)	C ₅₇ H ₁₀₈ O ₆	888.81	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	906.85 > 633.6, 906.85 > 551.5
TG (16:0–16:0–22:4)	C ₅₇ H ₁₀₂ O ₆	882.77	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	900.8 > 627.55, 900.8 > 551.5
TG (16:0–16:0–22:5)	C ₅₇ H ₁₀₀ O ₆	880.75	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	898.8 > 625.5, 898.8 > 551.5
TG (16:0–16:0–22:6)	C ₅₇ H ₉₈ O ₆	878.74	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	896.75 > 623.5, 896.75 > 551.5
TG (16:0–16:1–20:4)	C ₅₅ H ₉₆ O ₆	852.72	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	870.75 > 597.5, 870.75 > 599.5, 870.75 > 549.5
TG (16:0–16:1–22:0)	C ₅₇ H ₁₀₈ O ₆	888.81	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	906.85 > 633.6, 906.85 > 635.6, 906.85 > 549.5
TG (16:0–16:1–22:1)	C ₅₇ H ₁₀₆ O ₆	886.80	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	904.85 > 631.55, 904.85 > 633.6, 904.85 > 549.5
TG (16:0–16:1–22:4)	C ₅₇ H ₁₀₀ O ₆	880.75	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	898.8 > 625.5, 898.8 > 627.55, 898.8 > 549.5
TG (16:0–18:0–20:4)	C ₅₇ H ₁₀₂ O ₆	882.77	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	900.8 > 627.55, 900.8 > 599.5, 900.8 > 579.55
TG (16:0–18:0–22:1)	C ₅₉ H ₁₁₂ O ₆	916.85	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	934.9 > 661.6, 934.9 > 633.6, 934.9 > 579.55
TG (16:0–18:0–22:4)	C ₅₉ H ₁₀₆ O ₆	910.80	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	928.85 > 655.55, 928.85 > 627.55, 928.85 > 579.55

TG (16:0–18:0–22:5)	C ₅₉ H ₁₀₄ O ₆	908.78	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	926.8 > 653.55, 926.8 > 625.5, 926.8 > 579.55
TG (16:0–18:0–22:6)	C ₅₉ H ₁₀₂ O ₆	906.77	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	924.8 > 651.55, 924.8 > 623.5, 924.8 > 579.55
TG (16:0–18:1–20:4)	C ₅₇ H ₁₀₀ O ₆	880.75	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	898.8 > 625.5, 898.8 > 599.5, 898.8 > 577.5
TG (16:0–18:1–22:0)	C ₅₉ H ₁₁₂ O ₆	916.85	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	934.9 > 661.6, 934.9 > 635.6, 934.9 > 577.5
TG (16:0–18:1–22:1)	C ₅₉ H ₁₁₀ O ₆	914.83	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	932.85 > 659.6, 932.85 > 633.6, 932.85 > 577.5
TG (16:0–18:1–22:2)	C ₅₉ H ₁₀₈ O ₆	912.81	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	930.85 > 657.6, 930.85 > 631.55, 930.85 > 577.5
TG (16:0–18:1–22:4)	C ₅₉ H ₁₀₄ O ₆	908.78	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	926.8 > 653.55, 926.8 > 627.55, 926.8 > 577.5
TG (16:0–18:1–22:5)	C ₅₉ H ₁₀₂ O ₆	906.77	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	924.8 > 651.55, 924.8 > 625.5, 924.8 > 577.5
TG (16:0–18:2–22:1)	C ₅₉ H ₁₀₈ O ₆	912.81	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	930.85 > 657.6, 930.85 > 633.6, 930.85 > 575.5
TG (16:0–20:1–22:1)	C ₆₁ H ₁₁₄ O ₆	942.86	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	960.9 > 687.65, 960.9 > 633.6, 960.9 > 605.55
TG (16:0–20:1–22:4)	C ₆₁ H ₁₀₈ O ₆	936.81	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	954.85 > 681.6, 954.85 > 627.55, 954.85 > 605.55
TG (16:0–22:5–22:5)	C ₆₃ H ₁₀₂ O ₆	954.77	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	972.8 > 699.55, 972.8 > 625.5
TG (16:1–16:1–22:2)	C ₅₇ H ₁₀₂ O ₆	882.77	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	900.8 > 629.55, 900.8 > 547.45
TG (16:1–18:0–20:4)	C ₅₇ H ₁₀₀ O ₆	880.75	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	898.8 > 627.55, 898.8 > 597.5, 898.8 > 577.5
TG (16:1–18:0–22:0)	C ₅₉ H ₁₁₂ O ₆	916.85	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	934.9 > 663.65, 934.9 > 633.6, 934.9 > 577.5
TG (16:1–18:0–22:1)	C ₅₉ H ₁₁₀ O ₆	914.83	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	932.85 > 661.6, 932.85 > 631.55, 932.85 > 577.5
TG (16:1–18:0–22:5)	C ₅₉ H ₁₀₂ O ₆	906.77	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	924.8 > 653.55, 924.8 > 623.5, 924.8 > 577.5
TG (16:1–20:0–22:1)	C ₆₁ H ₁₁₄ O ₆	942.86	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	960.9 > 689.65, 960.9 > 631.55, 960.9 > 605.55
TG (18:0–18:0–20:4)	C ₅₉ H ₁₀₆ O ₆	910.80	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	928.85 > 627.55, 928.85 > 607.55
TG (18:0–18:0–22:4)	C ₆₁ H ₁₁₀ O ₆	938.83	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	956.85 > 655.55, 956.85 > 607.55
TG (18:0–18:1–20:4)	C ₅₉ H ₁₀₄ O ₆	908.78	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	926.8 > 625.5, 926.8 > 627.55, 926.8 > 605.55
TG (18:0–18:1–22:0)	C ₆₁ H ₁₁₆ O ₆	944.88	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	962.9 > 661.6, 962.9 > 663.65, 962.9 > 605.55
TG (18:0–18:1–22:4)	C ₆₁ H ₁₀₈ O ₆	936.81	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	954.85 > 653.55, 954.85 > 655.55, 954.85 > 605.55
TG (18:0–18:1–22:5)	C ₆₁ H ₁₀₆ O ₆	934.80	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	952.85 > 651.55, 952.85 > 653.55, 952.85 > 605.55
TG (18:1–18:1–20:4)	C ₅₉ H ₁₀₂ O ₆	906.77	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	924.8 > 625.5, 924.8 > 603.55

TG (18:1-18:1-22:0)	C ₆₁ H ₁₁₄ O ₆	942.86	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	960.9 > 661.6, 960.9 > 603.55
TG (18:1-18:1-22:1)	C ₆₁ H ₁₁₂ O ₆	940.85	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	958.9 > 659.6, 958.9 > 603.55
TG (18:1-18:1-22:3)	C ₆₁ H ₁₀₈ O ₆	936.81	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	954.85 > 655.55, 954.85 > 603.55
TG (18:1-18:1-22:4)	C ₆₁ H ₁₀₆ O ₆	934.80	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	952.85 > 653.55, 952.85 > 603.55
TG (18:1-18:1-22:5)	C ₆₁ H ₁₀₄ O ₆	932.78	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	950.8 > 651.55, 950.8 > 603.55
TG (18:1-18:1-22:6)	C ₆₁ H ₁₀₂ O ₆	930.77	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	948.8 > 649.5, 948.8 > 603.55
TG (10:0-12:0-20:0)	C ₄₅ H ₈₆ O ₆	722.64	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	740.7 > 551.5, 740.7 > 523.45, 740.7 > 411.35
TG (10:0-14:0-20:0)	C ₄₇ H ₉₀ O ₆	750.67	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	768.7 > 579.55, 768.7 > 523.45, 768.7 > 439.4
TG (10:0-14:0-20:1)	C ₄₇ H ₈₈ O ₆	748.66	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	766.7 > 577.5, 766.7 > 521.45, 766.7 > 439.4
TG (10:0-14:0-20:2)	C ₄₇ H ₈₆ O ₆	746.64	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	764.7 > 575.5, 764.7 > 519.45, 764.7 > 439.4
TG (10:0-16:0-20:0)	C ₄₉ H ₉₄ O ₆	778.71	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	796.75 > 607.55, 796.75 > 523.45, 796.75 > 467.4
TG (10:0-16:0-20:1)	C ₄₉ H ₉₂ O ₆	776.69	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	794.7 > 605.55, 794.7 > 521.45, 794.7 > 467.4
TG (10:0-16:0-20:2)	C ₄₉ H ₉₀ O ₆	774.67	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	792.7 > 603.55, 792.7 > 519.45, 792.7 > 467.4
TG (10:0-16:1-20:0)	C ₄₉ H ₉₂ O ₆	776.69	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	794.7 > 605.55, 794.7 > 523.45, 794.7 > 465.4
TG (10:0-16:1-20:1)	C ₄₉ H ₉₀ O ₆	774.67	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	792.7 > 603.55, 792.7 > 521.45, 792.7 > 465.4
TG (10:0-18:0-20:0)	C ₅₁ H ₉₈ O ₆	806.74	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	824.75 > 635.6, 824.75 > 523.45, 824.75 > 495.45
TG (10:0-18:0-20:1)	C ₅₁ H ₉₆ O ₆	804.72	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	822.75 > 633.6, 822.75 > 521.45, 822.75 > 495.45
TG (10:0-18:0-20:2)	C ₅₁ H ₉₄ O ₆	802.71	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	820.75 > 631.55, 820.75 > 519.45, 820.75 > 495.45
TG (10:0-18:1-20:0)	C ₅₁ H ₉₆ O ₆	804.72	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	822.75 > 633.6, 822.75 > 523.45, 822.75 > 493.45
TG (10:0-20:0-20:0)	C ₅₃ H ₁₀₂ O ₆	834.77	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	852.8 > 663.65, 852.8 > 523.45
TG (10:0-20:0-20:1)	C ₅₃ H ₁₀₀ O ₆	832.75	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	850.8 > 661.6, 850.8 > 521.45, 850.8 > 523.45
TG (10:0-20:1-20:1)	C ₅₃ H ₉₈ O ₆	830.74	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	848.75 > 659.6, 848.75 > 521.45
TG (12:0-12:0-18:3)	C ₄₅ H ₈₀ O ₆	716.60	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	734.65 > 517.45, 734.65 > 439.4
TG (12:0-12:0-20:0)	C ₄₇ H ₉₀ O ₆	750.67	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	768.7 > 551.5, 768.7 > 439.4
TG (12:0-12:0-20:1)	C ₄₇ H ₈₈ O ₆	748.66	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	766.7 > 549.5, 766.7 > 439.4

TG (12:0-12:0-20:2)	C ₄₇ H ₈₆ O ₆	746.64	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	764.7 > 547.45, 764.7 > 439.4
TG (12:0-12:0-20:3)	C ₄₇ H ₈₄ O ₆	744.63	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	762.65 > 545.45, 762.65 > 439.4
TG (12:0-14:0-18:3)	C ₄₇ H ₈₄ O ₆	744.63	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	762.65 > 545.45, 762.65 > 517.45, 762.65 > 467.4
TG (12:0-14:0-20:0)	C ₄₉ H ₉₄ O ₆	778.71	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	796.75 > 579.55, 796.75 > 551.5, 796.75 > 467.4
TG (12:0-14:0-20:1)	C ₄₉ H ₉₂ O ₆	776.69	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	794.7 > 577.5, 794.7 > 549.5, 794.7 > 467.4
TG (12:0-14:0-20:2)	C ₄₉ H ₉₀ O ₆	774.67	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	792.7 > 575.5, 792.7 > 547.45, 792.7 > 467.4
TG (12:0-14:0-20:3)	C ₄₉ H ₈₈ O ₆	772.66	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	790.7 > 573.5, 790.7 > 545.45, 790.7 > 467.4
TG (12:0-16:0-18:3)	C ₄₉ H ₈₈ O ₆	772.66	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	790.7 > 573.5, 790.7 > 517.45, 790.7 > 495.45
TG (12:0-16:0-20:0)	C ₅₁ H ₉₈ O ₆	806.74	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	824.75 > 607.55, 824.75 > 551.5, 824.75 > 495.45
TG (12:0-16:0-20:1)	C ₅₁ H ₉₆ O ₆	804.72	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	822.75 > 605.55, 822.75 > 549.5, 822.75 > 495.45
TG (12:0-16:0-20:2)	C ₅₁ H ₉₄ O ₆	802.71	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	820.75 > 603.55, 820.75 > 547.45, 820.75 > 495.45
TG (12:0-16:0-20:3)	C ₅₁ H ₉₂ O ₆	800.69	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	818.7 > 601.5, 818.7 > 545.45, 818.7 > 495.45
TG (12:0-16:1-20:0)	C ₅₁ H ₉₆ O ₆	804.72	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	822.75 > 605.55, 822.75 > 551.5, 822.75 > 493.45
TG (12:0-16:1-20:1)	C ₅₁ H ₉₄ O ₆	802.71	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	820.75 > 603.55, 820.75 > 549.5, 820.75 > 493.45
TG (12:0-16:1-20:2)	C ₅₁ H ₉₂ O ₆	800.69	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	818.7 > 601.5, 818.7 > 547.45, 818.7 > 493.45
TG (12:0-16:1-20:3)	C ₅₁ H ₉₀ O ₆	798.67	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	816.7 > 599.5, 816.7 > 545.45, 816.7 > 493.45
TG (12:0-18:0-20:0)	C ₅₃ H ₁₀₂ O ₆	834.77	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	852.8 > 635.6, 852.8 > 551.5, 852.8 > 523.45
TG (12:0-18:0-20:1)	C ₅₃ H ₁₀₀ O ₆	832.75	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	850.8 > 633.6, 850.8 > 549.5, 850.8 > 523.45
TG (12:0-18:0-20:2)	C ₅₃ H ₉₈ O ₆	830.74	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	848.75 > 631.55, 848.75 > 547.45, 848.75 > 523.45
TG (12:0-18:0-20:3)	C ₅₃ H ₉₆ O ₆	828.72	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	846.75 > 629.55, 846.75 > 545.45, 846.75 > 523.45
TG (12:0-18:1-20:0)	C ₅₃ H ₁₀₀ O ₆	832.75	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	850.8 > 633.6, 850.8 > 551.5, 850.8 > 521.45
TG (12:0-18:1-20:1)	C ₅₃ H ₉₈ O ₆	830.74	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	848.75 > 631.55, 848.75 > 549.5, 848.75 > 521.45
TG (12:0-18:1-20:2)	C ₅₃ H ₉₆ O ₆	828.72	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	846.75 > 629.55, 846.75 > 547.45, 846.75 > 521.45
TG (12:0-18:1-20:3)	C ₅₃ H ₉₄ O ₆	826.71	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	844.75 > 627.55, 844.75 > 545.45, 844.75 > 521.45
TG (12:0-18:2-20:1)	C ₅₃ H ₉₆ O ₆	828.72	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	846.75 > 629.55, 846.75 > 549.5, 846.75 > 519.45

TG (12:0-20:0-20:0)	C ₅₅ H ₁₀₆ O ₆	862.80	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	880.85 > 663.65, 880.85 > 551.5
TG (12:0-20:0-20:1)	C ₅₅ H ₁₀₄ O ₆	860.78	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	878.8 > 661.6, 878.8 > 549.5, 878.8 > 551.5
TG (12:0-20:0-20:2)	C ₅₅ H ₁₀₂ O ₆	858.77	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	876.8 > 659.6, 876.8 > 547.45, 876.8 > 551.5
TG (12:0-20:1-20:1)	C ₅₅ H ₁₀₂ O ₆	858.77	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	876.8 > 659.6, 876.8 > 549.5
TG (14:0-14:0-18:3)	C ₄₉ H ₈₈ O ₆	772.66	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	790.7 > 545.45, 790.7 > 495.45
TG (14:0-14:0-20:0)	C ₅₁ H ₉₈ O ₆	806.74	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	824.75 > 579.55, 824.75 > 495.45
TG (14:0-14:0-20:1)	C ₅₁ H ₉₆ O ₆	804.72	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	822.75 > 577.5, 822.75 > 495.45
TG (14:0-14:0-20:2)	C ₅₁ H ₉₄ O ₆	802.71	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	820.75 > 575.5, 820.75 > 495.45
TG (14:0-14:0-20:3)	C ₅₁ H ₉₂ O ₆	800.69	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	818.7 > 573.5, 818.7 > 495.45
TG (14:0-16:0-18:3)	C ₅₁ H ₉₂ O ₆	800.69	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	818.7 > 573.5, 818.7 > 545.45, 818.7 > 523.45
TG (14:0-16:0-20:0)	C ₅₃ H ₁₀₂ O ₆	834.77	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	852.8 > 607.55, 852.8 > 579.55, 852.8 > 523.45
TG (14:0-16:0-20:1)	C ₅₃ H ₁₀₀ O ₆	832.75	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	850.8 > 605.55, 850.8 > 577.5, 850.8 > 523.45
TG (14:0-16:0-20:2)	C ₅₃ H ₉₈ O ₆	830.74	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	848.75 > 603.55, 848.75 > 575.5, 848.75 > 523.45
TG (14:0-16:0-20:3)	C ₅₃ H ₉₆ O ₆	828.72	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	846.75 > 601.5, 846.75 > 573.5, 846.75 > 523.45
TG (14:0-16:1-20:0)	C ₅₃ H ₁₀₀ O ₆	832.75	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	850.8 > 605.55, 850.8 > 579.55, 850.8 > 521.45
TG (14:0-16:1-20:1)	C ₅₃ H ₉₈ O ₆	830.74	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	848.75 > 603.55, 848.75 > 577.5, 848.75 > 521.45
TG (14:0-16:1-20:2)	C ₅₃ H ₉₆ O ₆	828.72	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	846.75 > 601.5, 846.75 > 575.5, 846.75 > 521.45
TG (14:0-16:1-20:3)	C ₅₃ H ₉₄ O ₆	826.71	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	844.75 > 599.5, 844.75 > 573.5, 844.75 > 521.45
TG (14:0-18:0-18:3)	C ₅₃ H ₉₆ O ₆	828.72	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	846.75 > 601.5, 846.75 > 545.45, 846.75 > 551.5
TG (14:0-18:0-20:0)	C ₅₅ H ₁₀₆ O ₆	862.80	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	880.85 > 635.6, 880.85 > 579.55, 880.85 > 551.5
TG (14:0-18:0-20:1)	C ₅₅ H ₁₀₄ O ₆	860.78	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	878.8 > 633.6, 878.8 > 577.5, 878.8 > 551.5
TG (14:0-18:0-20:2)	C ₅₅ H ₁₀₂ O ₆	858.77	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	876.8 > 631.55, 876.8 > 575.5, 876.8 > 551.5
TG (14:0-18:0-20:3)	C ₅₅ H ₁₀₀ O ₆	856.75	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	874.8 > 629.55, 874.8 > 573.5, 874.8 > 551.5
TG (14:0-18:1-18:3)	C ₅₃ H ₉₄ O ₆	826.71	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	844.75 > 599.5, 844.75 > 545.45, 844.75 > 549.5
TG (14:0-18:1-20:0)	C ₅₅ H ₁₀₄ O ₆	860.78	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	878.8 > 633.6, 878.8 > 579.55, 878.8 > 549.5

TG (14:0-18:1-20:1)	C ₅₅ H ₁₀₂ O ₆	858.77	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	876.8 > 631.55, 876.8 > 577.5, 876.8 > 549.5
TG (14:0-18:1-20:2)	C ₅₅ H ₁₀₀ O ₆	856.75	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	874.8 > 629.55, 874.8 > 575.5, 874.8 > 549.5
TG (14:0-18:1-20:3)	C ₅₅ H ₉₈ O ₆	854.74	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	872.75 > 627.55, 872.75 > 573.5, 872.75 > 549.5
TG (14:0-18:2-20:0)	C ₅₅ H ₁₀₂ O ₆	858.77	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	876.8 > 631.55, 876.8 > 579.55, 876.8 > 547.45
TG (14:0-20:0-20:0)	C ₅₇ H ₁₁₀ O ₆	890.83	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	908.85 > 663.65, 908.85 > 579.55
TG (14:0-20:0-20:1)	C ₅₇ H ₁₀₈ O ₆	888.81	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	906.85 > 661.6, 906.85 > 577.5, 906.85 > 579.55
TG (16:0-16:0-18:3)	C ₅₃ H ₉₆ O ₆	828.72	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	846.75 > 573.5, 846.75 > 551.5
TG (16:0-16:0-20:0)	C ₅₅ H ₁₀₆ O ₆	862.80	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	880.85 > 607.55, 880.85 > 551.5
TG (16:0-16:0-20:1)	C ₅₅ H ₁₀₄ O ₆	860.78	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	878.8 > 605.55, 878.8 > 551.5
TG (16:0-16:0-20:2)	C ₅₅ H ₁₀₂ O ₆	858.77	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	876.8 > 603.55, 876.8 > 551.5
TG (16:0-16:0-20:3)	C ₅₅ H ₁₀₀ O ₆	856.75	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	874.8 > 601.5, 874.8 > 551.5
TG (16:0-16:1-20:0)	C ₅₅ H ₁₀₄ O ₆	860.78	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	878.8 > 605.55, 878.8 > 607.55, 878.8 > 549.5
TG (16:0-16:1-20:1)	C ₅₅ H ₁₀₂ O ₆	858.77	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	876.8 > 603.55, 876.8 > 605.55, 876.8 > 549.5
TG (16:0-16:1-20:2)	C ₅₅ H ₁₀₀ O ₆	856.75	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	874.8 > 601.5, 874.8 > 603.55, 874.8 > 549.5
TG (16:0-16:1-20:3)	C ₅₅ H ₉₈ O ₆	854.74	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	872.75 > 599.5, 872.75 > 601.5, 872.75 > 549.5
TG (16:0-18:0-20:0)	C ₅₇ H ₁₁₀ O ₆	890.83	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	908.85 > 635.6, 908.85 > 607.55, 908.85 > 579.55
TG (16:0-18:0-20:1)	C ₅₇ H ₁₀₈ O ₆	888.81	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	906.85 > 633.6, 906.85 > 605.55, 906.85 > 579.55
TG (16:0-18:0-20:2)	C ₅₇ H ₁₀₆ O ₆	886.80	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	904.85 > 631.55, 904.85 > 603.55, 904.85 > 579.55
TG (16:0-18:0-20:3)	C ₅₇ H ₁₀₄ O ₆	884.78	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	902.8 > 629.55, 902.8 > 601.5, 902.8 > 579.55
TG (16:0-18:1-18:3)	C ₅₅ H ₉₈ O ₆	854.74	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	872.75 > 599.5, 872.75 > 573.5, 872.75 > 577.5
TG (16:0-18:1-20:0)	C ₅₇ H ₁₀₈ O ₆	888.81	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	906.85 > 633.6, 906.85 > 607.55, 906.85 > 577.5
TG (16:0-18:1-20:1)	C ₅₇ H ₁₀₆ O ₆	886.80	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	904.85 > 631.55, 904.85 > 605.55, 904.85 > 577.5
TG (16:0-18:1-20:2)	C ₅₇ H ₁₀₄ O ₆	884.78	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	902.8 > 629.55, 902.8 > 603.55, 902.8 > 577.5
TG (16:0-18:1-20:3)	C ₅₇ H ₁₀₂ O ₆	882.77	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	900.8 > 627.55, 900.8 > 601.5, 900.8 > 577.5
TG (16:0-18:2-20:0)	C ₅₇ H ₁₀₆ O ₆	886.80	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	904.85 > 631.55, 904.85 > 607.55, 904.85 > 575.5

TG (16:0-18:2-20:1)	C ₅₇ H ₁₀₄ O ₆	884.78	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	902.8 > 629.55, 902.8 > 605.55, 902.8 > 575.5
TG (16:0-18:2-20:2)	C ₅₇ H ₁₀₂ O ₆	882.77	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	900.8 > 627.55, 900.8 > 603.55, 900.8 > 575.5
TG (16:0-20:0-20:0)	C ₅₉ H ₁₁₄ O ₆	918.86	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	936.9 > 663.65, 936.9 > 607.55
TG (16:0-20:0-20:1)	C ₅₉ H ₁₁₂ O ₆	916.85	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	934.9 > 661.6, 934.9 > 605.55, 934.9 > 607.55
TG (16:0-20:1-20:1)	C ₅₉ H ₁₁₀ O ₆	914.83	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	932.85 > 659.6, 932.85 > 605.55
TG (16:0-20:1-20:3)	C ₅₉ H ₁₀₆ O ₆	910.80	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	928.85 > 655.55, 928.85 > 601.5, 928.85 > 605.55
TG (16:0-20:2-20:2)	C ₅₉ H ₁₀₆ O ₆	910.80	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	928.85 > 655.55, 928.85 > 603.55
TG (16:1-16:1-20:0)	C ₅₅ H ₁₀₂ O ₆	858.77	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	876.8 > 605.55, 876.8 > 547.45
TG (16:1-16:1-20:1)	C ₅₅ H ₁₀₀ O ₆	856.75	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	874.8 > 603.55, 874.8 > 547.45
TG (16:1-18:0-18:3)	C ₅₅ H ₉₈ O ₆	854.74	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	872.75 > 601.5, 872.75 > 571.45, 872.75 > 577.5
TG (16:1-18:0-20:0)	C ₅₇ H ₁₀₈ O ₆	888.81	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	906.85 > 635.6, 906.85 > 605.55, 906.85 > 577.5
TG (16:1-18:0-20:1)	C ₅₇ H ₁₀₆ O ₆	886.80	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	904.85 > 633.6, 904.85 > 603.55, 904.85 > 577.5
TG (16:1-18:0-20:2)	C ₅₇ H ₁₀₄ O ₆	884.78	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	902.8 > 631.55, 902.8 > 601.5, 902.8 > 577.5
TG (16:1-18:0-20:3)	C ₅₇ H ₁₀₂ O ₆	882.77	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	900.8 > 629.55, 900.8 > 599.5, 900.8 > 577.5
TG (16:1-18:1-18:3)	C ₅₅ H ₉₆ O ₆	852.72	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	870.75 > 599.5, 870.75 > 571.45, 870.75 > 575.5
TG (16:1-18:1-20:0)	C ₅₇ H ₁₀₆ O ₆	886.80	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	904.85 > 633.6, 904.85 > 605.55, 904.85 > 575.5
TG (16:1-18:1-20:1)	C ₅₇ H ₁₀₄ O ₆	884.78	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	902.8 > 631.55, 902.8 > 603.55, 902.8 > 575.5
TG (16:1-18:1-20:2)	C ₅₇ H ₁₀₂ O ₆	882.77	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	900.8 > 629.55, 900.8 > 601.5, 900.8 > 575.5
TG (16:1-18:1-20:3)	C ₅₇ H ₁₀₀ O ₆	880.75	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	898.8 > 627.55, 898.8 > 599.5, 898.8 > 575.5
TG (16:1-20:0-20:0)	C ₅₉ H ₁₁₂ O ₆	916.85	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	934.9 > 663.65, 934.9 > 605.55
TG (16:1-20:0-20:1)	C ₅₉ H ₁₁₀ O ₆	914.83	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	932.85 > 661.6, 932.85 > 603.55, 932.85 > 605.55
TG (16:1-20:0-20:3)	C ₅₉ H ₁₀₆ O ₆	910.80	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	928.85 > 657.6, 928.85 > 599.5, 928.85 > 605.55
TG (16:1-20:1-20:1)	C ₅₉ H ₁₀₈ O ₆	912.81	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	930.85 > 659.6, 930.85 > 603.55
TG (18:0-18:0-20:0)	C ₅₉ H ₁₁₄ O ₆	918.86	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	936.9 > 635.6, 936.9 > 607.55
TG (18:0-18:0-20:1)	C ₅₉ H ₁₁₂ O ₆	916.85	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	934.9 > 633.6, 934.9 > 607.55

TG (18:0-18:0-20:3)	C ₅₉ H ₁₀₈ O ₆	912.81	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	930.85 > 629.55, 930.85 > 607.55
TG (18:0-18:1-18:3)	C ₅₇ H ₁₀₂ O ₆	882.77	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	900.8 > 599.5, 900.8 > 601.5, 900.8 > 605.55
TG (18:0-18:1-20:0)	C ₅₉ H ₁₁₂ O ₆	916.85	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	934.9 > 633.6, 934.9 > 635.6, 934.9 > 605.55
TG (18:0-18:1-20:1)	C ₅₉ H ₁₁₀ O ₆	914.83	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	932.85 > 631.55, 932.85 > 633.6, 932.85 > 605.55
TG (18:0-18:1-20:2)	C ₅₉ H ₁₀₈ O ₆	912.81	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	930.85 > 629.55, 930.85 > 631.55, 930.85 > 605.55
TG (18:0-18:1-20:3)	C ₅₉ H ₁₀₆ O ₆	910.80	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	928.85 > 627.55, 928.85 > 629.55, 928.85 > 605.55
TG (18:0-18:2-20:1)	C ₅₉ H ₁₀₈ O ₆	912.81	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	930.85 > 629.55, 930.85 > 633.6, 930.85 > 603.55
TG (18:0-18:2-20:2)	C ₅₉ H ₁₀₆ O ₆	910.80	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	928.85 > 627.55, 928.85 > 631.55, 928.85 > 603.55
TG (18:0-20:1-20:1)	C ₆₁ H ₁₁₄ O ₆	942.86	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	960.9 > 659.6, 960.9 > 633.6
TG (18:1-18:1-18:3)	C ₅₇ H ₁₀₀ O ₆	880.75	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	898.8 > 599.5, 898.8 > 603.55
TG (18:1-18:1-20:0)	C ₅₉ H ₁₁₀ O ₆	914.83	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	932.85 > 633.6, 932.85 > 603.55
TG (18:1-18:1-20:1)	C ₅₉ H ₁₀₈ O ₆	912.81	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	930.85 > 631.55, 930.85 > 603.55
TG (18:1-18:1-20:2)	C ₅₉ H ₁₀₆ O ₆	910.80	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	928.85 > 629.55, 928.85 > 603.55
TG (18:1-18:1-20:3)	C ₅₉ H ₁₀₄ O ₆	908.78	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	926.8 > 627.55, 926.8 > 603.55
TG (18:1-18:2-20:1)	C ₅₉ H ₁₀₆ O ₆	910.80	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	928.85 > 629.55, 928.85 > 631.55, 928.85 > 601.5
TG (18:1-20:0-20:0)	C ₆₁ H ₁₁₆ O ₆	944.88	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	962.9 > 663.65, 962.9 > 633.6
TG (18:1-20:1-20:1)	C ₆₁ H ₁₁₂ O ₆	940.85	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	958.9 > 659.6, 958.9 > 631.55
TG (18:2-20:0-20:1)	C ₆₁ H ₁₁₂ O ₆	940.85	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	958.9 > 661.6, 958.9 > 629.55, 958.9 > 631.55
TG (8:0-16:0-20:1)	C ₄₇ H ₈₈ O ₆	748.66	C18-SFC/MS/MS	[M + NH ₄] ⁺	[M + H - Acyl FA] ⁺	766.7 > 605.55, 766.7 > 493.45, 766.7 > 439.4