

包括的なハイスループットメソッドによる 血漿リピドームの詳細分析

著者

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

概要

液体クロマトグラフィー / タンデム質量分析 (LC/MS/MS) などの先進的なリピドーム技術を使用してヒトのリピドームを集団レベルで研究することにより、研究者は疾病状態と脂質代謝の関係を精査できるようになりました。このような研究では、必然的に母集団コホートからの多数のサンプルを使用します。リピドームの包括的な実態を把握するためには、数百の異なる脂質種の分析が必要とされるため、分析の詳細度とサンプルスループットのバランスが要求されます。このアプリケーションノートでは、10 μ L の血漿を使用して 763 種類のヒト脂質種を決定するターゲット LC/TQ ベースのメソッドについて説明します。合計分析時間は、シングルカラムを使用するとサンプルあたり 16 分でしたが、デュアルカラムシステムを使用した場合は 13 分に短縮されました。また、サンプル前処理と脂質抽出および、品質管理戦略、内部標準の調製、機器分析条件、データ処理に関する考察も行いました。

はじめに

脂質は、さまざまな特性と機能を備えた複雑な生体分子です。細胞膜と脂肪組織という主成分から構成され、哺乳類系における主要なエネルギー貯蔵分子として機能します。さらに細胞シグナル伝達パスウェイにおいても、不可欠な役割を果たします。したがって、脂質生物学の理解を深めることは、農業から医学まで幅広い科学分野で非常に重要だと考えられています。

リポミクスとは、リポドーム、すなわち細胞、組織、血漿の量など、特定の生物系内の脂質の全補体に関する研究です。その最終的な目標は、存在する脂質種、それらの代謝、関連する生物学の全体的な知見を得ることです。近年、リポミクス技術の進歩により、リポドーム内に存在する異性体や同重体種など、幅広い脂質のマッピングができるようになりました。特に、タンデム質量分析 (LC/MS/MS) と組み合わせた液体クロマトグラフィーやマルチプルリアクションモニタリング (MRM) などの技術により、ユーザーは数百の異なる脂質種を短時間で高度な特異性で測定できるようになりました。新しい機器の感度の向上により、生体物質内に微量濃度で存在するこれらの化合物の測定が容易になっています。クロマトグラフィーによる分離技術の進展により、リポドームをこれまでになく詳細にマッピングする機能もさらに相乗的に発展しています。

これらの高度なリポドーム技術の中で最も刺激的なアプリケーションはおそらく、集団レベルでのヒトリポドームの研究であり、脂質種、代謝パスウェイ、および疾患状態間の関連を明らかにする研究でしょう。このような研究は、脂質種が主にリポタンパク質粒子内に存在するヒト血漿を使用して実施され (図1)、サンプルは、何千人もの参加者からなる大規模な集団および臨床研究から得られます。^{1,2} このように多数のサンプルを取り扱う場合、分析の詳細度および、収集された質量分析データの分解能、サンプルスループットの間でバランスを取る必要があります。

このアプリケーションノートでは、10 μ L 血漿サンプルまたは同等量の細胞または組織ホモジネート内の 44 の脂質クラスから、763 の異なる脂質種の濃度を決定する方法について詳しく取り上げます。分析は、逆相 LC による分離に続いて、タンデム四重極質量分析計 (MS/MS) を用いて実施します。

脂質種/クラスのイオン化とフラグメンテーションの詳細を、使用した内部標準とともに表 1 に示します。合計分析時間は、シングルカラムメソッドの場合はサンプルあたり 16 分、デュアルカラムシステムの場合は 13 分です。このメソッドでは、迅速なデータ処理を可能とする Agilent MassHunter ソフトウェアパッケージと統合された Agilent LC/MS/MS 機器を使用します。

報告するメソッドは、主にハイスループットで大規模なコホート研究の血漿サンプルの分析のために開発されたものですが、このプロトコルはさまざまな生物学的マトリックスに容易に適合させることができます。LC 分離および MS/MS パラメータはまた、必要とされる構造分解能のレベルや、スループット要件に合わせて変更された分離プロトコルに応じて、調整することが可能です。

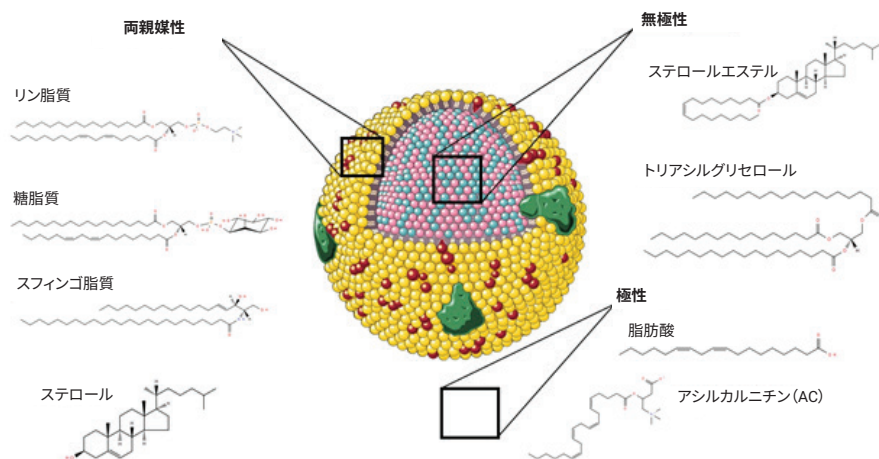


図 1. ヒト血漿に共通する脂質クラスの図。脂質は、複数のクラスとサブクラスから成る小さな両親媒性分子です。ヒト血漿では、これらの脂質の大多数は、末梢を循環するリポタンパク質粒子に見られます。

表 1. 脂質クラスのイオン化とフラグメンテーションの詳細

脂質クラス/サブクラス	プリカーサイオン	フラグメンテーション ¹	脂質種の数	内部標準	内部標準 (pmol) / サンプル
スフィンゴシン (Sph)	[M + H] ⁺	NL, 18.0 Da	2	Sph(d17:1)	20
スフィンゴシン-1-リン酸 (S1P)	[M + H] ⁺	スフィンゴイド塩基特異性	4	S1P(18:1) d7	40
ジヒドロセラミド (dhCer)	[M + H] ⁺	スフィンゴイド塩基特異性	6	dhCer(d18:0/8:0)	50
セラミド (Cer (d))	[M + H] ⁺	スフィンゴイド塩基特異性	41	Cer(d18:1-d7/18:0)	50
デオキシセラミド (Cer (m))	[M + H] ⁺	スフィンゴイド塩基特異性	11	Cer(d18:1-d7/18:0)	50
セラミド-1-リン酸 (C1P)	[M + H] ⁺	スフィンゴイド塩基特異性	1	Cer(d18:1-d7/18:0)	50
モノヘキソシルセラミド (HexCer)	[M + H] ⁺	スフィンゴイド塩基特異性	13	HexCer(d18:1/15:0) d7	50
ジヘキソシルセラミド (Hex2Cer)	[M + H] ⁺	スフィンゴイド塩基特異性	9	Hex2Cer(d18:1/15:0) d7	50
トリヘキソシルセラミド (Hex3Cer)	[M + H] ⁺	スフィンゴイド塩基特異性	5	Hex3Cer(d18:1/17:0)	50
GM3 ガングリオシド (GM3)	[M + H] ⁺	スフィンゴイド塩基特異性	6	Hex3Cer(d18:1/17:0)	50
スルファチド (SHexCer)	[M + H] ⁺	PI, m/z 264.3	5	SHexCer(d18:1/12:0)	10
スフィンゴミエリン (SM)	[M + H] ⁺	PI, m/z 184.1	45	SM(d18:1/15:0) d9	100
ホスファチジン酸 (PA)	[M + H] ⁺	NL, 115.0 Da	4	PA(15:0-18:1) d7	50
ホスファチジルコリン (PC)	[M + H] ⁺	PI, m/z 184.1	70	PC(15:0-18:1) d7	100
アルキルホスファチジルコリン (PC (O))	[M + H] ⁺	PI, m/z 184.1	23	PC(15:0-18:1) d7	100
アルキルホスファチジルコリン (プラズマローゲン) (PC (P))	[M + H] ⁺	PI, m/z 184.1	28	PC(P-18:0/18:1) d9	100
リゾホスファチジルコリン (LPC)	[M + H] ⁺	PI, m/z 184.1 and m/z 104.1	61	LPC(18:1) d7	100
リゾアルキルホスファチジルコリン (リゾ血小板活性化因子) (LPC (O))	[M + H] ⁺	PI, m/z 104.1	10	LPC(18:1) d7	100
リゾアルケニルホスファチジルコリン (プラズマローゲン) (LPC (P))	[M + H] ⁺	PI, m/z 104.1	6	LPC(18:1) d7	100
ホスファチジルエタノールアミン (PE)	[M + H] ⁺	NL, 141.0 Da	32	PE(15:0-18:1) d7	100
アルキルホスファチジルエタノールアミン (PE (O))	[M + H] ⁺	NL, 141.0 Da	15	PE(15:0-18:1) d7	100
アルキルホスファチジルエタノールアミン (プラズマローゲン) (PE (P))	[M + H] ⁺	アシル鎖特異性	48	PE(P-18:0/18:1) d9	100
リゾホスファチジルエタノールアミン (LPE)	[M + H] ⁺	NL, 141.0 Da	12	LPE(18:1) d7	100
リゾアルケニルホスファチジルエタノールアミン (プラズマローゲン) (LPE (P))	[M + H] ⁺	NL, 171.9 Da	4	LPE(18:1) d7	100
ホスファチジルイノシトール (PI)	[M + NH ₄] ⁺	NL, 277.0 Da	25	PI(15:0-18:1) d7	50
ホスファチジルイノシトール-リン酸 (PIP1)	[M + NH ₄] ⁺	NL, 357.0 Da	1	PI(15:0-18:1) d7	50
リゾホスファチジルイノシトール (LPI)	[M + NH ₄] ⁺	NL, 277.0 Da	7	LPI(13:0)	20
ホスファチジルセリン (PS)	[M + H] ⁺	NL, 185.0 Da	4	PS(15:0-18:1) d7	50
ホスファチジルグリセロール (PG)	[M + NH ₄] ⁺	NL, 189.0 Da	4	PG(15:0-18:1) d7	50
コレステリルエステル (CE)	[M + NH ₄] ⁺	PI, m/z 369.3	27	CE(18:0) d6	1,000
遊離コレステロール (COH)	[M + NH ₄] ⁺ インソースフラグメント	PI, m/z 161.2	1	COH(d7)	10,000
デヒドロコレステロールエステル (DE)	[M + NH ₄] ⁺	PI, m/z 367.4	4	CE(18:0) d6	1,000
メチルコレステリルエステル (メチル-CE)	[M + NH ₄] ⁺	PI, m/z 383.3	4	CE(18:0) d6	1,000
メチル-デヒドロコレステリルエステル (メチル-DE)	[M + NH ₄] ⁺	PI, m/z 381.4	2	CE(18:0) d6	1,000
ジメチルコレステリルエステル (ジメチル-CE)	[M + NH ₄] ⁺	PI, m/z 396.6	3	CE(18:0) d6	1,000
遊離脂肪酸 (FFA)	[M - H] ⁻	SIM	16	FFA(18:1) d9	200
アシルカルニチン (AC)	[M + H] ⁺	PI, m/z 85.1	28	AC(16:0) d3	10
ヒドロキシル化アシルカルニチン (AC-OH)	[M + H] ⁺	PI, m/z 85.1	8	AC(16:0) d3	10
胆汁酸 (BA)	[M + NH ₄] ⁺	種に依存	2	コール酸 d4	50
ジアシルグリセロール (DG)	[M + NH ₄] ⁺	NL、脂肪酸	24	DG(15:0-18:1) d7	200
トリアシルグリセロール (ニュートラルロス、関連) (TG [NL])	[M + NH ₄] ⁺	NL、脂肪酸	77	TG(15:0-18:1-d7_15:0)	100
アルキルジアシルグリセロール (ニュートラルロス、関連性) (TG (O) [NL])	[M + NH ₄] ⁺	NL、脂肪酸	19	TG(15:0-18:1-d7_15:0)	100
ユビキノン	[M + NH ₄] ⁺	PI, m/z 197.0	1	Hex3Cer(d18:1/17:0)	50
酸化脂質 (OxSpecies)	種に依存 [+O]	種に依存	6	種に依存	-

¹ NL = ニュートラルロス、PI = プリカーサイオン

実験方法

試薬

ギ酸アンモニウムは Sigma-Aldrich (セントルイス、ミズーリ州、米国) から購入しました。メタノール (LC) および、1-ブタノール (LC)、水 (LC/MS グレード)、アセトニトリル、2-プロパノール (LC/MS のハイパーグレード、LiChrosolv) は、Supelco (ベルフォント、ペンシルベニア州、米国) から購入しました。NIST1950 QC 材料は、米国国立標準技術研究所 (ロサンゼルス、カリフォルニア州、米国) から購入しました。アシルカルニチン 16:0

d3 (Larodan AB、ソルナ、スウェーデン) および、コレステロールエステル 18:0 d6 (CDN Isotopes、ケベック、カナダ)、C18:1 d9 脂肪酸 (Sigma-Aldrich、セントルイス、ミズーリ州、米国)、トリヘキソシルセラミド 17:0 (Matreya LLC、ステートカレッジ、ペンシルベニア州、米国) を除き、内部標準はすべて Avanti Polar Lipids (アラバスター、アラバマ州、米国) から購入しました。

内部標準混合物の調製

分析中の各脂質種の相対濃度を決定するために、安定同位体標識および非生理学的種からなる内部標準を各サンプルに添加しました。

内部標準の混合物は、市販品 (表 2) を社内で調製しましたが、SPLASH LIPIDOMIX 質量分析標準 (Avanti) などの既製の混合物でも構いません。代替の内部標準化合物を使用する場合は、追加する各標準化合物のリテンションタイムを求め、機器とデータ処理メソッドファイルの両方を更新する必要があります。

個々の内部標準はすべて、サプライヤーから受け取ったまま -80°C で保管しました。混合物を調製するために、標準液を解凍して室温とし、1:1 のクロロホルム:メタノール中で表 2 の列 3 に記載の所定の原液濃度としました。次に、得られた原液を組み合わせて、表

表 2. 内部標準の情報

名称	分子量	原液 (μM)	標準混合液の濃度 (μM)	pmol /サンプル (10 μL)	溶媒	サプライヤ	カタログ番号	Avanti SPLASH LIPIDOMIX に掲載の有無 ^{1,2,3}
AC(16:0) d3	439.09	100	1	10	CHCl ₃ :MeOH (1:1)	Larodan	71-1746-5	なし
CE(18:0) d6	659.16	2,000	100	1,000	CHCl ₃ :MeOH (1:1)	CDN isotopes	D-5823	なし
Cer(d18:1-d7/18:0)	572.99	200	5	50	CHCl ₃ :MeOH (1:1)	Avanti	860677P	なし
コール酸 d4	412.61	200	5	50	CHCl ₃ :MeOH (1:1)	Cayman	20849	なし
COH(d7)	393.69	20,000	1,000	10,000	CHCl ₃ :MeOH (1:1)	Avanti	700041P	あり
DG(15:0_18:1) d7	587.97	800	20	200	CHCl ₃ :MeOH (1:1)	Avanti	791647	あり
dhCer(d18:0/8:0)	427.71	200	5	50	CHCl ₃ :MeOH (1:1)	Avanti	860626P	なし
FFA(18:1) d9	291.52	3,000	20	200	CHCl ₃ :MeOH (1:1)	Avanti	861809	なし
Hex2Cer(d18:1/15:0) d7	855.21	400	5	50	CHCl ₃ :MeOH:H ₂ O (1:1:0.2)	Avanti	330727	なし
Hex3Cer(d18:1/17:0)	1038.35	100	5	50	CHCl ₃ :MeOH:H ₂ O (1:1:0.2)	Matreya LLC	1523	なし
HexCer(d18:1/15:0) d7	693.06	400	5	50	CHCl ₃ :MeOH (1:1)	Avanti	330729	なし
LPC(18:1) d7	528.71	400	10	100	CHCl ₃ :MeOH (1:1)	Avanti	791643	あり
LPE(18:1) d7	486.63	400	10	100	CHCl ₃ :MeOH (1:1)	Avanti	791644	あり
LPI(13:0)	547.57	200	2	20	CHCl ₃ :MeOH (1:1)	Avanti	850101	なし
PA(15:0_18:1) d7	689.93	400	5	50	CHCl ₃ :MeOH (1:1)	Avanti	791642	あり
PC(15:0_18:1) d7	753.09	400	10	100	CHCl ₃ :MeOH (1:1)	Avanti	791637	あり
PC(P-18:0/18:1) d9	781.19	400	10	100	CHCl ₃ :MeOH (1:1)	Avanti	852475	あり
PE(15:0_18:1) d7	711.01	400	10	100	CHCl ₃ :MeOH (1:1)	Avanti	791638	あり
PE(P-18:0/18:1) d9	739.11	400	10	100	CHCl ₃ :MeOH (1:1)	Avanti	852474	あり
PG(15:0_18:1) d7	764.01	400	5	50	CHCl ₃ :MeOH (1:1)	Avanti	791640	あり
PI(15:0_18:1) d7	847.12	400	5	50	CHCl ₃ :MeOH (1:1)	Avanti	791641	あり
PS(15:0_18:1) d7	777.00	400	5	50	CHCl ₃ :MeOH:H ₂ O (1:1:0.2)	Avanti	791639	あり
S1P(18:1) d7	386.52	400	4	40	CHCl ₃ :MeOH:H ₂ O (1:1:0.2)	Avanti	860659	なし
SHexCer(d18:1/12:0)	741.03	200	1	10	CHCl ₃ :MeOH (1:1)	Avanti	860573P	なし
SM(d18:1/15:0) d9	698.06	800	10	100	CHCl ₃ :MeOH (1:1)	Avanti	860686	なし
Sph(d17:1)	285.47	400	2	20	CHCl ₃ :MeOH (1:1)	Avanti	860640P	なし
TG(15:0_18:1-d7_15:0)	812.35	400	10	100	CHCl ₃ :MeOH (1:1)	Avanti	791648	あり

¹ ここにリストされている特定の CE および SM 標準は、Avanti SPLASH LIPIDOMIX にはありませんが、同等の標準が存在します。

² プラズマローゲン標準は、SPLASH II Lipidomix ミックスでのみ入手できます。コレステロール (COH)、PA、PG 標準は、SPLASH I LIPIDOMIX でのみ入手できます。

³ SPLASH LIPIDOMIX で利用可能なすべての標準が、列 3 に示されているのと同じ濃度で含まれているわけではありません。

2 の列 4 に記載されている最終濃度で、すべての内部標準の単一混合物を調製しました。この内部標準混合物を超音波洗浄器で 15 分間超音波処理して十分に混合した後、使い捨てアリコートに分注して -80°C で保存しました。

抽出溶媒の調製

血漿サンプルから脂質を抽出するのに使用する溶媒を調製するために、内部標準混合物の事前に調製したアリコートを生温（1 時間）に解凍し、15 分間超音波洗浄器で超音波処理した後、ボルテックスしました。次に、必要量の内部標準混合物（抽出するサンプルあたり $10\ \mu\text{L}$ ）を真空下で乾燥させ、 $10\ \text{mM}$ ギ酸アンモニウムを含む 10 倍量の 1:1 ブタノール：メタノールで再溶解し、超音波洗浄器で 15 分間、再度超音波処理しました。例えば、サンプルを 100 個抽出する場合、 $1\ \text{mL}$ の内部標準混合物を乾燥させ、 $10\ \text{mM}$ ギ酸アンモニウムを含む $10\ \text{mL}$ の 1:1 ブタノール：メタノールで再溶解します。

サンプルワークリスト、ランダム化、および品質管理サンプルの導入

サンプルの抽出または分析の前に、サブジェクトサンプルとコントロールサンプルを処理する順序を指定するサンプルワークリストを作成しました。サンプルを最初に抽出し、次に分析のために LC/MS/MS に導入するときには、この順序で行います。これを実施するにあたって、データセット全体の抽出バイアスの影響を最小限に抑えるために、すべての対象サンプルを最初にランダム化しました。統計的に関連性のあるサンプルグループまたはタイムポイントに対しては、それらのペアは保ち、収集順序などの要素をランダム化しました。

その後、多数の異なる品質管理サンプルをワークリストに導入しました。PQC および、NIST1950 QC、ブランクサンプルは、同じ手順を使用してサブジェクトサンプルと一緒に抽出しましたが、TQC は以前に抽出およびプールされた血漿から取り出しました。これらのサンプルは、結果のデータを調整し、機器のドリフトと変動（異なるバッチ内およびバッチ間の両方）を補正し、データ内のより深刻なエラーを検出するために必要となります。各品質管理タイプの構成と役割を要約し、サンプルワークリスト内にそれらを組み込む手順を説明します。

血漿品質管理 (PQC)

PQC サンプルは、健康なボランティア ($n = 8 \sim 20$) から採取した血漿をプールし、使い捨てのアリコートに分注し、 -80°C で保存しました。抽出プロセスから導入されたばらつきをテストするために、15 サンプルごとに PQC サンプルを挿入しました（バッチごとに最低 10 個の PQC サンプルを含むようにしました）。これらのサンプルの %CV により、ピペッティングとハンドリングによって発生したエラーの監視が可能になり、さらにサンプルが多数であるために抽出バッチが複数になる場合のバッチ調整も可能になりました。

技術的品質管理 (TQC)

TQC サンプルは、PQC に使用したのと同じ血漿のアリコートを抽出し、抽出のばらつきを取り除くために、抽出物をプールして個別に調製しました。抽出のばらつきが除去されたこれらの TQC サンプルを用いることにより、機器のばらつきや性能（分解能、リテンションタイムドリフトなど）を個別にモニタリングすることが可能になります。これらのサンプルは、バッチごとに最低 10 個、15 個の生物学的サンプルごとに挿入されました。

NIST1950 品質管理 (NIST1950 QC)

NIST1950 は、市販の標準化された血漿源です。NIST1950 品質管理サンプルを追加すると、ラボ内のさまざまなサンプルセットの正確な調整だけでなく、NIST1950 QC を使用した他のラボのさまざまなサンプルセットとの比較・調整も可能になります。凍結/解凍サイクルを繰り返すのを回避するために、1 回のプロセスで、NIST1950 QC サンプルを解凍し、エッペンドルフ抽出チューブに分注しました（ $10\ \mu\text{L}$ ）。NIST1950 QC サンプルを、30 サンプルごとに挿入し、バッチ全体で最低 8 サンプルが含まれるようにしました。

ブランクサンプル

$10\ \mu\text{L}$ の milliQ 水からなるブランクサンプルは、バックグラウンドシグナルを監視するために用い、生物学的サンプルおよび PQC と同時に抽出しました。ブランクサンプルは 30 サンプルごとに挿入し、バッチ全体で最低 5 個含まれるようにしました。

ヒト血漿の脂質抽出

高濃度の塩とタンパク質による機器の汚れを防ぐために、血漿サンプルはすべて溶媒に抽出し、目的の化合物を溶液に移動させました。塩とタンパク質は、ペレット化して廃棄することができました。³

脂質抽出は、ポリプロピレン製容積式ピペットを使用して $1.5\ \text{mL}$ 小型遠心チューブで実施しました。 $10\ \mu\text{L}$ の血漿を、ブタノール：メタノール (1:1) と $10\ \text{mM}$ ギ酸アンモニウムおよび内部標準の再溶解混合物からなる $100\ \mu\text{L}$ の抽出溶媒と混合しました（表 2）。次に、各サンプルを 5 秒間ボルテックスし、続いて温度を $21 \sim 25^{\circ}\text{C}$ に保ちながら 1 時間超音波洗浄器で超音波処理しました。次に、サンプルを遠心分離し（ $13,000\ \text{xg}$ 、10 分、 20°C ）、上清を $200\ \mu\text{L}$ のガラスインサート（5183-

2085) 付きの 1.5 mL ガラスサンプルバイアル (5190-9062) に移しました。サンプルは、PTFE/S キャップ (5185-5820) を使用してキャップしました。サンプルは分析直前まで -80 °C で保存し、室温 (1 時間) まで解凍し、15 分間超音波洗浄器で超音波処理して短時間ボルテックスを行った後、機器のオートサンプルにロードしました。

ハイスループット分析が必要な場合は、アプリケーションノート 5991-5724⁴ を使用して、Bravo プラットフォームの 96 ウェルプレートでサンプルを抽出できます。

機器と LC/MS/MS メソッド

抽出された血漿サンプルは、Agilent 1290 Infinity/Infinity II LC システムを使用して分離しました。このシステムには次のものが含まれます：

- Agilent 1290 Infinity オートサンプルラ (G4226A) **注意**：1290 Infinity II マルチサンプルラ (G7167B) も使用できます。リテンションタイムへの影響が最小限に抑えられます。
- Agilent 1290 Infinity II ハイスピード (バイナリ) ポンプ (G7120A、2 台のポンプをデュアルカラム設定に使用します)
- Agilent 1290 Infinity II マルチカラムサーモスタット (G7116B)、Agilent InfinityLab クイックチェンジ 2 ポジション/10 ポートバルブヘッド付き (デュアルカラムセットアップ用、部品番号 5067-4240)

シングルカラムおよびデュアルカラムのセットアップの配管要件を図 2 と表 5 に示します。

LC システムは、Agilent JetStream 技術のイオンソースを備えた Agilent 6495C トリプル四重極 LC/MS に連結して使用しました。

脂質抽出物 (1 µL、0.1 µL 血漿に相当) を注入し、16 分のグラジエントを使用して分離しました。詳細な条件を表 3 に示します。最初の 0.8 分は廃棄しました。または、デュアルカラム設定を使用して、表 4 に示す 13 分のグラジエントプログラムで分析時間を短縮することもできます。LC/MS/MS 分析は、ダイナミックマルチプルリアクションモニタリン

表 3. シングルカラム設定のクロマトグラフィー条件

パラメータ	Agilent 1290 Infinity/Infinity II LC																						
分析カラム	Agilent ZORBAX Eclipse Plus C18、100 × 2.1 mm、1.8 µm (部品番号 959758-902)																						
インラインフィルタ	Agilent 1290 Infinity II インラインフィルタ、0.3 µm (部品番号 5067-6189)																						
カラム温度	45 °C																						
注入量	1 µL (血漿 0.1 µL に相当)																						
オートサンプルラ温度	20 °C																						
ニードル洗浄	1:1 ブタノール：メタノールで 3 秒間バイアルを洗浄 *または、1:1 移動相 A/B、10 秒間フラッシュポートの使用も可																						
移動相	A) 水：アセトニトリル：2-プロパノール 5:3:2 中 10 mM ギ酸アンモニウム、5 µM アジレント不活性化添加剤 (部品番号 5191-3940) B) 水：アセトニトリル：2-プロパノール 1:9:90 中 10 mM ギ酸アンモニウム *移動相 B には不活性化添加剤を添加しないでください																						
流量	0.4 mL/分																						
グラジエントプログラム	<table border="1"> <thead> <tr> <th>時間 (分)</th> <th>%B</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>0</td><td>15</td></tr> <tr><td>2.5</td><td>50</td></tr> <tr><td>2.6</td><td>57</td></tr> <tr><td>9</td><td>70</td></tr> <tr><td>9.1</td><td>93</td></tr> <tr><td>11</td><td>96</td></tr> <tr><td>11.1</td><td>100</td></tr> <tr><td>12</td><td>100</td></tr> <tr><td>12.2</td><td>15</td></tr> <tr><td>16</td><td>15</td></tr> </tbody> </table>	時間 (分)	%B	0	15	2.5	50	2.6	57	9	70	9.1	93	11	96	11.1	100	12	100	12.2	15	16	15
時間 (分)	%B																						
0	15																						
2.5	50																						
2.6	57																						
9	70																						
9.1	93																						
11	96																						
11.1	100																						
12	100																						
12.2	15																						
16	15																						
ストップタイム	16 分																						
ポストタイム	なし																						

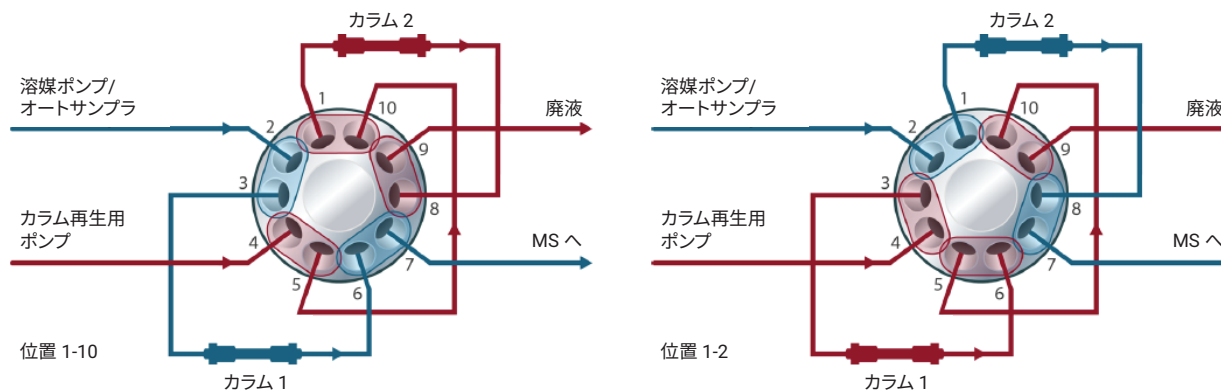


図 2. デュアルカラムのセットアップ図。交互カラム生成を可能にするためのスイッチングバルブ配管の例

グ (dMRM) を用いて実施しました。MS 機器のパラメータとソース条件を表 6 に示します。この方法論の開発と詳細は、公開済みの文献¹で入手できます。

表 4. デュアルカラム設定のクロマトグラフィー条件

パラメータ	Agilent 1290 Infinity/Infinity II LC	
分析カラム	2×Agilent ZORBAX Eclipse Plus C18、100 × 2.1 mm、1.8 μm (部品番号 959758-902)	
インラインフィルタ	2×Agilent 1290 Infinity II インラインフィルタ、0.3 μm (部品番号 5067-6189)	
カラム温度	45 °C	
注入量	1 μL (血漿0.1 μL に相当)	
オートサンブラ温度	20 °C	
ニードル洗浄	1:1 ブタノール：メタノールで 3 秒間バイアルを洗浄 *または、1:1 移動相 A/B、10 秒間フラッシュポートの使用も可	
移動相	A) 水：アセトニトリル：2-プロパノール 5:3:2 中 10 mM ギ酸アンモニウム、5 μM アジレント不活性化添加剤 (部品番号 5191-3940) B) 水：アセトニトリル：2-プロパノール 1:9:90 中 10 mM ギ酸アンモニウム *移動相 B には不活性化添加剤を添加しないでください	
流量	0.4 mL/分	
グラジエントプログラム	ポンプ A (G7120A)	
	時間	%B
	0	15
	2.5	50
	2.6	57
	9	70
	9.1	93
	11	96
	11.1	100
	12	100
12.2	15	
12.9	15	
ポンプ B (G7120A)		
時間	%B	
0	15	
1	50	
2	100	
6	100	
7	15	
12.9	15	
ストップタイム	13 分	
ポストタイム	なし	
MCT バルブ位置	カレントを使用、分析後バルブ位置を上げる	

表 5. シングルカラムセットアップ用の LC 配管の詳細

位置	部品の説明	部品番号 ¹
バイナリポンプミキサ	V35 Jet Weaver ミキサ	G7120-68135
ポンプからオートサンブラへの配管	キャピラリー、ステンレス、内径 0.17 mm、600 mm	G1312-67305
ニードル	ニードルアセンブリ、0.12 mm	G4226-87201
ニードルシート	ニードルシート、内径 0.12 mm	G4226-87012
メータリングキャピラリー	キャピラリー、ステンレス、0.17 × 160 mm、S/SL、ps/ps	G4226-60301
サンプルループアセンブリ	20 μL ループアセンブリ	G4226-60310
オートサンブラから MCT	キャピラリー SST、0.12 × 500 mm ロングソケット	5500-1157
熱交換器	標準フロー熱交換器、1.6 μL	G7116-60015
インラインフィルタへの接続	クイックコネクタアセンブリ ST 0.12 × 105 mm	5067-5957
熱交換器の出入り用フィッティング	クイックターン LC フィッティング	5067-5966
MS への PEEK 配管	PEEK 配管、内径 0.13 mm、700 mm	0890-1915

¹ 部品番号は、ここで説明する LC 構成に固有のもので、Agilent 1290 Infinity II マルチサンブラを使用している場合、部品番号が一部異なります。

ダイナミックマルチプル リアクションモニタリングの設定

この方法論の重要な特徴は、質量分析計内でダイナミックマルチプルリアクションモニタリング (dMRM) を利用していることです。対象を拡大したリビドーム内の多数の脂質種を測定する機器の場合、各化合物が溶出する特定のリテンションタイムウィンドウを、機器がサンプル分析時間全体の特定のポイントで特定の脂質種のみをスキャンするように定義する必要があります。このリテンションタイムウィンドウは MRM ごとに異なり、ピーク幅の違いに大きく依存します。このアプローチにより、機器のデューティサイクルが向上し、化合物あたりの平均ドウェルタイムが延長されます (図 3)。

dMRM メソッドは、Agilent MassHunter Acquisition ソフトウェアを使用して作成しました。このソフトウェアの対象の各化合物の MRM スキャンは、化合物の既知のリテンションタイムとほぼ一致していました。リテンションタイムを表 A1 に示します (付録を参照)。コリジョンエネルギーと MRM トランジションは、最大の応答を提供するために、各脂質クラスの代表的な標準で最適化されています。AJS ソースパラメータは、Agilent Source Optimizer ソフトウェアを使用して、すべての

表 6. MS 機器パラメータ

パラメータ	Agilent 6495C トリプル四重極 LC/MS
イオン源	Agilent Jet Stream
極性	ポジティブとネガティブの切り替え
ガス温度	150 °C
乾燥ガス (窒素)	17 L/分
ネブライザガス	20 psi
シーズガス	200 °C
シーズガス流量	10 L/分
キャピラリー電圧	3,500 V (+), -3,000 V (-)
ノズル電圧	1,000 V (+), -1,500 V (-)
iFunnel 高/低圧 RF	200/110 V (+), 150/60 V (-)
スキャンタイプ	ダイナミック MRM (dMRM)
Q1/Q2 分解能	ユニット (0.7 amu)
デルタ EMV	100 V (+), 0 V (-)
セル加速電圧	4 ~ 5 V
サイクル時間	650 ミリ秒
タイムフィルタ幅	0.07 分
MRM の総数	665 (ポジティブ: 646, ネガティブ: 19)

クラスで感度のバランスが取れるように最適化したものです。ピーク全体で適切な数のポイントを維持して信頼性の高い定量を行うために、650 ミリ秒のサイクルタイムを選択しました。この研究では、665 個のトランジションを利用して、763 個のヒト脂質種と異性体をモニタリングしました。665 個のトランジショ

ンのうち、最も混雑したセクションでは 115 個のトランジションが発生し、平均ドウェルタイムは 5 ミリ秒未満でした。6495C LC/TQ は、これらの短いドウェルタイムでも、化合物全体で優れた精度を維持することができました (結果と考察を参照)。

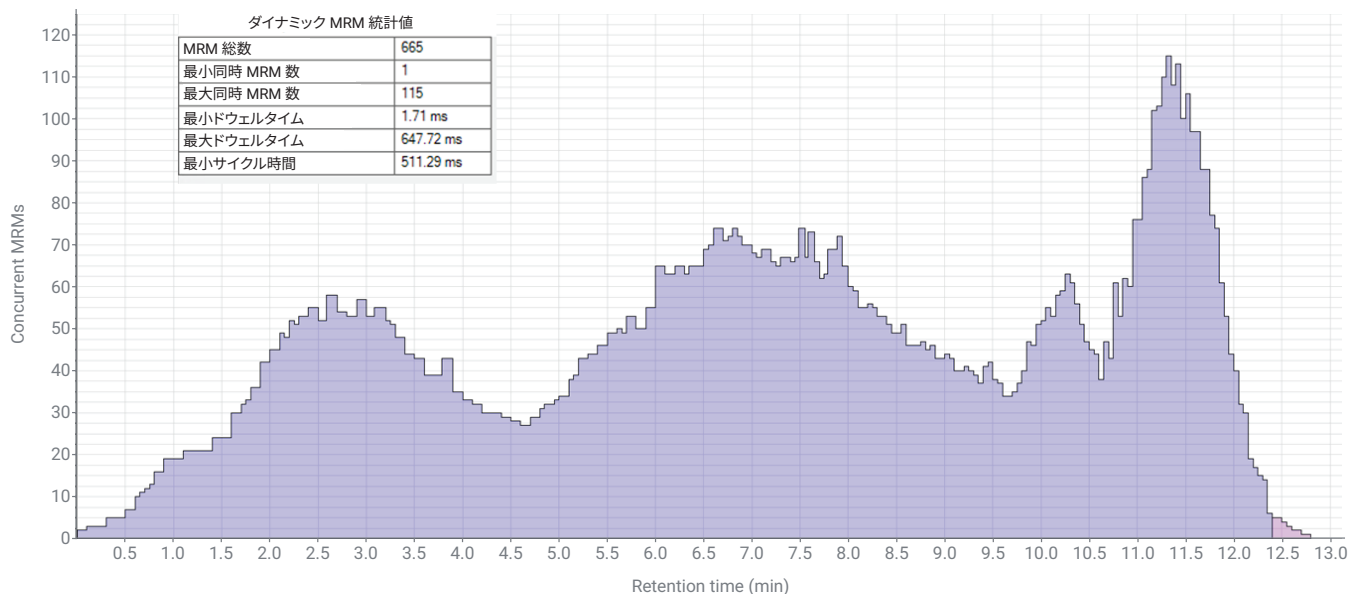


図 3. 同時 MRM とリテンションタイム。各リテンションタイムでの同時 MRM を示す dMRM の要約プロット、およびドウェルタイムと同時 MRM の詳細を示す dMRM の統計値

血漿中の脂質の学名と構造解析

この文書で使用されている脂質の命名規則は、Lipid Maps コンソーシアムによって確立されたガイドラインと、その後 Liebisch ら^{5,7} によって公開された省略表記に従います。リン脂質は通常、2つの脂肪酸鎖を含み、詳細な特性解析がない場合は、炭素原子と二重結合の合計組成として表されます（つまり、PC (38:4)）。

ただし、アシル鎖の組成が決定されている場合、命名規則はこれを示します（つまり、PC (38:4) は PC (18:0_20:4) に変更されます）。これは、他の脂質クラスおよびサブクラスにも拡張されます。グリセロール骨格上の脂肪酸の位置がわかっている場合、これは PC (18:0/20:4) となり、18:0 が sn-1 の位置にあって、20:4 が sn-2 の位置にあることを示します。クロマトグラフィーで分離されているものの、特性が不完全なままである種は、(a) または (b) でラベル付けされました。例えば、PC (P-17:0/20:4) (a) および PC (P-17:0/20:4) (b) とし、ここで (a) と (b) は溶出順序を表します。

このメソッドの質量および、フラグメンテーション、クロマトグラフィーに基づく脂質種の構造アノテーションは、以前に報告されています。¹ 単一の、さらには複数の MRM トランジションでは一般的に、特定の脂質種、特にグリセロリン脂質の十分な構造情報が得られないことがよくあります。これに対処するアプローチには多くのものがあり、それぞれに異なる制限があります。このメソッドは、オフライン実験を活用して、特定のリテンションタイムでの脂質構造の識別を追加で実施し、コホート研究の個々のサンプルではなく、プールされた代表的な血漿サンプルで実行されます。このような実験の詳細は参考文献 1 に報告されており、いくつかの例が示されています。

リン脂質の特性解析： トランジション 786.6 & 184.1 で測定された PC (36:2) は 2 つのピークとして溶出しますが、リテンションタイムに基づいて PC (36:2) (a) および (b) でラベル付けされました。ギ酸付加物としてネガティブモードで、またはナトリウム付加物を使用してポジティブモードでモニタリングする、PC クラスの直交トランジションを使用した追加実験で、脂肪酸に特異的な生成物が得られます。ここでは、(a) ピークは主に PC (18:1/18:1) ですが、2 番目に大きい (b) ピークは PC (18:0_18:2) です。これは、すべてのグリセロリン脂質およびスフィンゴミエリン種で分析できます。

合成標準： 一部の脂質異性体では、二重結合の位置が異なりました（例えば、22:5 脂肪酸を含むリン脂質は、オメガ 3 またはオメガ 6 アイソフォームとして血漿中に存在します）。さまざまなフラグメンテーション条件を使用してこれらを同定する多くのアプローチが利用可能ですが、2 つのアイソフォームを使用して標準を合成し、クロマトグラフィーで同定する方法を選択しました。同様に、従来の化学種（ヘプタデカン酸）と、異性体であるモノメチル分岐脂質（すなわちメチルヘキサデカン酸）は、CID の代わりに EID などの手法を使用するか、溶出時間に基づいて同定できます。標準の合成は、血漿サンプルと一緒に分析した場合の分岐と直鎖状のアシル鎖アイソフォームとこの間のリテンションタイムの違いを特性解析するのに役立ちました。

プラズマローゲン： PC (O) および PC (P) 種は異性体であるため、プラズマローゲン種を高速で確認する簡単な方法は、脂質抽出物を HCl フュームで処理することです。これにより、種がビニルエーテル結合で選択的に加水分解されます（プラズマローゲン）。一方が加水分解される 2 つの連続したサンプルを実行すると、これらの種の同一性が確認できます。

同位体の重なり： 炭素は約 1.1 % の天然存在比で ¹³C として存在するため、観察されるクロマトグラフィーピークの多くは同位体種から生じる可能性があります（つまり、PC (36:2) の +2 同位体は PC (36:1) トランジションで観察できますが、通常リテンションタイムが異なります）。これは、ダイナミックレンジが大きいため、ホスファチジルコリンおよびスフィンゴミエリン種で特に問題になります。これらは、トランジションをオーバーレイすることで（上記の例では 788.6 & 184.1 と 788.6 & 185.1）、簡単に識別および除外できます。同位体質量の増加は、プリカーサーイオンが同位体である場合、プロダクトイオンでのみ可能です。次に、両方のトランジション（同位体）に存在する LC ピークを除外できます。

これらのアプローチとともに、この方法論における構造アノテーションと同定の基礎を形成します。これらの実験は、プールされた血漿サンプルを使用して実施しました（ただし、NIST1950 血漿などのより一般的な参照血漿も使用できます）。これらのアノテーションは、血漿サンプルを分析するときに使用されます。新しいマトリックスを使用する場合（例えば、脳組織）、異なる異性体組成および、相対アバundance、血漿には見られない新しい種/クラスが存在などの要因で、このプロセスを繰り返す必要があります。また、ここで紹介するメソッドは血漿に焦点を当てています。他の組織（すなわち、脳）に特化したプロファイルをさらに開発すれば、このような研究をさらに強化すると考えられます。

サンプルハンドリングとシステム構成に関する考慮事項

最終的な構成とプロセスはユーザーによって異なりますが、次のような事項を考慮することにより、より堅牢なプラットフォームが構築できます。

オートサンプラのサンプル凍結・融解と温度：

脂質の溶解度が温度によって異なるため、温度が適切に制御されていない場合、分析にばらつきをもたらされる可能性があります。脂質抽出は、1:1:0.2 のブタノール：メタノール：水の混合物では 1:10 の血漿脂質に希釈されます。-80 °Cで保存したサンプルを解凍する場合、サンプルを室温で 1 時間かけて解凍した後、15 分間超音波洗浄器で超音波処理してからボルテックスし、注入に先立って室温で 2 時間静置しました。これにより、脂質が注入前に平衡に達することが保証されます。解凍が不適切であると、特に極性の低い化合物（トリグリセリドおよびコレステリルエステル）において、時間の経過とともに脂質濃度が変化する可能性があります。

切り替えバルブ：感度を損なうことなくサンプルの大規模なセットの分析を行う際の重要なポイントの 1 つは、残留塩と極性化合物を含む分析の最初の 0.8 分間を、質量分析計ではなく廃液に切り替えることです。この時間は LC を構成するカラム容量に依存するため、必要に応じて調整する必要があります。

インラインフリット：カラムの寿命を維持し詰まりを防ぐために、0.3 μm フリットのインラインフィルタ（部品番号 5067-6189）を使用すると、システムに沈殿物が蓄積するのを防げます。

シングル/デュアルカラム構成：サンプルのセットが小さい場合は通常、1 本のカラムで十分であり、分析時間はサンプルあたり約 16 分になります。しかしスループットを向上させる必要がある場合は、デュアルカラム設定により、2 本目のカラムでサンプルを分析しながらもう 1 本のカラムで再平衡化できるため、分析時間はサンプルあたり 13 分にできます。デュアルカラムセットアップの図を、表 4 の 2 本のカラムのクロマトグラフィー条件とともに図 2 に示します。

ピーク積分とデータ処理

以下は、ここで詳述した実験に使用したデータ処理プロトコルの要約です。このメソッドの手順ごとの詳細な説明については、関連資料をアジレントに請求してください。

クロマトグラフデータは、最初に Agilent MassHunter 定量分析 (QQQ 用) Ver 10.0 以降にインポートすると、処理するサンプルをそれぞれ含む新しいバッチファイルが作成されます。次に、取得したMRM データ関数から New メソッドを使用して、関連するすべての MRM トランジションを含むメソッドファイルが生成され、ISTD としてフラグが立てられた トランジションごとに濃度が入力されます (表 4)。デフォルトでは、ピークの見出しは agile2 インテグレータによって実行されますが、積分ウィンドウ内に複数のピークがあった場合は、

ユーザーは Spectrum Summation を使用して積分境界を手動で選択できます。ウェブサイト (<https://metabolomics.baker.edu.au/method/lipids>) には、すべての脂質種のアノテーション付きクロマトグラムが掲載されており、異性体/同重体が隣接して溶出する場合に積分すべき適切なピークを決定するためのガイダンスとして使用できます。アノテーションの例を図 4 に示します。単一の MRM トランジションに積分するピークが複数ある場合、トランジションを複製してメソッドエディタで名前を変更し、個別に積分できるようにできます。



図 4. ヒト血漿において積分する適切なピークの内部ライブラリを参照するウェブサイトの例

メソッドファイルをバッチファイルに適用した後、**Compounds-at-a-Glance** 関数を使用して選択したサンプルを視覚的に検査し、正しい積分範囲が選択されていることを確認できます。カラムの性能や溶媒の違いによりリテンションタイムが変化する可能性がある大規模なバッチの場合、積分範囲が固定されているため、Spectrum Summation はうまく行きません。この問題の例として、図 5 を参照してください。この問題は、Time Referencing (時

間参照) を使用することで解決できます。この方法では、指定された参照ピークに従って、各 MRM の Spectrum Summation に使用する定義済みの積分範囲を自動的に動かします (図 5)。Time Referencing の使用に関する詳細な手順、および大規模なコホートのバッチ調整に関するガイドについては、参考資料をアジレントにご請求ください。

MassHunter Quantitative Analysis 内で濃度を計算するために (Time Referencing を使用しないサンプルセット)、各トランジションに対して ISTD 化合物が定義されます (表 A2)。メソッドを適用し、バッチファイルが解析されると、すべてのサンプルに対して最終濃度が自動的に生成されます。

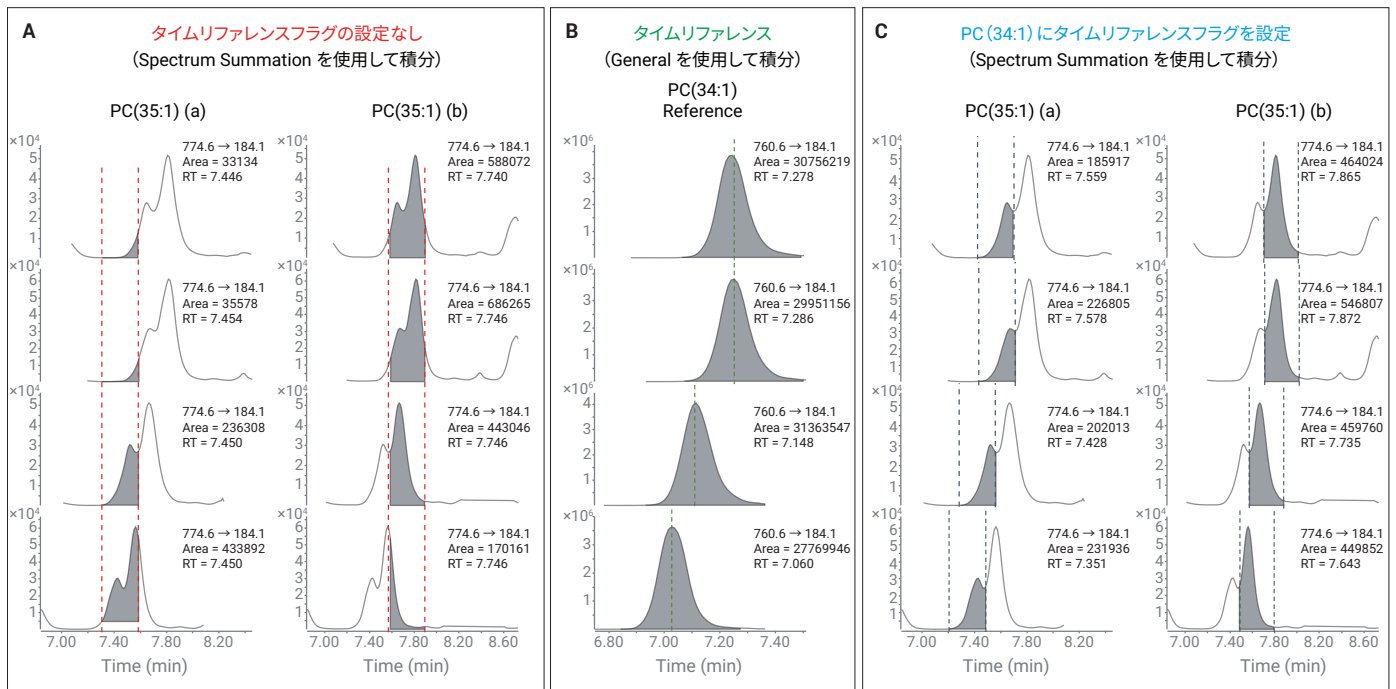


図 5. 積分が困難なピークを揃えるための Time Reference 化合物の使用例。(A) PC(35:1) の 2 つの異性体は別々に積分されますが、リテンションタイムのドリフトにより、スペクトル合計を使用した積分が不正確になります。(B) PC(34:1) は、その高アバンドンスとクリーンで対称的なピークにより、優れた参照化合物です。(C) Time Referencing を有効にし、リテンションタイムのドリフトを補正するための参照化合物として PC(34:1) を使用した後の PC(35:1) の積分

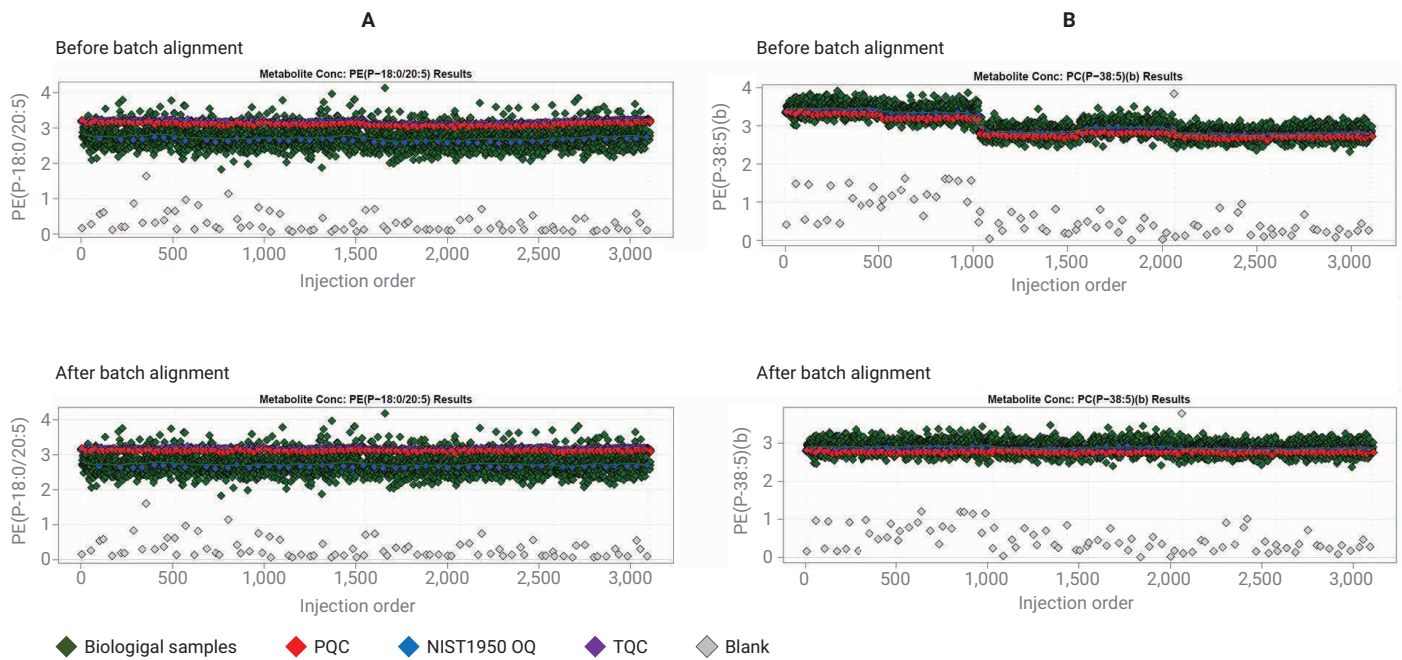


図 6. 複数のバッチにわたって PQC サンプルを使用して実行されたバッチアライメントの例。(A) アライメント後のばらつきが増加または変化がなく、バッチ間のばらつきをほとんど維持しない脂質の例。(B) 異なるバッチ間で有意なばらつきを示す脂質の例、およびアライメント後の改善。図はすべて、合計 2,500 の生物学的サンプル (X 軸) と log₂ スケールの脂質アブダンス (Y 軸) を含む 6 つのバッチを示しています。

結果と考察

本方法の再現性を調べるために、50 個の TQC を順次注入し (クロマトグラムの例については図 7 を参照)、ピーク面積と脂質濃度の双方の %CV を計算しました。生のピーク面積の平均および中央値の %CV は、763 の個々の種でそれぞれ 5.1 % と 4.1 % でした。各脂質濃度に対しては、平均と中央値の %CV はそれぞれ 5.6 % と 4.0 % でした。個々の脂質種ごとの個々の %CV を表 A2 に示します。これらの脂質に対しては、抽出と LC 分析の両方の段階で導入される溶媒と可塑剤に由来することが多いバックグラウンドを考慮する必要があります。表 A2 は、各脂質種のバックグラウンドレベルを、NIST1950 QC サンプルに存在するシグナルのパーセンテージとして示したものです。バックグラウンドは、585 種に対しては 1.0 % 未満です。20.0 % を超えたのは 28 種のみです。飽和脂肪酸鎖と数種類の非常に少量しか存在しない脂質種を持つ、遊離脂肪酸とジアシルグリセロールに特に注意を払う必要があります。

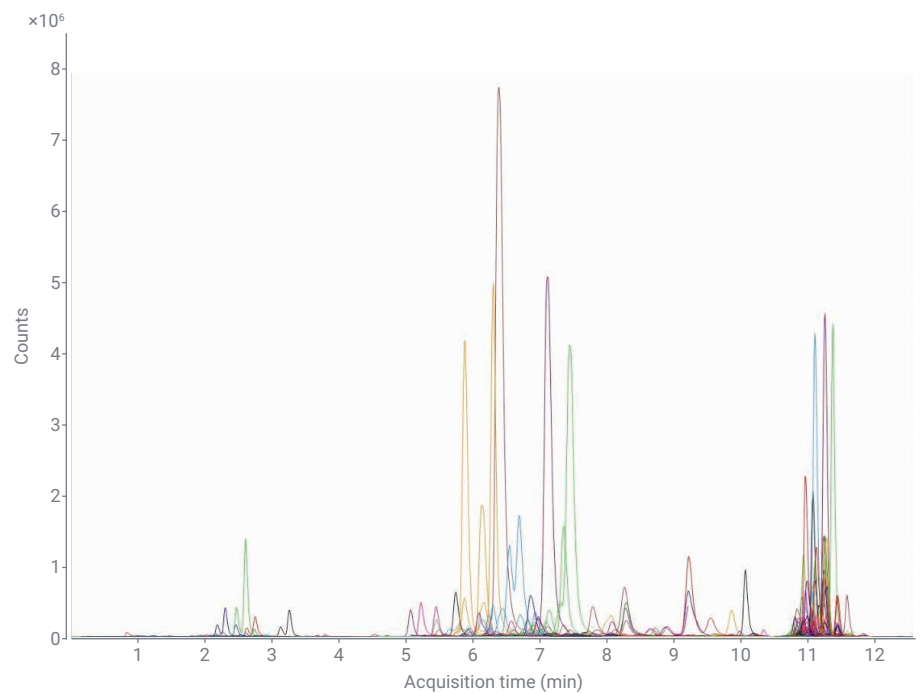


図 7. 本メソッドで測定された脂質の MRM クロマトグラムの重ね表示

この方法の堅牢性は、2,500 の血漿サンプルからなるコホートの分析を行うことでさらに実証されました。この分析は、それぞれ 417 個のサンプル、9 個の NIST1950 QC、23 個の PQC、14 個のブランク、および 25 個の TQC を含む 6 回のバッチにわたって実施しました。単一の代表的なバッチおよび、すべてのバッチで調整した脂質濃度の %CV の要約を表 7 に示します。品質管理サンプルごとに、ヒストグラムの CV% プロットを図 8 に示します。CV がしきい値内となった脂質の数が明確に示されています。品質管理サンプルでは、約 600 個の脂質の CV が 10 % 未満でした。次に、すべての QC とサンプルで主成分分析を実行し (図 9)、品質管理サンプルと比較した脂質の生物学的ばらつきを明らかにしました。

このアプリケーションノートでは、血漿サンプルまたは同等物内の 750 を超える異なる脂質種を測定するための堅牢で高度に精選された LC/MS/MS ベースのプロトコルについて詳しく説明しました。分析時間が短く、データの再現性が高く、複数のバッチ間または異なるラボ間でさえデータを調整できる機能を有するという特徴から、大規模なリポミクスデータセットの組み立てが可能となります。このようなデータは、脂質種と疾病の結果との関連を定義して、疾病の原因をよりよく理解しようとするのに不可欠です。

表 7. 個々のバッチ内および複数のバッチにわたる両方からの各 QC タイプの %CV

	NIST 1950 QC		PQC		TQC	
	平均値	中央値	平均値	中央値	平均値	中央値
単一バッチ (417 サンプル)	9.7	7.7	7.9	6.6	7.0	5.6
全バッチ (2,500 サンプル)	9.7	7.7	8.9	7.4	8.6	7.0

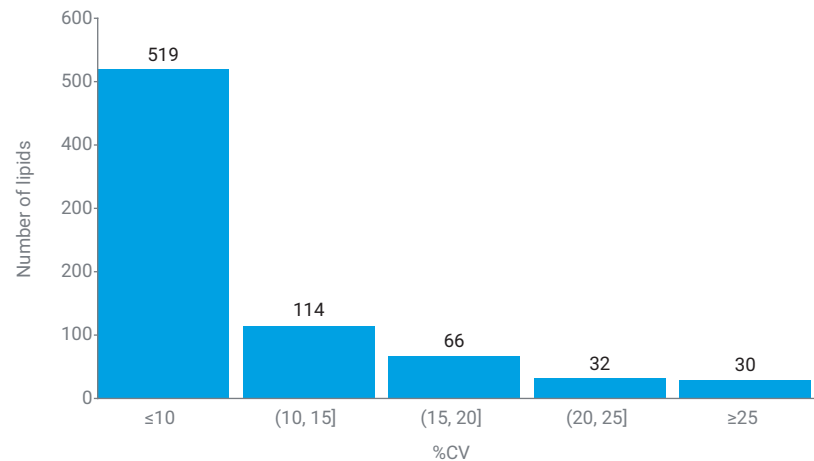


図 8. 単一バッチで測定されたさまざまな QC サンプルからの脂質の変動係数のヒストグラム

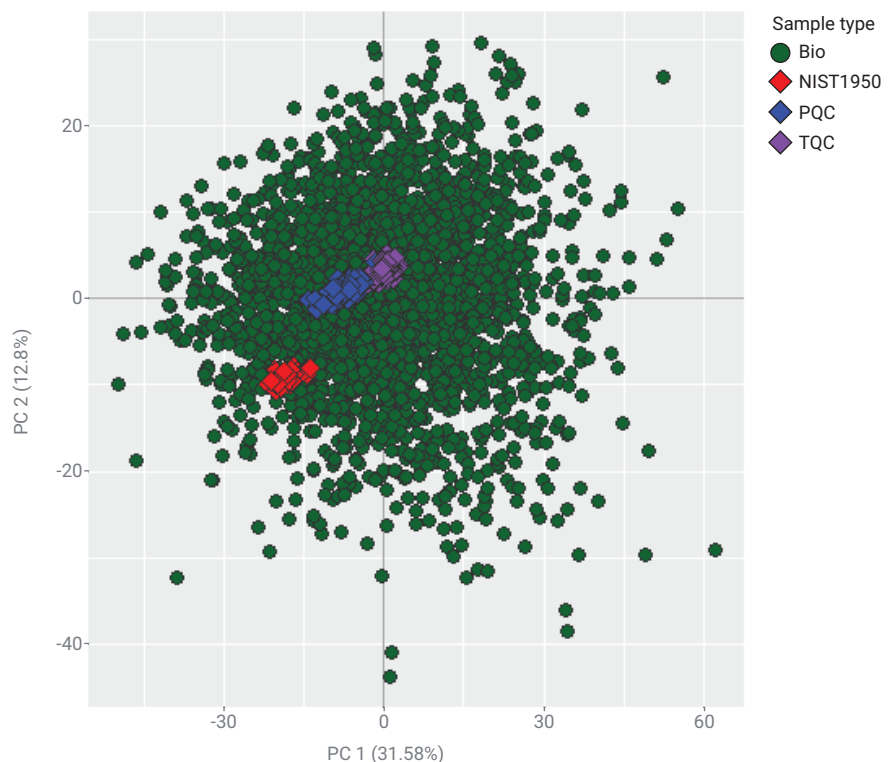


図 9. 2,500 の生物学的サンプルと関連するすべての QC サンプルのバッチから得られたリポミクスの PCA

このメソッドの1つの制限として、一部の異性体種の分離が不完全なままであり、分析時間の制約によって必然的に生じます。ただしこれらの制限には、直交実験や、さまざまな付加物またはイオン化モードの使用、クロマトグラフィ分析の拡張によって、対応可能であることに注意してください。その代わりとして、ユーザーは分析時間と特異性に関して妥協しなければなりません。

定量的なリポドミクスデータを取得するLC/MS/MSの機能は、この分野では依然として論争の対象となっています。実際、複数の要因がデータの定量精度に影響を及ぼします。特に、マトリックス効果や、抑制差、さまざまな脂質種で異なるイオン化効率などです。絶対定量の場合、標準と対象成分の同位体分布の違いも補正する必要があります。このような理由から、このメソッドは相対定量と呼ばれ、得られた値はサンプル間では比較可能ですが、必ずしもサンプルの絶対濃度とは限りません。多くの場合、研究ではグループ間（健常者と糖尿病患者）における関連性（つまり、年齢とともに変化する脂質代謝物）または倍数差のいずれかを特定することを目的としており、そこには合理性があります。これらのタイプの分析において絶対定量は、ここで得られた結果に新たな価値を追加することはありません。研究間の調整が必要な場合は（絶対定量によって恩恵を受けること）、NIST SRM 1950 などのここで説明した参照物質を使用した調整により、この問題は解決できます。

このプロトコルは広範囲の脂質代謝物を対象としており、各化合物に対して内部標準を提供することは不可能です。したがって、ほぼすべての脂質クラスに対して単一の内部標準を使用しました。このような制限があるにもかかわらず、このメソッドは、各脂質化合物の相対定量に関して良好な再現性と精度を実現しました。実際、多くの研究では、その目標は、サンプル間の脂質濃度の相対的な違いを特定すること、あるいは脂質種と、参加者の特性または集団研究の臨床転帰との関連性を明らかにすることです。このような場合、脂質種の絶対定量は、異なるプラットフォーム間で結果を調整する以外の目的にはあまり貢献しません。

研究間またはラボ間でデータを調整する必要がある場合、アジレントは、通常すべての実験に含まれるNIST SRM 1950 血漿 QC サンプルを利用します。このサンプルは複数のベンダーから簡単に入手でき、測定するすべての脂質に共通の参照点を提供します。したがって、脂質測定値が機器の直線ダイナミックレンジ内にある限り、NIST QC サンプルを使用して標準化と調整が可能です。

このプロトコルは、他の生物学的サンプルにも簡単に適用できます。ただし、組織リポドミクス間に存在する可能性がある違いを考えると、上記のアプローチを使用して、新しい組織タイプに対して組織固有のアノテーションを付けることが推奨されます。組織特異的なアノテーションがない場合は、他のマトリックスを調べるときに、アノテーションを合計組成レベル（例えば、PC (36:2) (a) および (b)）に戻すことをお勧めします。組織特異的なアノテーションには、血漿または記載された方法には存在しない、ミトコンドリアにのみ見られる脂質であるカルジオリピンなどの組織特異的脂質を組み入れることができます。特にハイスループットが必要とされない小規模な研究の場合、より長くより浅いグラジエントを用いると脂質分離（異性体および同重体種を含む）がさらに改善されるため、クロマトグラフィにさらに適応させることができます。その結果、潜在的により多くの脂質異性体分離が可能となり、共溶出種からのシグナル抑制が低減され、トランジションあたりのドウェルタイムがさらに改善されます。

参考文献

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

付録

表 A1. すべての dMRM トランジションの Agilent MassHunter Acquisition の詳細¹

化合物 番号	化合物 グループ	化合物名	ISTD?	プリカーサ イオン	MS1 Res	プロダクト イオン	MS2 Res	リテンション タイム (分)	デルタ RT	Frag.	コリジョン エネルギー	セル加速 電圧	極性
1	AcylCarn	AC(10:0)	FALSE	316.3	Unit	85.1	Unit	0.9	0.6	166	30	5	Positive
2	AcylCarn	AC(12:0)	FALSE	344.3	Unit	85.1	Unit	1.2	0.6	166	30	5	Positive
3	AcylCarn	AC(12:1)	FALSE	342.3	Unit	85.1	Unit	1.0	0.6	166	30	5	Positive
4	AcylCarn	AC(13:0)	FALSE	358.3	Unit	85.1	Unit	1.4	0.6	166	30	5	Positive
5	AcylCarn	AC(14:0)	FALSE	372.3	Unit	85.1	Unit	1.8	0.6	166	30	5	Positive
6	AcylCarn	AC(14:0)-OH	FALSE	388.3	Unit	85.1	Unit	1.4	0.6	166	30	5	Positive
7	AcylCarn	AC(14:1)	FALSE	370.3	Unit	85.1	Unit	1.5	0.6	166	30	5	Positive
8	AcylCarn	AC(14:1)-OH	FALSE	386.3	Unit	85.1	Unit	1.1	0.6	166	30	5	Positive
9	AcylCarn	AC(14:2)	FALSE	368.3	Unit	85.1	Unit	1.2	0.6	166	30	5	Positive
10	AcylCarn	AC(15:0) (a\b)	FALSE	386.3	Unit	85.1	Unit	2.1	1	166	30	5	Positive
11	AcylCarn	AC(16:0)	FALSE	400.4	Unit	85.1	Unit	2.5	0.6	166	30	5	Positive
12	AcylCarn	AC(16:0)-OH	FALSE	416.4	Unit	85.1	Unit	2.0	0.6	166	30	5	Positive
13	AcylCarn	AcylCarnitine 16:0 d3 (IS)	TRUE	403.4	Unit	85.1	Unit	2.5	0.6	166	30	5	Positive
14	AcylCarn	AC(16:1)	FALSE	398.3	Unit	85.1	Unit	2.0	0.6	166	30	5	Positive
15	AcylCarn	AC(16:1)-OH	FALSE	414.3	Unit	85.1	Unit	1.6	0.6	166	30	5	Positive
16	AcylCarn	AC(17:0) (a\b)	FALSE	414.4	Unit	85.1	Unit	2.8	0.6	166	30	5	Positive
17	AcylCarn	AC(18:0)	FALSE	428.4	Unit	85.1	Unit	3.2	0.6	166	30	5	Positive
18	AcylCarn	AC(18:0)-OH	FALSE	444.4	Unit	85.1	Unit	2.7	0.6	166	30	5	Positive
19	AcylCarn	AC(18:1)	FALSE	426.4	Unit	85.1	Unit	2.7	0.6	166	30	5	Positive
20	AcylCarn	AC(18:1)-OH	FALSE	442.4	Unit	85.1	Unit	2.2	0.6	166	30	5	Positive
21	AcylCarn	AC(18:2)	FALSE	424.3	Unit	85.1	Unit	2.2	0.6	166	30	5	Positive
22	AcylCarn	AC(18:3)	FALSE	422.3	Unit	85.1	Unit	1.9	0.6	166	30	5	Positive
23	AcylCarn	AC(20:3) (a\b)	FALSE	450.3	Unit	85.1	Unit	2.5	0.6	166	30	5	Positive
24	AcylCarn	AC(20:3)-OH	FALSE	466.3	Unit	85.1	Unit	2.1	0.6	166	30	5	Positive
25	AcylCarn	AC(20:4)	FALSE	448.3	Unit	85.1	Unit	2.2	0.6	166	30	5	Positive
26	AcylCarn	AC(20:5)	FALSE	446.3	Unit	85.1	Unit	1.8	0.6	166	30	5	Positive
27	AcylCarn	AC(22:5)	FALSE	474.3	Unit	85.1	Unit	2.3	0.6	166	30	5	Positive
28	AcylCarn	AC(22:5)-OH	FALSE	490.3	Unit	85.1	Unit	2.0	0.6	166	30	5	Positive
29	AcylCarn	AC(22:6)	FALSE	472.3	Unit	85.1	Unit	2.2	0.6	166	30	5	Positive
30	AcylCarn	AC(24:0)	FALSE	512.3	Unit	85.1	Unit	5.0	0.6	166	30	5	Positive
31	AcylCarn	AC(24:1) (a\b)	FALSE	510.3	Unit	85.1	Unit	4.4	0.6	166	30	5	Positive
32	AcylCarn	AC(26:0)	FALSE	540.3	Unit	85.1	Unit	5.9	0.6	166	30	5	Positive
33	AcylCarn	AC(26:1)	FALSE	538.3	Unit	85.1	Unit	5.0	0.6	166	30	5	Positive
34	CE	CE(14:0)	FALSE	614.6	Unit	369.3	Unit	11.6	0.4	166	10	5	Positive
35	CE	CE(15:0)	FALSE	628.6	Unit	369.3	Unit	11.7	0.4	166	10	5	Positive
36	CE	CE(16:0)	FALSE	642.6	Unit	369.3	Unit	11.8	0.4	166	10	5	Positive
37	CE	CE(16:1)	FALSE	640.6	Unit	369.3	Unit	11.6	0.4	166	10	5	Positive
38	CE	CE(16:2)	FALSE	638.6	Unit	369.3	Unit	11.4	0.4	166	10	5	Positive
39	CE	CE(17:0)	FALSE	656.6	Unit	369.3	Unit	11.9	0.4	166	10	5	Positive
40	CE	CE(17:1)	FALSE	654.6	Unit	369.3	Unit	11.7	0.4	166	10	5	Positive
41	CE	CE(18:0)	FALSE	670.7	Unit	369.3	Unit	12.1	0.4	166	10	5	Positive
42	CE	CE 18:0-d6 (IS)	TRUE	676.7	Unit	375.3	Unit	12.0	0.4	166	10	5	Positive

化合物 番号	化合物 グループ	化合物名	ISTD?	プリカーサ イオン	MS1 Res	プロダクト イオン	MS2 Res	リテンション タイム (分)	デルタ RT	Frag.	コリジョン エネルギー	セル加速 電圧	極性
43	CE	CE(18:1)	FALSE	668.6	Unit	369.3	Unit	11.8	0.4	166	10	5	Positive
44	CE	CE(18:2)	FALSE	666.6	Unit	369.3	Unit	11.6	0.4	166	10	5	Positive
45	oxLipid	CE(18:2) [+OH]	FALSE	682.6	Unit	369.3	Unit	10.9	0.6	166	10	5	Positive
46	CE	CE(18:3)	FALSE	664.6	Unit	369.3	Unit	11.4	0.4	166	10	5	Positive
47	CE	CE(20:0)	FALSE	698.7	Unit	369.3	Unit	12.2	0.6	166	10	5	Positive
48	CE	CE(20:1)	FALSE	696.7	Unit	369.3	Unit	12.0	0.4	166	10	5	Positive
49	CE	CE(20:2)	FALSE	694.7	Unit	369.3	Unit	11.8	0.4	166	10	5	Positive
50	CE	CE(20:3)	FALSE	692.6	Unit	369.3	Unit	11.7	0.4	166	10	5	Positive
51	CE	CE(20:4)	FALSE	690.6	Unit	369.3	Unit	11.5	0.4	166	10	5	Positive
52	oxLipid	CE(20:4) [+OH]	FALSE	706.6	Unit	369.3	Unit	10.9	0.6	166	10	5	Positive
53	CE	CE(20:5)	FALSE	688.6	Unit	369.3	Unit	11.3	0.4	166	10	5	Positive
54	CE	CE(22:0)	FALSE	726.7	Unit	369.3	Unit	12.4	0.6	166	10	5	Positive
55	CE	CE(22:1)	FALSE	724.7	Unit	369.3	Unit	12.2	0.4	166	10	5	Positive
56	CE	CE(22:4)	FALSE	718.7	Unit	369.3	Unit	11.7	0.4	166	10	5	Positive
57	CE	CE(22:5)	FALSE	716.6	Unit	369.3	Unit	11.5	1	166	10	5	Positive
58	CE	CE(22:6)	FALSE	714.6	Unit	369.3	Unit	11.4	0.4	166	10	5	Positive
59	CE	CE(24:0)	FALSE	754.7	Unit	369.3	Unit	12.6	0.4	166	10	5	Positive
60	CE	CE(24:1)	FALSE	752.7	Unit	369.3	Unit	12.4	0.4	166	10	5	Positive
61	CE	CE(24:4)	FALSE	746.7	Unit	369.3	Unit	11.9	0.4	166	10	5	Positive
62	CE	CE(24:5)	FALSE	744.7	Unit	369.3	Unit	11.7	0.4	166	10	5	Positive
63	CE	CE(24:6)	FALSE	742.7	Unit	369.3	Unit	11.5	0.4	166	10	5	Positive
64	Cer1P	Cer1P(d18:1/16:0)	FALSE	618.424	Unit	264.3	Unit	5.5	0.6	166	29	4	Positive
65	Cer	Cer(d16:1/16:0)	FALSE	510.6	Unit	236.3	Unit	6.7	0.5	166	25	5	Positive
66	Cer	Cer(d16:1/18:0)	FALSE	538.6	Unit	236.3	Unit	7.8	0.5	166	25	5	Positive
67	Cer	Cer(d16:1/20:0)	FALSE	566.6	Unit	236.3	Unit	9.1	0.5	166	25	5	Positive
68	Cer	Cer(d16:1/22:0)	FALSE	594.6	Unit	236.3	Unit	10.1	0.5	166	25	5	Positive
69	Cer	Cer(d16:1/23:0)	FALSE	608.6	Unit	236.3	Unit	10.2	0.5	166	25	5	Positive
70	Cer	Cer(d16:1/24:0)	FALSE	622.6	Unit	236.3	Unit	10.3	0.5	166	25	5	Positive
71	Cer	Cer(d16:1/24:1)	FALSE	620.6	Unit	236.3	Unit	10.1	0.5	166	25	5	Positive
72	Cer	Cer(d17:1/16:0)	FALSE	524.6	Unit	250.3	Unit	7.2	0.5	166	25	5	Positive
73	Cer	Cer(d17:1/18:0)	FALSE	552.6	Unit	250.3	Unit	8.4	0.5	166	25	5	Positive
74	Cer	Cer(d17:1/20:0)	FALSE	580.6	Unit	250.3	Unit	9.7	0.5	166	25	5	Positive
75	Cer	Cer(d17:1/22:0)	FALSE	608.6	Unit	250.3	Unit	10.2	0.5	166	25	5	Positive
76	Cer	Cer(d17:1/23:0)	FALSE	622.6	Unit	250.3	Unit	10.3	0.5	166	25	5	Positive
77	Cer	Cer(d17:1/24:0)	FALSE	636.6	Unit	250.3	Unit	10.4	0.5	166	25	5	Positive
78	Cer	Cer(d17:1/24:1)	FALSE	634.6	Unit	250.3	Unit	10.2	0.5	166	25	5	Positive
79	Cer	Cer(d18:1/16:0)	FALSE	538.5	Unit	264.3	Unit	7.8	0.7	166	25	5	Positive
80	Cer	Cer(d18:1/18:0)	FALSE	566.6	Unit	264.3	Unit	9.0	0.7	166	25	5	Positive
81	Cer	Cer(d18:1/20:0)	FALSE	594.6	Unit	264.3	Unit	10.1	0.7	166	25	5	Positive
82	Cer	Cer(d18:1/21:0)	FALSE	608.6	Unit	264.3	Unit	10.2	0.7	166	25	5	Positive
83	Cer	Cer(d18:1/22:0)	FALSE	622.6	Unit	264.3	Unit	10.3	0.7	166	25	5	Positive
84	Cer	Cer(d18:1/23:0)	FALSE	636.6	Unit	264.3	Unit	10.4	0.7	166	25	5	Positive
85	Cer	Cer(d18:1/24:0)	FALSE	650.6	Unit	264.3	Unit	10.5	0.7	166	25	5	Positive
86	Cer	Cer(d18:1/24:1)	FALSE	648.6	Unit	264.3	Unit	10.3	0.7	166	25	5	Positive
87	Cer	Cer(d18:1/26:0)	FALSE	678.6	Unit	264.3	Unit	10.7	0.7	166	25	5	Positive
88	Cer	Cer(d18:1-d7/18:0) (IS)	TRUE	573.6	Unit	271.4	Unit	9.0	1	166	25	5	Positive

化合物 番号	化合物 グループ	化合物名	ISTD?	プリカーサ イオン	MS1 Res	プロダクト イオン	MS2 Res	リテンション タイム (分)	デルタ RT	Frag.	コリジョン エネルギー	セル加速 電圧	極性
89	Cer	Cer(d18:2/16:0)	FALSE	536.5	Unit	262.3	Unit	6.9	0.7	166	25	5	Positive
90	Cer	Cer(d18:2/18:0)	FALSE	564.6	Unit	262.3	Unit	8.1	0.7	166	25	5	Positive
91	Cer	Cer(d18:2/20:0)	FALSE	592.6	Unit	262.3	Unit	9.3	0.5	166	25	5	Positive
92	Cer	Cer(d18:2/22:0)	FALSE	620.6	Unit	262.3	Unit	10.1	0.5	166	25	5	Positive
93	Cer	Cer(d18:2/23:0)	FALSE	634.6	Unit	262.3	Unit	10.2	0.5	166	25	5	Positive
94	Cer	Cer(d18:2/24:0)	FALSE	648.6	Unit	262.3	Unit	10.4	0.5	166	25	5	Positive
95	Cer	Cer(d18:2/24:1)	FALSE	646.6	Unit	262.3	Unit	10.1	0.5	166	25	5	Positive
96	Cer	Cer(d18:2/26:0)	FALSE	676.6	Unit	262.3	Unit	10.5	0.5	166	25	5	Positive
97	Cer	Cer(d19:1/18:0)	FALSE	580.6	Unit	278.3	Unit	9.4	0.5	166	25	5	Positive
98	Cer	Cer(d19:1/20:0)	FALSE	608.6	Unit	278.3	Unit	10.1	0.5	166	25	5	Positive
99	Cer	Cer(d19:1/22:0)	FALSE	636.6	Unit	278.3	Unit	10.4	0.5	166	25	5	Positive
100	Cer	Cer(d19:1/23:0)	FALSE	650.6	Unit	278.3	Unit	10.5	0.5	166	25	5	Positive
101	Cer	Cer(d19:1/24:0)	FALSE	664.6	Unit	278.3	Unit	10.5	0.5	166	25	5	Positive
102	Cer	Cer(d19:1/24:1)	FALSE	662.6	Unit	278.3	Unit	10.4	0.5	166	25	5	Positive
103	Cer	Cer(d20:1/22:0)	FALSE	650.6	Unit	292.3	Unit	10.5	0.5	166	25	5	Positive
104	Cer	Cer(d20:1/23:0)	FALSE	664.6	Unit	292.3	Unit	10.6	0.5	166	25	5	Positive
105	Cer	Cer(d20:1/24:0)	FALSE	678.6	Unit	292.3	Unit	10.7	0.5	166	25	5	Positive
106	Cer	Cer(d20:1/24:1)	FALSE	676.6	Unit	292.3	Unit	10.5	0.5	166	25	5	Positive
107	m18:0	Cer(m18:0/20:0)	FALSE	580.6	Unit	268.4	Unit	10.3	0.6	166	35	5	Positive
108	m18:0	Cer(m18:0/22:0)	FALSE	608.6	Unit	268.4	Unit	10.5	0.6	166	35	5	Positive
109	m18:0	Cer(m18:0/23:0)	FALSE	622.6	Unit	268.4	Unit	10.6	0.6	166	35	5	Positive
110	m18:0	Cer(m18:0/24:0)	FALSE	636.6	Unit	268.4	Unit	10.7	0.6	166	35	5	Positive
111	m18:0	Cer(m18:0/24:1)	FALSE	634.6	Unit	268.4	Unit	10.5	0.6	166	35	5	Positive
112	m18:1	Cer(m18:1/18:0)	FALSE	550.6	Unit	266.4	Unit	9.3	0.6	166	35	5	Positive
113	m18:1	Cer(m18:1/20:0)	FALSE	578.6	Unit	266.4	Unit	10.1	0.6	166	35	5	Positive
114	m18:1	Cer(m18:1/22:0)	FALSE	606.6	Unit	266.4	Unit	10.3	0.6	166	35	5	Positive
115	m18:1	Cer(m18:1/23:0)	FALSE	620.6	Unit	266.4	Unit	10.4	0.6	166	35	5	Positive
116	m18:1	Cer(m18:1/24:0)	FALSE	634.6	Unit	266.4	Unit	10.5	0.6	166	35	5	Positive
117	m18:1	Cer(m18:1/24:1)	FALSE	632.6	Unit	266.4	Unit	10.4	0.6	166	35	5	Positive
118	Bile Acids	CA	FALSE	426.3	Unit	355.3	Unit	1.0	2	166	19	4	Positive
119	Bile Acids	Cholic Acid d4 (IS)	TRUE	430.3	Unit	359.3	Unit	1.0	1	166	19	4	Positive
120	COH	COH	FALSE	369.4	Unit	161.2	Unit	6.4	0.6	166	19	5	Positive
121	COH	COH-d7 (IS)	TRUE	376.4	Unit	161.2	Unit	6.4	0.6	166	19	5	Positive
122	DE	DE(16:0)	FALSE	640.6	Unit	367.4	Unit	11.6	0.6	166	10	4	Positive
123	DE	DE(18:1)	FALSE	666.6	Unit	367.4	Unit	11.6	0.6	166	10	4	Positive
124	DE	DE(18:1) ester d6 (IS)	TRUE	672.6	Unit	373.4	Unit	11.6	0.6	166	10	4	Positive
125	DE	DE(18:2)	FALSE	664.6	Unit	367.4	Unit	11.4	0.6	166	10	4	Positive
126	DE	DE(20:4)	FALSE	688.6	Unit	367.4	Unit	11.3	0.6	166	10	4	Positive
127	Bile Acids	dxCA	FALSE	410.3	Unit	357.3	Unit	1.6	2	166	15	5	Positive
128	DG	DG(15:0 18:1) d7 (IS)	TRUE	605.5	Unit	299.5	Unit	9.6	1	166	25	4	Positive
129	DG	DG(14:0_16:0)	FALSE	558.5	Unit	313.3	Unit	8.8	1.4	166	25	5	Positive
130	DG	DG(16:0_16:0)	FALSE	586.5	Unit	313.2	Unit	10.1	1.4	166	25	5	Positive
131	DG	DG(16:0_16:1)	FALSE	584.5	Unit	313.2	Unit	9.1	1.4	166	25	5	Positive
132	DG	DG(14:0_18:2)	FALSE	582.5	Unit	285.2	Unit	8.1	1.4	166	25	5	Positive
133	DG	DG(16:0_18:1)	FALSE	612.6	Unit	313.3	Unit	10.0	1.4	166	25	5	Positive
134	DG	DG(16:1_18:1)	FALSE	610.5	Unit	339.2	Unit	9.3	1.4	166	25	5	Positive

化合物 番号	化合物 グループ	化合物名	ISTD?	プリカーサ イオン	MS1 Res	プロダクト イオン	MS2 Res	リテンション タイム (分)	デルタ RT	Frag.	コリジョン エネルギー	セル加速 電圧	極性
135	DG	DG(16:0_18:2)	FALSE	610.5	Unit	313.2	Unit	9.4	1.4	166	25	5	Positive
136	DG	DG(18:0_18:1)	FALSE	640.6	Unit	341.3	Unit	10.2	1.4	166	25	5	Positive
137	DG	DG(18:1_18:1)	FALSE	638.6	Unit	339.3	Unit	10.1	1.4	166	25	5	Positive
138	DG	DG(18:0_18:2)	FALSE	638.6	Unit	341.3	Unit	10.1	1.4	166	25	5	Positive
139	DG	DG(18:1_18:2)	FALSE	636.6	Unit	339.3	Unit	9.6	1.4	166	25	5	Positive
140	DG	DG(18:2_18:2)	FALSE	634.5	Unit	337.2	Unit	8.7	1.4	166	25	5	Positive
141	DG	DG(18:1_18:3)	FALSE	634.5	Unit	339.2	Unit	8.8	1.4	166	25	5	Positive
142	DG	DG(16:0_20:4)	FALSE	634.5	Unit	313.2	Unit	9.2	1.4	166	25	5	Positive
143	DG	DG(18:1_20:3)	FALSE	662.6	Unit	339.3	Unit	10.0	1.4	166	25	5	Positive
144	DG	DG(18:0_20:4)	FALSE	662.6	Unit	341.3	Unit	10.1	1.4	166	25	5	Positive
145	DG	DG(18:1_20:4)	FALSE	660.6	Unit	339.3	Unit	9.4	1.4	166	25	5	Positive
146	DG	DG(16:0_22:5)	FALSE	660.6	Unit	313.3	Unit	9.3	1.4	166	25	5	Positive
147	DG	DG(18:2_20:4)	FALSE	658.5	Unit	337.2	Unit	8.5	1.4	166	25	5	Positive
148	DG	DG(16:0_22:6)	FALSE	658.5	Unit	313.2	Unit	8.9	1.4	166	25	5	Positive
149	DG	DG(18:1_20:5)	FALSE	658.6	Unit	339.3	Unit	8.6	1.4	166	25	5	Positive
150	DG	DG(18:1_22:5)	FALSE	686.6	Unit	339.3	Unit	9.8	1.6	166	25	5	Positive
151	DG	DG(18:1_22:6)	FALSE	684.6	Unit	339.3	Unit	9.1	1.4	166	25	5	Positive
152	DG	DG(18:2_22:6)	FALSE	682.6	Unit	337.3	Unit	8.2	1.4	166	25	5	Positive
153	dhCer	dhCer(d18:0/16:0)	FALSE	540.5	Unit	284.3	Unit	8.3	0.6	166	27	4	Positive
154	dhCer	dhCer(d18:0/18:0)	FALSE	568.6	Unit	284.3	Unit	9.8	0.8	166	27	4	Positive
155	dhCer	dhCer(d18:0/20:0)	FALSE	596.6	Unit	284.3	Unit	10.2	0.8	166	27	4	Positive
156	dhCer	dhCer(d18:0/22:0)	FALSE	624.6	Unit	284.3	Unit	10.4	0.8	166	27	4	Positive
157	dhCer	dhCer(d18:0/24:0)	FALSE	652.7	Unit	284.3	Unit	10.6	0.8	166	27	4	Positive
158	dhCer	dhCer(d18:0/24:1)	FALSE	650.6	Unit	284.3	Unit	10.4	0.8	166	27	4	Positive
159	dhCer	dhCer 8:0 (IS)	TRUE	428.4	Unit	284.3	Unit	4.6	0.8	166	27	4	Positive
160	dimethyl-CE	dimethyl-CE(18:1)	FALSE	696.6	Unit	397.3	Unit	12.0	0.4	166	10	4	Positive
161	dimethyl-CE	dimethyl-CE(18:2)	FALSE	694.6	Unit	397.3	Unit	11.8	0.4	166	10	4	Positive
162	dimethyl-CE	dimethyl-CE(20:4)	FALSE	718.6	Unit	397.3	Unit	11.7	0.4	166	10	4	Positive
163	FFA	FA(14:0)	FALSE	227.2	Unit	227.2	Unit	3.1	2	166	0	4	Negative
164	FFA	FA(16:0)	FALSE	255.2	Unit	255.2	Unit	3.8	2	166	0	4	Negative
165	FFA	FA(16:1)	FALSE	253.2	Unit	253.2	Unit	3.3	2	166	0	4	Negative
166	FFA	FA(17:0)	FALSE	269.3	Unit	269.2	Unit	4.1	2	166	0	4	Negative
167	FFA	FA(17:1)	FALSE	267.2	Unit	267.2	Unit	3.6	2	166	0	4	Negative
168	FFA	FA(18:0)	FALSE	283.3	Unit	283.3	Unit	4.4	2	166	0	4	Negative
169	FFA	FA(18:1)	FALSE	281.3	Unit	281.2	Unit	3.9	2	166	0	4	Negative
170	FFA	FA(18:1) d9 (IS)	TRUE	290.3	Unit	290.2	Unit	3.9	2	166	0	4	Negative
171	FFA	FA(18:2)	FALSE	279.2	Unit	279.2	Unit	3.5	2	166	0	4	Negative
172	FFA	FA(18:3)	FALSE	277.2	Unit	277.2	Unit	3.1	2	166	0	4	Negative
173	FFA	FA(20:2)	FALSE	307.3	Unit	307.3	Unit	4.1	2	166	0	4	Negative
174	FFA	FA(20:3)	FALSE	305.3	Unit	305.2	Unit	3.8	2	166	0	4	Negative
175	FFA	FA(20:4)	FALSE	303.2	Unit	303.2	Unit	3.4	2	166	0	4	Negative
176	FFA	FA(20:4) d11 (IS)	TRUE	314.2	Unit	314.2	Unit	3.4	1	166	0	4	Negative
177	FFA	FA(20:5)	FALSE	301.2	Unit	301.2	Unit	3.0	2	166	0	4	Negative
178	FFA	FA(22:4)	FALSE	331.3	Unit	331.3	Unit	3.9	2	166	0	4	Negative
179	FFA	FA(22:5)	FALSE	329.3	Unit	329.2	Unit	3.6	2	166	0	4	Negative
180	FFA	FA(22:6) d5 (IS)	TRUE	332.2	Unit	332.2	Unit	3.2	1	166	0	4	Negative

化合物 番号	化合物 グループ	化合物名	ISTD?	プリカーサ イオン	MS1 Res	プロダクト イオン	MS2 Res	リテンション タイム (分)	デルタ RT	Frag.	コリジョン エネルギー	セル加速 電圧	極性
181	FFA	FA(22:6)	FALSE	327.2	Unit	327.2	Unit	3.3	2	166	0	4	Negative
182	GM3	GM3(d18:1/16:0)	FALSE	1153.7	Unit	264.3	Unit	4.9	1	166	61	5	Positive
183	GM3	GM3(d18:1/18:0)	FALSE	1181.8	Unit	264.3	Unit	5.6	1	166	61	5	Positive
184	GM3	GM3(d18:1/20:0)	FALSE	1209.8	Unit	264.3	Unit	6.5	1	166	61	5	Positive
185	GM3	GM3(d18:1/22:0)	FALSE	1237.8	Unit	264.3	Unit	7.5	1	166	61	5	Positive
186	GM3	GM3(d18:1/24:0)	FALSE	1265.8	Unit	264.3	Unit	8.5	1	166	61	5	Positive
187	GM3	GM3(d18:1/24:1)	FALSE	1263.8	Unit	264.3	Unit	7.5	1	166	61	5	Positive
188	HexCer	HexCer(d16:1/18:0)	FALSE	700.6	Unit	236.3	Unit	6.6	0.5	166	35	5	Positive
189	HexCer	HexCer(d16:1/20:0)	FALSE	728.6	Unit	236.3	Unit	7.7	0.5	166	35	5	Positive
190	HexCer	HexCer(d16:1/22:0)	FALSE	756.7	Unit	236.3	Unit	8.9	0.5	166	35	5	Positive
191	HexCer	HexCer(d16:1/24:0)	FALSE	784.7	Unit	236.3	Unit	10.0	0.5	166	35	5	Positive
192	HexCer	HexCer(d18:1/16:0)	FALSE	700.6	Unit	264.3	Unit	6.6	0.6	166	35	5	Positive
193	HexCer	HexCer(d18:1/18:0)	FALSE	728.6	Unit	264.3	Unit	7.6	0.6	166	35	5	Positive
194	HexCer	HexCer(d18:1/20:0)	FALSE	756.6	Unit	264.3	Unit	8.8	0.6	166	35	5	Positive
195	HexCer	HexCer(d18:1/22:0)	FALSE	784.7	Unit	264.3	Unit	10.0	0.6	166	35	5	Positive
196	HexCer	HexCer(d18:1/24:0)	FALSE	812.7	Unit	264.3	Unit	10.2	0.6	166	35	5	Positive
197	HexCer	HexCer(d18:1/24:1)	FALSE	810.7	Unit	264.3	Unit	10.0	0.6	166	35	5	Positive
198	HexCer	HexCer(d18:2/20:0)	FALSE	754.6	Unit	262.3	Unit	7.9	0.5	166	35	5	Positive
199	HexCer	HexCer(d18:2/22:0)	FALSE	782.7	Unit	262.3	Unit	9.0	0.5	166	35	5	Positive
200	HexCer	HexCer(d18:2/24:0)	FALSE	810.7	Unit	262.3	Unit	10.1	0.5	166	35	5	Positive
201	Hex2Cer	Hex2Cer(d16:1/16:0)	FALSE	834.6	Unit	236.3	Unit	5.2	0.5	166	49	5	Positive
202	Hex2Cer	Hex2Cer(d16:1/24:1)	FALSE	944.7	Unit	236.3	Unit	8.2	0.5	166	49	5	Positive
203	Hex2Cer	Hex2Cer(d18:1/15:0) d7 (IS)	TRUE	855.6	Unit	271.3	Unit	5.6	1	166	49	5	Positive
204	Hex2Cer	Hex2Cer(d18:1/16:0)	FALSE	862.6	Unit	264.3	Unit	6.1	0.6	166	49	5	Positive
205	Hex2Cer	Hex2Cer(d18:1/20:0)	FALSE	918.7	Unit	264.3	Unit	8.1	0.6	166	49	5	Positive
206	Hex2Cer	Hex2Cer(d18:1/22:0)	FALSE	946.7	Unit	264.3	Unit	9.3	0.6	166	49	5	Positive
207	Hex2Cer	Hex2Cer(d18:1/24:0)	FALSE	974.8	Unit	264.3	Unit	10.1	0.6	166	49	5	Positive
208	Hex2Cer	Hex2Cer(d18:1/24:1)	FALSE	972.7	Unit	264.3	Unit	9.3	0.6	166	49	5	Positive
209	Hex2Cer	Hex2Cer(d18:2/16:0)	FALSE	860.6	Unit	262.3	Unit	5.4	0.5	166	49	5	Positive
210	Hex2Cer	Hex2Cer(d18:2/24:1)	FALSE	970.7	Unit	262.3	Unit	8.4	0.5	166	49	5	Positive
211	Hex3Cer	Hex3Cer(d18:1/16:0)	FALSE	1024.7	Unit	264.3	Unit	5.7	0.5	166	61	5	Positive
212	Hex3Cer	Hex3Cer(d18:1/17:0) (IS)	TRUE	1038.7	Unit	264.3	Unit	6.2	0.5	166	61	5	Positive
213	Hex3Cer	Hex3Cer(d18:1/18:0)	FALSE	1052.7	Unit	264.3	Unit	6.6	0.5	166	61	5	Positive
214	Hex3Cer	Hex3Cer(d18:1/22:0)	FALSE	1108.8	Unit	264.3	Unit	8.8	0.5	166	61	5	Positive
215	Hex3Cer	Hex3Cer(d18:1/24:0)	FALSE	1136.8	Unit	264.3	Unit	10.0	0.7	166	61	5	Positive
216	Hex3Cer	Hex3Cer(d18:1/24:1)	FALSE	1134.8	Unit	264.3	Unit	8.8	0.5	166	61	5	Positive
217	Hex2Cer	HexCer(d18:1/15:0) d7 (IS)	TRUE	693.6	Unit	271.3	Unit	6.1	1	166	35	5	Positive
218	LPC	LPC(14:0) (ab)	FALSE	468.3	Unit	184.1	Unit	1.9	1	166	21	5	Positive
219	LPC	LPC(15:0) (ab)	FALSE	482.3	Unit	184.1	Unit	2.3	1	166	21	5	Positive
220	LPC	LPC(16:0) (ab)	FALSE	496.3	Unit	184.1	Unit	2.6	1	166	21	5	Positive
221	LPC	LPC(16:1) (ab)	FALSE	494.3	Unit	184.1	Unit	2.1	1	166	21	5	Positive
222	LPC	LPC(17:0) [sn1]	FALSE	510.4	Unit	184.1	Unit	2.9	1	166	21	5	Positive
223	LPC	LPC(17:1) (a\b\c)	FALSE	508.4	Unit	184.1	Unit	2.5	1	166	21	5	Positive
224	LPC	LPC(18:0) (ab)	FALSE	524.4	Unit	184.1	Unit	3.3	1	166	21	5	Positive
225	LPC	LPC(18:1) (ab)	FALSE	522.4	Unit	184.1	Unit	2.8	1	166	21	5	Positive
226	LPC	LPC(18:1) d7 (IS)	TRUE	529.4	Unit	184.1	Unit	2.8	1	166	21	5	Positive

化合物 番号	化合物 グループ	化合物名	ISTD?	プリカーサ イオン	MS1 Res	プロダクト イオン	MS2 Res	リテンション タイム (分)	デルタ RT	Frag.	コリジョン エネルギー	セル加速 電圧	極性
227	LPC	LPC(18:2) (a\b)	FALSE	520.3	Unit	184.1	Unit	2.3	1	166	21	5	Positive
228	oxLipid	LPC(18:2) [+OH]	FALSE	536.3	Unit	184.1	Unit	1.0	1	166	21	5	Positive
229	LPC	LPC(18:3) (a\b\c)	FALSE	518.3	Unit	184.1	Unit	2.0	1	166	21	5	Positive
230	LPC (104)	LPC 18:3(104)	FALSE	518.3	Unit	104.1	Unit	2.0	0.8	166	21	5	Positive
231	LPC	LPC(19:0) (a\b\c)	FALSE	538.4	Unit	184.1	Unit	3.5	1	166	21	5	Positive
232	LPC	LPC(19:1) (a\b\c)	FALSE	536.4	Unit	184.1	Unit	3.1	1	166	21	5	Positive
233	LPC	LPC(20:0) (a\b)	FALSE	552.4	Unit	184.1	Unit	3.8	1	166	21	5	Positive
234	LPC	LPC(20:1) (a\b)	FALSE	550.4	Unit	184.1	Unit	3.4	1	166	21	5	Positive
235	LPC	LPC(20:2) (a\b)	FALSE	548.4	Unit	184.1	Unit	2.9	1	166	21	5	Positive
236	LPC	LPC(20:3) (a\b)	FALSE	546.4	Unit	184.1	Unit	2.6	1	166	21	5	Positive
237	LPC (104)	LPC 20:3(104)	FALSE	546.4	Unit	104.1	Unit	2.6	1	166	21	5	Positive
238	LPC	LPC(20:4) (a\b)	FALSE	544.3	Unit	184.1	Unit	2.3	1	166	21	5	Positive
239	oxLipid	LPC(20:4) [+OH]	FALSE	560.3	Unit	184.1	Unit	1.4	1.5	166	21	5	Positive
240	LPC	LPC(20:5) (a\b)	FALSE	542.3	Unit	184.1	Unit	1.9	1	166	21	5	Positive
241	LPC	LPC(22:0) (a\b)	FALSE	580.4	Unit	184.1	Unit	4.4	1	166	21	5	Positive
242	LPC	LPC(22:1) (a\b)	FALSE	578.4	Unit	184.1	Unit	3.9	1	166	21	5	Positive
243	LPC	LPC(22:4) (a\b)	FALSE	572.4	Unit	184.1	Unit	2.8	1	166	21	5	Positive
244	LPC (104)	LPC 22:5(104)	FALSE	570.4	Unit	104.1	Unit	2.5	1.5	166	21	5	Positive
245	LPC	LPC(22:5) (a\b\c)	FALSE	570.4	Unit	184.1	Unit	2.5	1	166	21	5	Positive
246	LPC	LPC(22:6) (a\b)	FALSE	568.3	Unit	184.1	Unit	2.2	1	166	21	5	Positive
247	oxLipid	LPC(22:6) [+OH]	FALSE	584.3	Unit	184.1	Unit	1.5	1.5	166	21	5	Positive
248	LPC	LPC(24:0) (a\b)	FALSE	608.5	Unit	184.1	Unit	5.1	1	166	21	5	Positive
249	LPC	LPC(26:0) (a\b)	FALSE	636.5	Unit	184.1	Unit	5.9	1	166	21	5	Positive
250	LPCO	LPC(O-16:0)	FALSE	482.4	Unit	104.1	Unit	3.0	3	166	23	5	Positive
251	LPCO	LPC(O-18:0)	FALSE	510.4	Unit	104.1	Unit	3.6	3	166	23	5	Positive
252	LPCO	LPC(O-18:1)	FALSE	508.4	Unit	104.1	Unit	3.1	3	166	23	5	Positive
253	LPCO	LPC(O-20:0)	FALSE	538.4	Unit	104.1	Unit	4.1	3	166	23	5	Positive
254	LPCO	LPC(O-20:1)	FALSE	536.4	Unit	104.1	Unit	3.7	3	166	23	5	Positive
255	LPCO	LPC(O-22:0)	FALSE	566.5	Unit	104.1	Unit	4.8	2	166	23	5	Positive
256	LPCO	LPC(O-22:1)	FALSE	564.4	Unit	104.1	Unit	4.2	2	166	23	5	Positive
257	LPCO	LPC(O-24:0)	FALSE	594.5	Unit	104.1	Unit	5.6	1	166	23	5	Positive
258	LPCO	LPC(O-24:1)	FALSE	592.5	Unit	104.1	Unit	4.8	2	166	23	5	Positive
259	LPCO	LPC(O-24:2)	FALSE	590.5	Unit	104.1	Unit	4.3	2	166	23	5	Positive
260	LPCP	LPC(P-16:0)	FALSE	480.3	Unit	104.1	Unit	3.0	0.6	166	25	5	Positive
261	LPCP	LPC(P-17:0) (a\b)	FALSE	494.3	Unit	104.1	Unit	3.3	1	166	25	5	Positive
262	LPCP	LPC(P-18:0)	FALSE	508.3	Unit	104.1	Unit	3.6	0.6	166	25	5	Positive
263	LPCP	LPC(P-18:1)	FALSE	506.3	Unit	104.1	Unit	3.1	0.6	166	25	5	Positive
264	LPCP	LPC(P-20:0)	FALSE	536.3	Unit	104.1	Unit	4.1	0.6	166	25	5	Positive
265	LPE	LPE(16:0) (a\b)	FALSE	454.3	Unit	313.3	Unit	2.7	1	166	17	5	Positive
266	LPE	LPE(17:0) (a\b)	FALSE	468.3	Unit	327.3	Unit	3.1	1	166	17	5	Positive
267	LPE	LPE(18:0) (a\b)	FALSE	482.3	Unit	341.3	Unit	3.4	1	166	17	5	Positive
268	LPE	LPE(18:1) (a\b)	FALSE	480.3	Unit	339.3	Unit	2.9	1	166	17	5	Positive
269	LPE	LPE(18:1) d7 (IS)	TRUE	487.3	Unit	346.3	Unit	2.9	1	166	17	5	Positive
270	LPE	LPE(18:2) (a\b)	FALSE	478.3	Unit	337.3	Unit	2.4	1	166	17	5	Positive
271	LPE	LPE(20:4) (a\b)	FALSE	502.3	Unit	361.3	Unit	2.4	1	166	17	5	Positive
272	LPE	LPE(22:6) (a\b)	FALSE	526.3	Unit	385.3	Unit	2.3	1	166	17	5	Positive

化合物 番号	化合物 グループ	化合物名	ISTD?	プリカーサ イオン	MS1 Res	プロダクト イオン	MS2 Res	リテンション タイム (分)	デルタ RT	Frag.	コリジョン エネルギー	セル加速 電圧	極性
273	LPEP	LPE(P-16:0)	FALSE	438.3	Unit	266.4	Unit	3.1	1	166	19	5	Positive
274	LPEP	LPE(P-18:0)	FALSE	466.3	Unit	294.4	Unit	3.7	1	166	19	5	Positive
275	LPEP	LPE(P-18:1)	FALSE	464.3	Unit	292.4	Unit	3.3	1	166	19	5	Positive
276	LPEP	LPE(P-20:0)	FALSE	494.3	Unit	322.4	Unit	4.2	1	166	19	5	Positive
277	LPI	LPI 13:0 (IS)	TRUE	548.3	Unit	271.3	Unit	1.3	1	166	21	5	Positive
278	LPI	LPI(18:0)	FALSE	618.3	Unit	341.3	Unit	2.9	1	166	21	5	Positive
279	LPI	LPI(18:1) (a\b)	FALSE	616.3	Unit	339.3	Unit	2.4	1	166	21	5	Positive
280	LPI	LPI(18:2) (a\b)	FALSE	614.3	Unit	337.3	Unit	1.9	1	166	21	5	Positive
281	LPI	LPI(20:4) (a\b)	FALSE	638.3	Unit	361.3	Unit	1.9	1	166	21	5	Positive
282	Methyl-CE	methyl-CE(18:0)	FALSE	684.6	Unit	383.3	Unit	12.2	0.4	166	10	4	Positive
283	Methyl-CE	methyl-CE(18:1)	FALSE	682.6	Unit	383.3	Unit	11.9	0.4	166	10	4	Positive
284	Methyl-CE	methyl-CE(18:2)	FALSE	680.6	Unit	383.3	Unit	11.7	0.4	166	10	4	Positive
285	Methyl-CE	methyl-CE(20:4)	FALSE	704.6	Unit	383.3	Unit	11.6	0.4	166	10	4	Positive
286	mDE	methyl-DE(18:1)	FALSE	680.6	Unit	381.4	Unit	11.7	0.6	166	10	4	Positive
287	mDE	methyl-DE(18:2)	FALSE	678.6	Unit	381.4	Unit	11.5	0.6	166	10	4	Positive
288	MG	MG(18:1) d7 (IS)	TRUE	364.2	Unit	272.2	Unit	3.7	1	166	11	4	Positive
289	PA	PA(15:0_18:1) d7 (IS)	TRUE	685.6	Unit	570.6	Unit	6.2	2	166	13	4	Positive
290	PA	PA(34:1)	FALSE	692.6	Unit	577.6	Unit	6.7	2	166	13	4	Positive
291	PA	PA(36:2)	FALSE	718.6	Unit	603.6	Unit	7.0	2	166	13	4	Positive
292	PA	PA(36:3)	FALSE	716.6	Unit	601.6	Unit	6.4	2	166	13	4	Positive
293	PA	PA(36:4)	FALSE	714.6	Unit	599.6	Unit	5.7	2	166	13	4	Positive
294	PC	PC(28:0)	FALSE	678.5	Unit	184.1	Unit	5.2	0.8	166	25	5	Positive
295	PC	PC(14:0_16:0)	FALSE	706.5	Unit	184.1	Unit	6.0	0.8	166	25	5	Positive
296	PC	PC(31:0) (a\b)	FALSE	720.6	Unit	184.1	Unit	6.4	0.8	166	25	5	Positive
297	PC	PC(31:1)	FALSE	718.5	Unit	184.1	Unit	5.8	0.6	166	25	5	Positive
298	PC	PC(16:0_16:0)	FALSE	734.6	Unit	184.1	Unit	7.0	0.6	166	25	5	Positive
299	PC	PC(32:1)	FALSE	732.6	Unit	184.1	Unit	6.2	0.6	166	25	5	Positive
300	PC	PC(32:2)	FALSE	730.5	Unit	184.1	Unit	5.6	0.6	166	25	5	Positive
301	PC	PC(33:0) (a\b)	FALSE	748.6	Unit	184.1	Unit	7.5	1.2	166	25	5	Positive
302	PC	PC(33:1)	FALSE	746.6	Unit	184.1	Unit	6.7	0.6	166	25	5	Positive
303	PC	PC(33:2)	FALSE	744.6	Unit	184.1	Unit	6.0	0.6	166	25	5	Positive
304	PC	PC(16:0_18:0)	FALSE	762.6	Unit	184.1	Unit	8.1	0.6	166	25	5	Positive
305	PC	PC(16:0_18:1)	FALSE	760.6	Unit	184.1	Unit	7.2	0.6	166	25	5	Positive
306	PC	PC(16:0_18:2)	FALSE	758.6	Unit	184.1	Unit	6.5	0.6	166	25	5	Positive
307	oxLipid	PC(34:2) [+OH]	FALSE	774.6	Unit	184.1	Unit	4.8	1	166	25	5	Positive
308	PC	PC(34:3) (a\b\c)	FALSE	756.6	Unit	184.1	Unit	5.9	1.2	166	25	5	Positive
309	PC	PC(14:0_20:4)	FALSE	754.5	Unit	184.1	Unit	5.5	0.6	166	25	5	Positive
310	PC	PC(34:5)	FALSE	752.5	Unit	184.1	Unit	5.1	0.6	166	25	5	Positive
311	PC	PC(35:1) (a\b)	FALSE	774.6	Unit	184.1	Unit	7.7	1.2	166	25	5	Positive
312	PC	PC(35:2) (a\b)	FALSE	772.6	Unit	184.1	Unit	6.9	1.2	166	25	5	Positive
313	PC	PC(35:3) (a\b\c)	FALSE	770.6	Unit	184.1	Unit	6.3	3	166	25	5	Positive
314	PC	PC(15:0_20:4)	FALSE	768.6	Unit	184.1	Unit	6.0	0.6	166	25	5	Positive
315	PC	PC(35:5)	FALSE	766.5	Unit	184.1	Unit	5.4	0.6	166	25	5	Positive
316	PC	PC(18:0_18:1)	FALSE	788.6	Unit	184.1	Unit	8.3	0.8	166	25	5	Positive
317	PC	PC(36:2) (a\b)	FALSE	786.6	Unit	184.1	Unit	7.5	1	166	25	5	Positive
318	PC	PC(36:3) (a\b\c)	FALSE	784.6	Unit	184.1	Unit	6.8	1.2	166	25	5	Positive

化合物 番号	化合物 グループ	化合物名	ISTD?	プリカーサ イオン	MS1 Res	プロダクト イオン	MS2 Res	リテンション タイム (分)	デルタ RT	Frag.	コリジョン エネルギー	セル加速 電圧	極性
319	PC	PC(36:4) (a\b)	FALSE	782.6	Unit	184.1	Unit	6.3	1.6	166	25	5	Positive
320	oxLipid	PC(36:4) [+OH]	FALSE	798.6	Unit	184.1	Unit	5.4	2	166	25	5	Positive
321	PC	PC(36:5) (a\b)	FALSE	780.6	Unit	184.1	Unit	5.8	1	166	25	5	Positive
322	PC	PC(36:6) (a\b)	FALSE	778.5	Unit	184.1	Unit	5.3	0.6	166	25	5	Positive
323	PC	PC(37:4) (a\b)	FALSE	796.6	Unit	184.1	Unit	6.9	1.2	166	25	5	Positive
324	PC	PC(15:0_22:6)	FALSE	792.6	Unit	184.1	Unit	5.8	0.6	166	25	5	Positive
325	PC	PC(38:2)	FALSE	814.6	Unit	184.1	Unit	8.6	1.4	166	25	5	Positive
326	PC	PC(18:0_20:3)	FALSE	812.6	Unit	184.1	Unit	7.9	1.4	166	25	5	Positive
327	PC	PC(38:4) (a\b\c)	FALSE	810.6	Unit	184.1	Unit	7.3	1.6	166	25	5	Positive
328	PC	PC(38:5) (a\b)	FALSE	808.6	Unit	184.1	Unit	6.7	1	166	25	5	Positive
329	PC	PC(38:6) (a\b)	FALSE	806.6	Unit	184.1	Unit	6.1	1.2	166	25	5	Positive
330	oxLipid	PC(38:6) [+OH]	FALSE	822.6	Unit	184.1	Unit	5.3	2	166	25	5	Positive
331	PC	PC(38:7) (a\b\c)	FALSE	804.6	Unit	184.1	Unit	5.6	1	166	25	5	Positive
332	PC	PC(39:5) (a\b)	FALSE	822.6	Unit	184.1	Unit	6.8	1.2	166	25	5	Positive
333	PC	PC(39:6) (a\b)	FALSE	820.6	Unit	184.1	Unit	6.7	1	166	25	5	Positive
334	PC	PC(40:4) (a\b)	FALSE	838.6	Unit	184.1	Unit	8.4	1.2	166	25	5	Positive
335	PC	PC(40:5) (a\b)	FALSE	836.6	Unit	184.1	Unit	7.8	1.2	166	25	5	Positive
336	PC	PC(18:0_22:6)	FALSE	834.6	Unit	184.1	Unit	7.3	0.6	166	25	5	Positive
337	PC	PC(40:7) (a\b\c)	FALSE	832.6	Unit	184.1	Unit	6.4	1	166	25	5	Positive
338	PC	PC(40:8)	FALSE	830.6	Unit	184.1	Unit	5.8	0.8	166	25	5	Positive
339	PC	PC(15:0_18:1) d7 (IS)	TRUE	753.6	Unit	184.1	Unit	6.7	0.7	166	25	5	Positive
340	PC (O)	PC(O-16:0/16:0)	FALSE	720.6	Unit	184.1	Unit	7.7	0.8	166	25	5	Positive
341	PC (O)	PC(O-32:1)	FALSE	718.5	Unit	184.1	Unit	7.2	0.8	166	25	5	Positive
342	PC (O)	PC(O-32:2)	FALSE	716.6	Unit	184.1	Unit	6.3	0.8	166	25	5	Positive
343	PC (O)	PC(O-34:1)	FALSE	746.6	Unit	184.1	Unit	7.9	0.8	166	25	5	Positive
344	PC (O)	PC(O-34:2)	FALSE	744.6	Unit	184.1	Unit	7.2	1	166	25	5	Positive
345	PC (O)	PC(O-34:4)	FALSE	740.6	Unit	184.1	Unit	6.1	0.8	166	25	5	Positive
346	PC (O)	PC(O-35:4)	FALSE	754.5	Unit	184.1	Unit	6.7	0.8	166	25	5	Positive
347	PC (O)	PC(O-36:0)	FALSE	776.6	Unit	184.1	Unit	10.0	0.8	166	25	5	Positive
348	PC (O)	PC(O-18:0/18:1)	FALSE	774.6	Unit	184.1	Unit	9.1	0.8	166	25	5	Positive
349	PC (O)	PC(O-36:2) (a\b)	FALSE	772.6	Unit	184.1	Unit	8.2	1.2	166	25	5	Positive
350	PC (O)	PC(O-36:3) (a\b)	FALSE	770.6	Unit	184.1	Unit	7.4	1.2	166	25	5	Positive
351	PC (O)	PC(O-16:0/20:4)	FALSE	768.6	Unit	184.1	Unit	7.1	0.8	166	25	5	Positive
352	PC (O)	PC(O-36:5)	FALSE	766.5	Unit	184.1	Unit	6.4	0.8	166	25	5	Positive
353	PC (O)	PC(O-18:0/20:4)	FALSE	796.6	Unit	184.1	Unit	8.2	0.8	166	25	5	Positive
354	PC (O)	PC(O-38:5)	FALSE	794.6	Unit	184.1	Unit	7.2	0.8	166	25	5	Positive
355	PC (O)	PC(O-16:0/22:6)	FALSE	792.6	Unit	184.1	Unit	6.9	0.8	166	25	5	Positive
356	PC (O)	PC(O-40:5)	FALSE	822.6	Unit	184.1	Unit	8.3	0.8	166	25	5	Positive
357	PC (O)	PC(O-18:0/22:6)	FALSE	820.6	Unit	184.1	Unit	8.0	1	166	25	5	Positive
358	PC (O)	PC(O-40:7)	FALSE	818.6	Unit	184.1	Unit	7.0	1	166	25	5	Positive
359	PC (P)	PC(P-18:0/18:1) d9 (IS)	TRUE	781.6	Unit	184.1	Unit	8.9	1	166	25	5	Positive
360	PC (P)	PC(P-16:0/14:0)	FALSE	690.4	Unit	184.1	Unit	6.6	0.8	166	25	5	Positive
361	PC (P)	PC(P-16:0/16:0)	FALSE	718.5	Unit	184.1	Unit	7.6	0.8	166	25	5	Positive
362	PC (P)	PC(P-16:0/16:1)	FALSE	716.6	Unit	184.1	Unit	6.8	0.8	166	25	5	Positive
363	PC (P)	PC(P-16:0/18:0)	FALSE	746.6	Unit	184.1	Unit	8.8	0.8	166	25	5	Positive
364	PC (P)	PC(P-16:0/18:1)	FALSE	744.6	Unit	184.1	Unit	7.8	0.8	166	25	5	Positive

化合物 番号	化合物 グループ	化合物名	ISTD?	ブリーカーサ イオン	MS1 Res	プロダクト イオン	MS2 Res	リテンション タイム (分)	デルタ RT	Frag.	コリジョン エネルギー	セル加速 電圧	極性
365	PC (P)	PC(P-16:0/18:2)	FALSE	742.5	Unit	184.1	Unit	7.0	0.8	166	25	5	Positive
366	PC (P)	PC(P-16:0/18:3)	FALSE	740.6	Unit	184.1	Unit	6.4	0.8	166	25	5	Positive
367	PC (P)	PC(P-35:2) (a\b)	FALSE	756.6	Unit	184.1	Unit	7.5	1.5	166	25	5	Positive
368	PC (P)	PC(P-15:0/20:4) (a\b)	FALSE	752.6	Unit	184.1	Unit	6.3	1	166	25	5	Positive
369	PC (P)	PC(P-36:2) (a\b)	FALSE	770.6	Unit	184.1	Unit	8.1	1	166	25	5	Positive
370	PC (P)	PC(P-36:3)	FALSE	768.5	Unit	184.1	Unit	7.3	1	166	25	5	Positive
371	PC (P)	PC(P-16:0/20:4)	FALSE	766.5	Unit	184.1	Unit	6.9	0.8	166	25	5	Positive
372	PC (P)	PC(P-16:0/20:5)	FALSE	764.6	Unit	184.1	Unit	6.3	0.8	166	25	5	Positive
373	PC (P)	PC(P-37:4) (a\b)	FALSE	780.5	Unit	184.1	Unit	7.4	1	166	25	5	Positive
374	PC (P)	PC(P-18:0/20:4)	FALSE	794.6	Unit	184.1	Unit	8.0	0.8	166	25	5	Positive
375	PC (P)	PC(P-38:5) (a\b)	FALSE	792.6	Unit	184.1	Unit	7.2	1.2	166	25	5	Positive
376	PC (P)	PC(P-16:0/22:6)	FALSE	790.6	Unit	184.1	Unit	6.7	0.8	166	25	5	Positive
377	PC (P)	PC(P-20:0/20:4)	FALSE	822.6	Unit	184.1	Unit	9.2	0.8	166	25	5	Positive
378	PC (P)	PC(P-18:0/22:5)	FALSE	820.6	Unit	184.1	Unit	8.1	1	166	25	5	Positive
379	PC (P)	PC(P-18:0/22:6)	FALSE	818.6	Unit	184.1	Unit	7.8	0.8	166	25	5	Positive
380	PC (P)	PC(P-18:1/22:6)	FALSE	816.6	Unit	184.1	Unit	6.8	0.8	166	25	5	Positive
381	PE	PE(16:0_16:0)	FALSE	692.5	Unit	551.5	Unit	7.4	0.6	166	19	5	Positive
382	PE	PE(16:0_16:1)	FALSE	690.5	Unit	549.5	Unit	6.6	0.6	166	19	5	Positive
383	PE	PE(16:0_18:1)	FALSE	718.5	Unit	577.5	Unit	7.6	0.6	166	19	5	Positive
384	PE	PE(16:0_18:2)	FALSE	716.5	Unit	575.5	Unit	6.8	0.6	166	19	5	Positive
385	PE	PE(34:3) (a\b\c)	FALSE	714.5	Unit	573.5	Unit	6.2	1	166	19	5	Positive
386	PE	PE(35:1) (a\b)	FALSE	732.6	Unit	591.5	Unit	8.0	1	166	19	5	Positive
387	PE	PE(35:2) (a\b)	FALSE	730.5	Unit	589.5	Unit	7.3	1	166	19	5	Positive
388	PE	PE(18:0_18:1)	FALSE	746.6	Unit	605.6	Unit	8.8	0.6	166	19	5	Positive
389	PE	PE(36:2) (a\b)	FALSE	744.6	Unit	603.5	Unit	7.9	1	166	19	5	Positive
390	PE	PE(36:3) (a\b)	FALSE	742.5	Unit	601.5	Unit	7.1	0.6	166	19	5	Positive
391	PE	PE(16:0_20:4)	FALSE	740.5	Unit	599.5	Unit	6.8	0.6	166	19	5	Positive
392	PE	PE(36:5) (a\b)	FALSE	738.5	Unit	597.5	Unit	6.1	1	166	19	5	Positive
393	PE	PE(37:4) (a\b)	FALSE	754.6	Unit	613.5	Unit	7.2	1	166	19	5	Positive
394	PE	PE(18:0_20:3) (a\b)	FALSE	770.6	Unit	629.6	Unit	8.5	1.2	166	19	5	Positive
395	PE	PE(18:0_20:4)	FALSE	768.6	Unit	627.5	Unit	7.9	0.6	166	19	5	Positive
396	PE	PE(38:5) (a\b)	FALSE	766.5	Unit	625.5	Unit	7.1	1	166	19	5	Positive
397	PE	PE(16:0_22:6)	FALSE	764.5	Unit	623.5	Unit	6.6	0.6	166	19	5	Positive
398	PE	PE(39:6) (a\b)	FALSE	778.5	Unit	637.5	Unit	7.0	1	166	19	5	Positive
399	PE	PE(40:4) (a\b)	FALSE	796.6	Unit	655.6	Unit	8.9	1	166	19	5	Positive
400	PE	PE(18:0_22:5) (a\b)	FALSE	794.6	Unit	653.6	Unit	8.2	1.4	166	19	5	Positive
401	PE	PE(18:0_22:6)	FALSE	792.6	Unit	651.5	Unit	7.6	0.6	166	19	5	Positive
402	PE	PE(18:1_22:6) (a\b)	FALSE	790.5	Unit	649.5	Unit	6.8	0.6	166	19	5	Positive
403	PE	PE(15:0_18:1) d7 (IS)	TRUE	711.6	Unit	570.5	Unit	7.0	1	166	19	5	Positive
404	PE (O)	PE(O-34:1)	FALSE	704.6	Unit	563.5	Unit	8.3	0.8	166	19	5	Positive
405	PE (O)	PE(O-16:0/18:2)	FALSE	702.5	Unit	561.5	Unit	7.6	0.8	166	19	5	Positive
406	PE (O)	PE(O-36:3) (a\b)	FALSE	728.6	Unit	587.5	Unit	7.8	1	166	19	5	Positive
407	PE (O)	PE(O-16:0/20:4)	FALSE	726.5	Unit	585.5	Unit	7.5	0.8	166	19	5	Positive
408	PE (O)	PE(O-36:5)	FALSE	724.5	Unit	583.5	Unit	6.8	0.8	166	19	5	Positive
409	PE (O)	PE(O-38:4) (a\b)	FALSE	754.6	Unit	613.6	Unit	8.5	1.2	166	19	5	Positive
410	PE (O)	PE(O-38:5) (a\b)	FALSE	752.6	Unit	611.5	Unit	7.8	1.2	166	19	5	Positive

化合物 番号	化合物 グループ	化合物名	ISTD?	プリカーサ イオン	MS1 Res	プロダクト イオン	MS2 Res	リテンション タイム (分)	デルタ RT	Frag.	コリジョン エネルギー	セル加速 電圧	極性
411	PE (O)	PE(O-16:0/22:6)	FALSE	750.6	Unit	609.5	Unit	7.3	1.2	166	19	5	Positive
412	PE (O)	PE(O-18:0/22:5)	FALSE	780.6	Unit	639.6	Unit	8.7	0.8	166	19	5	Positive
413	PE (O)	PE(O-18:0/22:6)	FALSE	778.5	Unit	637.5	Unit	8.2	0.8	166	19	5	Positive
414	PE (O)	PE(O-18:1/22:6)	FALSE	776.6	Unit	635.5	Unit	7.4	0.8	166	19	5	Positive
415	PE (P)	PE(P-15:0/22:6)	FALSE	734.5	Unit	385.3	Unit	6.5	1	166	19	5	Positive
416	PE (P)	PE(P-16:0/18:1)	FALSE	702.5	Unit	339.3	Unit	8.3	0.6	166	19	5	Positive
417	PE (P)	PE(P-16:0/18:2)	FALSE	700.5	Unit	337.3	Unit	7.4	0.6	166	19	5	Positive
418	PE (P)	PE(P-16:0/20:3) (a\b)	FALSE	726.5	Unit	363.3	Unit	7.8	0.6	166	19	5	Positive
419	PE (P)	PE(P-16:0/20:4)	FALSE	724.5	Unit	361.3	Unit	7.3	0.6	166	19	5	Positive
420	PE (P)	PE(P-16:0/20:5)	FALSE	722.5	Unit	359.3	Unit	6.7	0.6	166	19	5	Positive
421	PE (P)	PE(P-16:0/22:4)	FALSE	752.6	Unit	389.3	Unit	8.2	0.6	166	19	5	Positive
422	PE (P)	PE(P-16:0/22:5) (a\b)	FALSE	750.5	Unit	387.3	Unit	7.6	1.4	166	19	5	Positive
423	PE (P)	PE(P-16:0/22:6)	FALSE	748.5	Unit	385.3	Unit	7.1	0.6	166	19	5	Positive
424	PE (P)	PE(P-17:0/20:4) (a\b)	FALSE	738.6	Unit	361.3	Unit	7.8	1	166	19	5	Positive
425	PE (P)	PE(P-17:0/22:6) (a\b)	FALSE	762.6	Unit	385.3	Unit	7.6	1	166	19	5	Positive
426	PE (P)	PE(P-18:0/18:1)	FALSE	730.6	Unit	339.3	Unit	9.5	0.6	166	19	5	Positive
427	PE (P)	PE(P-18:0/18:1) d9 (IS)	TRUE	739.5	Unit	348.3	Unit	9.4	1	166	19	5	Positive
428	PE (P)	PE(P-18:0/18:2)	FALSE	728.6	Unit	337.3	Unit	8.6	0.6	166	19	5	Positive
429	PE (P)	PE(P-18:0/18:3)	FALSE	726.5	Unit	335.3	Unit	7.9	1	166	19	5	Positive
430	PE (P)	PE(P-18:0/20:3) (a\b)	FALSE	754.5	Unit	363.3	Unit	9.0	0.6	166	19	5	Positive
431	PE (P)	PE(P-18:0/20:4)	FALSE	752.6	Unit	361.3	Unit	8.5	0.6	166	19	5	Positive
432	PE (P)	PE(P-18:0/20:5)	FALSE	750.5	Unit	359.3	Unit	7.8	0.6	166	19	5	Positive
433	PE (P)	PE(P-18:0/22:4)	FALSE	780.6	Unit	389.3	Unit	9.4	0.6	166	19	5	Positive
434	PE (P)	PE(P-18:0/22:5) (a\b)	FALSE	778.5	Unit	387.3	Unit	8.8	1.4	166	19	5	Positive
435	PE (P)	PE(P-18:0/22:6)	FALSE	776.6	Unit	385.3	Unit	8.2	0.6	166	19	5	Positive
436	PE (P)	PE(P-18:1/18:1) (a\b)	FALSE	728.6	Unit	339.3	Unit	8.5	0.6	166	19	5	Positive
437	PE (P)	PE(P-18:1/18:2) (a\b)	FALSE	726.5	Unit	337.3	Unit	7.7	0.6	166	19	5	Positive
438	PE (P)	PE(P-18:1/20:3) (a\b)	FALSE	752.5	Unit	363.3	Unit	8.0	0.6	166	19	5	Positive
439	PE (P)	PE(P-18:1/20:4) (a\b)	FALSE	750.5	Unit	361.3	Unit	7.6	0.6	166	19	5	Positive
440	PE (P)	PE(P-18:1/20:5) (a\b)	FALSE	748.5	Unit	359.3	Unit	6.9	0.6	166	19	5	Positive
441	PE (P)	PE(P-18:1/22:4)	FALSE	778.5	Unit	389.3	Unit	8.4	0.6	166	19	5	Positive
442	PE (P)	PE(P-18:1/22:5) (a\b)	FALSE	776.6	Unit	387.3	Unit	7.8	1.4	166	19	5	Positive
443	PE (P)	PE(P-18:1/22:6) (a\b)	FALSE	774.5	Unit	385.3	Unit	7.3	1	166	19	5	Positive
444	PE (P)	PE(P-19:0/20:4) (a\b)	FALSE	766.6	Unit	361.3	Unit	9.0	1	166	19	5	Positive
445	PE (P)	PE(P-20:0/18:1)	FALSE	758.6	Unit	339.3	Unit	10.1	0.6	166	19	5	Positive
446	PE (P)	PE(P-20:0/18:2)	FALSE	756.6	Unit	337.3	Unit	9.9	0.6	166	19	5	Positive
447	PE (P)	PE(P-20:0/20:4)	FALSE	780.6	Unit	361.3	Unit	9.7	0.6	166	19	5	Positive
448	PE (P)	PE(P-20:0/22:6)	FALSE	804.6	Unit	385.3	Unit	9.5	0.6	166	19	5	Positive
449	PE (P)	PE(P-20:1/20:4)	FALSE	778.5	Unit	361.3	Unit	8.6	0.6	166	19	5	Positive
450	PE (P)	PE(P-20:1/22:6)	FALSE	802.6	Unit	385.3	Unit	8.3	0.6	166	19	5	Positive
451	PG	PG(34:1)	FALSE	766.6	Unit	577.5	Unit	6.0	0.6	166	17	5	Positive
452	PG	PG(36:1)	FALSE	794.6	Unit	605.6	Unit	7.1	0.6	166	17	5	Positive
453	PG	PG(36:2)	FALSE	792.6	Unit	603.5	Unit	6.5	0.6	166	17	5	Positive
454	PG	PG(15:0_18:1) d7 (IS)	TRUE	759.6	Unit	570.6	Unit	5.9	1	166	17	5	Positive
455	PI	PI(15:0_18:1) d7 (IS)	FALSE	847.6	Unit	570.6	Unit	5.6	1.5	166	17	5	Positive
456	PI	PI(16:0/16:0)	FALSE	828.6	Unit	551.6	Unit	5.9	0.8	166	17	5	Positive

化合物 番号	化合物 グループ	化合物名	ISTD?	プリカーサ イオン	MS1 Res	プロダクト イオン	MS2 Res	リテンション タイム (分)	デルタ RT	Frag.	コリジョン エネルギー	セル加速 電圧	極性
457	PI	PI(16:0_16:1)	FALSE	826.5	Unit	549.5	Unit	5.3	0.8	166	17	5	Positive
458	PI	PI(34:0)	FALSE	856.6	Unit	579.6	Unit	6.8	0.8	166	17	5	Positive
459	PI	PI(34:1)	FALSE	854.6	Unit	577.6	Unit	6.0	0.8	166	17	5	Positive
460	PI	PI(15-MHDA_18:1)/PI(17:0_18:1)	FALSE	868.6	Unit	591.6	Unit	6.5	0.8	166	17	5	Positive
461	PI	PI(15-MHDA_18:2)/PI(17:0_18:2)	FALSE	866.6	Unit	589.6	Unit	5.9	0.8	166	17	5	Positive
462	PI	PI(18:0_18:1)	FALSE	882.6	Unit	605.6	Unit	7.0	0.8	166	17	5	Positive
463	PI	PI(36:2)	FALSE	880.6	Unit	603.6	Unit	6.3	3	166	17	5	Positive
464	PI	PI(36:3) (a\b)	FALSE	878.6	Unit	601.6	Unit	5.7	1	166	17	5	Positive
465	PI	PI(16:0_20:4)	FALSE	876.6	Unit	599.6	Unit	5.4	0.8	166	17	5	Positive
466	PI	PI(37:4)	FALSE	890.6	Unit	613.6	Unit	5.8	1	166	17	5	Positive
467	PI	PI(37:6)	FALSE	886.6	Unit	609.6	Unit	5.7	1	166	17	5	Positive
468	PI	PI(18:0_20:2)	FALSE	908.6	Unit	631.6	Unit	7.2	0.8	166	17	5	Positive
469	PI	PI(18:0_20:3) (a\b)	FALSE	906.6	Unit	629.6	Unit	6.8	1	166	17	5	Positive
470	PI	PI(18:0_20:4)	FALSE	904.6	Unit	627.6	Unit	6.3	0.8	166	17	5	Positive
471	PI	PI(38:5) (a\b)	FALSE	902.6	Unit	625.6	Unit	5.6	1	166	17	5	Positive
472	PI	PI(38:6)	FALSE	900.6	Unit	623.6	Unit	5.3	0.8	166	17	5	Positive
473	PI	PI(40:4) (a\b)	FALSE	932.6	Unit	655.6	Unit	7.1	0.8	166	17	5	Positive
474	PI	PI(18:0_22:5) (a\b)	FALSE	930.6	Unit	653.6	Unit	6.5	1	166	17	5	Positive
475	PI	PI(18:0_22:6)	FALSE	928.6	Unit	651.6	Unit	6.1	0.8	166	17	5	Positive
476	PIP	PIP1(38:4)	FALSE	984.7	Unit	627.7	Unit	5.3	2	166	20	4	Positive
477	PS	PS(36:1)	FALSE	790.6	Unit	605.6	Unit	7.1	1	166	23	5	Positive
478	PS	PS(36:2)	FALSE	788.5	Unit	603.5	Unit	6.4	1	166	23	5	Positive
479	PS	PS(38:4)	FALSE	812.5	Unit	627.5	Unit	6.3	1	166	23	5	Positive
480	PS	PS(40:5)	FALSE	838.6	Unit	653.6	Unit	6.4	1	166	23	5	Positive
481	PS	PS(15:0_18:1) d7 (IS)	TRUE	755.5	Unit	570.5	Unit	5.7	1	166	23	4	Positive
482	S1P	S1P(d16:1)	FALSE	352.2	Unit	236.3	Unit	1.5	3	166	12	4	Positive
483	S1P	S1P(d18:0)	FALSE	382.2	Unit	284.3	Unit	2.3	3	166	12	4	Positive
484	S1P	S1P(d18:1)	FALSE	380.2	Unit	264.3	Unit	2.1	3	166	12	4	Positive
485	S1P	S1P(d18:1) d7 (IS)	TRUE	387.2	Unit	271.3	Unit	2.1	1	166	12	4	Positive
486	S1P	S1P(d18:2)	FALSE	378.2	Unit	262.3	Unit	1.6	3	166	12	4	Positive
487	SM	SM(d17:1/14:0)	FALSE	661.5	Unit	184.1	Unit	4.8	0.6	166	29	5	Positive
488	SM	SM(d18:0/14:0)	FALSE	677.6	Unit	184.1	Unit	5.5	0.6	166	29	5	Positive
489	SM	SM(d18:1/14:0)/SM(d16:1/16:0)	FALSE	675.5	Unit	184.1	Unit	5.2	0.6	166	29	5	Positive
490	SM	SM(d18:2/14:0)	FALSE	673.5	Unit	184.1	Unit	4.7	0.6	166	29	5	Positive
491	SM	SM(d17:1/16:0)	FALSE	689.6	Unit	184.1	Unit	5.6	0.6	166	29	5	Positive
492	SM	SM(d18:0/16:0)	FALSE	705.6	Unit	184.1	Unit	6.4	0.6	166	29	5	Positive
493	SM	SM(d18:1/16:0)	FALSE	703.6	Unit	184.1	Unit	6.0	0.6	166	29	5	Positive
494	SM	SM(d18:2/16:0)	FALSE	701.6	Unit	184.1	Unit	5.4	0.6	166	29	5	Positive
495	SM	SM(34:3)	FALSE	699.5	Unit	184.1	Unit	4.9	0.6	166	29	5	Positive
496	SM	SM(35:1) (a\b)	FALSE	717.6	Unit	184.1	Unit	6.4	0.6	166	29	5	Positive
497	SM	SM(35:2) (a\b)	FALSE	715.6	Unit	184.1	Unit	5.9	1	166	29	5	Positive
498	SM	SM(d18:1/18:0)/SM(d16:1/20:0)	FALSE	731.6	Unit	184.1	Unit	7.0	0.6	166	29	5	Positive
499	SM	SM(d18:2/18:0)	FALSE	729.6	Unit	184.1	Unit	6.2	0.6	166	29	5	Positive
500	SM	SM(d18:2/18:1)	FALSE	727.6	Unit	184.1	Unit	5.6	0.6	166	29	5	Positive
501	SM	SM(37:1)	FALSE	745.6	Unit	184.1	Unit	7.6	1	166	29	5	Positive
502	SM	SM(37:2)	FALSE	743.5	Unit	184.1	Unit	6.7	0.6	166	29	5	Positive

化合物 番号	化合物 グループ	化合物名	ISTD?	プリカーサ イオン	MS1 Res	プロダクト イオン	MS2 Res	リテンション タイム (分)	デルタ RT	Frag.	コリジョン エネルギー	セル加速 電圧	極性
503	SM	SM(d18:1/20:0)/SM(d16:1/22:0)	FALSE	759.6	Unit	184.1	Unit	8.2	0.6	166	29	5	Positive
504	SM	SM(d18:2/20:0)	FALSE	757.6	Unit	184.1	Unit	7.3	0.6	166	29	5	Positive
505	SM	SM(38:3) (a\b)	FALSE	755.6	Unit	184.1	Unit	6.5	1	166	29	5	Positive
506	SM	SM(d16:1/23:0)/SM(d17:1/22:0)	FALSE	773.7	Unit	184.1	Unit	8.8	0.6	166	29	5	Positive
507	SM	SM(d18:0/22:0)	FALSE	789.7	Unit	184.1	Unit	9.8	0.6	166	29	5	Positive
508	SM	SM(d18:1/22:0)/SM(d16:1/24:0)	FALSE	787.7	Unit	184.1	Unit	9.4	0.6	166	29	5	Positive
509	SM	SM(40:2) (a\b)	FALSE	785.7	Unit	184.1	Unit	8.3	1.4	166	29	5	Positive
510	SM	SM(40:3) (a\b)	FALSE	783.6	Unit	184.1	Unit	7.5	1.2	166	29	5	Positive
511	SM	SM(41:0)	FALSE	803.7	Unit	184.1	Unit	10.1	0.8	166	29	5	Positive
512	SM	SM(41:1) (a\b)	FALSE	801.7	Unit	184.1	Unit	9.9	1	166	29	5	Positive
513	SM	SM(41:2) (a\b)	FALSE	799.7	Unit	184.1	Unit	8.9	1.4	166	29	5	Positive
514	SM	SM(d18:1/24:0)	FALSE	815.7	Unit	184.1	Unit	10.1	0.6	166	29	5	Positive
515	SM	SM(42:2) (a\b)	FALSE	813.7	Unit	184.1	Unit	9.5	1.4	166	29	5	Positive
516	SM	SM(43:1)	FALSE	829.7	Unit	184.1	Unit	10.2	0.8	166	29	5	Positive
517	SM	SM(43:2) (a\b\c)	FALSE	827.7	Unit	184.1	Unit	9.9	1.4	166	29	5	Positive
518	SM	SM(44:1)	FALSE	843.6	Unit	184.1	Unit	10.3	1	166	29	5	Positive
519	SM	SM(44:2)	FALSE	841.6	Unit	184.1	Unit	10.1	1	166	29	5	Positive
520	SM	SM(44:3)	FALSE	839.6	Unit	184.1	Unit	9.6	2	166	29	5	Positive
521	SM	SM(d18:1/15:0) d9 (IS)	TRUE	698.6	Unit	193.1	Unit	5.6	1	166	29	5	Positive
522	SPN	Sph(d17:1) (IS)	FALSE	286.3	Unit	268.3	Unit	1.8	3	166	10	4	Positive
523	SPN	Sph(d18:1)	FALSE	300.3	Unit	282.3	Unit	2.4	3	166	10	4	Positive
524	SPN	Sph(d18:2)	FALSE	298.3	Unit	280.3	Unit	1.8	3	166	10	4	Positive
525	Sulfatides	SHexCer(d18:1/12:0) (IS)	TRUE	724.8	Unit	264.3	Unit	4.1	0.6	166	56	5	Positive
526	Sulfatides	SHexCer(d18:1/16:0(OH))	FALSE	796.8	Unit	264.3	Unit	5.0	0.6	166	56	5	Positive
527	Sulfatides	SHexCer(d18:1/16:0)	FALSE	780.8	Unit	264.3	Unit	5.2	0.6	166	56	5	Positive
528	Sulfatides	SHexCer(d18:1/24:0(OH))	FALSE	908.8	Unit	264.3	Unit	8.6	0.6	166	56	5	Positive
529	Sulfatides	SHexCer(d18:1/24:1(OH))	FALSE	906.8	Unit	264.3	Unit	7.5	0.8	166	56	5	Positive
530	Sulfatides	SHexCer(d18:1/24:1)	FALSE	890.8	Unit	264.3	Unit	7.7	0.6	166	56	5	Positive
531	TG	TG(48:0) [NL-16:0]	FALSE	824.8	Unit	551.5	Unit	11.4	0.7	166	25	5	Positive
532	TG	TG(48:0) [NL-18:0]	FALSE	824.8	Unit	523.5	Unit	11.4	0.7	166	25	5	Positive
533	TG	TG(48:1) [NL-16:1]	FALSE	822.8	Unit	551.5	Unit	11.3	0.7	166	25	5	Positive
534	TG	TG(48:1) [NL-18:1]	FALSE	822.8	Unit	523.5	Unit	11.3	0.7	166	25	5	Positive
535	TG	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS)	TRUE	829.8	Unit	523.5	Unit	11.3	1	166	25	5	Positive
536	TG	TG(48:2) [NL-14:0]	FALSE	820.8	Unit	575.5	Unit	11.1	0.7	166	25	5	Positive
537	TG	TG(48:2) [NL-14:1]	FALSE	820.8	Unit	577.5	Unit	11.1	0.7	166	25	5	Positive
538	TG	TG(48:2) [NL-16:1]	FALSE	820.8	Unit	549.5	Unit	11.1	0.7	166	25	5	Positive
539	TG	TG(48:2) [NL-18:2]	FALSE	820.8	Unit	523.5	Unit	11.1	0.7	166	25	5	Positive
540	TG	TG(48:3) [NL-14:0]	FALSE	818.8	Unit	573.5	Unit	11.0	0.7	166	25	5	Positive
541	TG	TG(48:3) [NL-16:1]	FALSE	818.8	Unit	547.5	Unit	11.0	0.7	166	25	5	Positive
542	TG	TG(48:3) [NL-18:3]	FALSE	818.8	Unit	523.5	Unit	11.0	0.7	166	25	5	Positive
543	TG	TG(49:1) [NL-16:1]	FALSE	836.8	Unit	565.5	Unit	11.4	0.7	166	25	5	Positive
544	TG	TG(49:1) [NL-17:1]	FALSE	836.8	Unit	551.5	Unit	11.4	0.7	166	25	5	Positive
545	TG	TG(50:0) [NL-18:0]	FALSE	852.8	Unit	551.5	Unit	11.6	0.7	166	25	5	Positive
546	TG	TG(50:1) [NL-14:0]	FALSE	850.8	Unit	605.5	Unit	11.5	0.7	166	25	5	Positive
547	TG	TG(50:1) [NL-16:0]	FALSE	850.8	Unit	577.5	Unit	11.5	0.7	166	25	5	Positive
548	TG	TG(50:1) [NL-18:1]	FALSE	850.8	Unit	551.5	Unit	11.5	0.7	166	25	5	Positive

化合物 番号	化合物 グループ	化合物名	ISTD?	プリカーサ イオン	MS1 Res	プロダクト イオン	MS2 Res	リテンション タイム (分)	デルタ RT	Frag.	コリジョン エネルギー	セル加速 電圧	極性
549	TG	TG(50:2) [NL-14:0]	FALSE	848.8	Unit	603.5	Unit	11.3	0.7	166	25	5	Positive
550	TG	TG(50:2) [NL-16:1]	FALSE	848.8	Unit	577.5	Unit	11.3	0.7	166	25	5	Positive
551	TG	TG(50:2) [NL-18:1]	FALSE	848.8	Unit	549.5	Unit	11.3	0.7	166	25	5	Positive
552	TG	TG(50:2) [NL-18:2]	FALSE	848.8	Unit	551.5	Unit	11.3	0.7	166	25	5	Positive
553	TG	TG(50:3) [NL-14:0]	FALSE	846.8	Unit	601.5	Unit	11.1	0.7	166	25	5	Positive
554	TG	TG(50:3) [NL-14:1]	FALSE	846.8	Unit	603.5	Unit	11.1	0.7	166	25	5	Positive
555	TG	TG(50:3) [NL-16:1]	FALSE	846.8	Unit	575.5	Unit	11.1	0.7	166	25	5	Positive
556	TG	TG(50:3) [NL-18:2]	FALSE	846.8	Unit	549.5	Unit	11.1	0.7	166	25	5	Positive
557	TG	TG(50:3) [NL-18:3]	FALSE	846.8	Unit	551.5	Unit	11.2	0.7	166	25	5	Positive
558	TG	TG(50:4) [NL-14:0]	FALSE	844.8	Unit	599.5	Unit	11.0	0.7	166	25	5	Positive
559	TG	TG(50:4) [NL-18:3]	FALSE	844.8	Unit	549.5	Unit	11.0	0.7	166	25	5	Positive
560	TG	TG(50:4) [NL-20:4]	FALSE	844.8	Unit	523.5	Unit	11.1	0.7	166	25	5	Positive
561	TG	TG(51:0) [NL-16:0]	FALSE	866.7	Unit	593.4	Unit	11.7	0.7	166	25	5	Positive
562	TG	TG(51:1) [NL-17:0]	FALSE	864.8	Unit	577.5	Unit	11.5	0.7	166	25	5	Positive
563	TG	TG(51:2) [NL-15:0]	FALSE	862.8	Unit	603.5	Unit	11.4	0.7	166	25	5	Positive
564	TG	TG(51:2) [NL-17:0]	FALSE	862.8	Unit	575.5	Unit	11.4	0.7	166	25	5	Positive
565	TG	TG(51:2) [NL-17:1]	FALSE	862.8	Unit	577.5	Unit	11.4	0.7	166	25	5	Positive
566	TG	TG(52:1) [NL-18:0]	FALSE	878.8	Unit	577.5	Unit	11.7	0.7	166	25	5	Positive
567	TG	TG(52:1) [NL-18:1]	FALSE	878.8	Unit	579.5	Unit	11.7	0.7	166	25	5	Positive
568	TG	TG(52:2) [NL-16:0]	FALSE	876.8	Unit	603.5	Unit	11.5	0.7	166	25	5	Positive
569	TG	TG(52:2) [NL-18:2]	FALSE	876.8	Unit	579.5	Unit	11.5	0.7	166	25	5	Positive
570	TG	TG(52:3) [NL-16:1]	FALSE	874.8	Unit	603.5	Unit	11.3	0.7	166	25	5	Positive
571	TG	TG(52:3) [NL-18:2]	FALSE	874.8	Unit	577.5	Unit	11.3	0.7	166	25	5	Positive
572	TG	TG(52:4) [NL-16:1]	FALSE	872.8	Unit	601.5	Unit	11.2	0.7	166	25	5	Positive
573	TG	TG(52:4) [NL-18:2]	FALSE	872.8	Unit	575.5	Unit	11.2	0.7	166	25	5	Positive
574	TG	TG(52:4) [NL-18:3]	FALSE	872.8	Unit	577.5	Unit	11.2	0.7	166	25	5	Positive
575	TG	TG(52:5) [NL-18:3]	FALSE	870.8	Unit	575.5	Unit	11.1	0.7	166	25	5	Positive
576	TG	TG(52:5) [NL-20:4]	FALSE	870.8	Unit	549.5	Unit	11.1	0.7	166	25	5	Positive
577	TG	TG(52:5) [NL-20:5]	FALSE	870.8	Unit	551.5	Unit	11.1	0.7	166	25	5	Positive
578	TG	TG(53:2) [NL-17:1]	FALSE	890.8	Unit	605.5	Unit	11.6	0.7	166	25	5	Positive
579	TG	TG(53:2) [NL-18:1]	FALSE	890.8	Unit	591.5	Unit	11.5	0.7	166	25	5	Positive
580	TG	TG(54:0) [NL-18:0]	FALSE	908.8	Unit	607.5	Unit	12.0	0.7	166	25	5	Positive
581	TG	TG(54:1) [NL-18:1]	FALSE	906.8	Unit	607.5	Unit	11.9	0.7	166	25	5	Positive
582	TG	TG(54:2) [NL-18:0]	FALSE	904.8	Unit	603.5	Unit	11.7	0.7	166	25	5	Positive
583	TG	TG(54:2) [NL-20:1]	FALSE	904.8	Unit	577.5	Unit	11.7	0.7	166	25	5	Positive
584	TG	TG(54:3) [NL-18:1]	FALSE	902.8	Unit	603.5	Unit	11.5	0.7	166	25	5	Positive
585	TG	TG(54:3) [NL-18:2]	FALSE	902.8	Unit	605.5	Unit	11.5	0.7	166	25	5	Positive
586	TG	TG(54:4) [NL-18:2]	FALSE	900.8	Unit	603.5	Unit	11.3	0.7	166	25	5	Positive
587	TG	TG(54:4) [NL-20:3]	FALSE	900.8	Unit	577.5	Unit	11.4	0.7	166	25	5	Positive
588	TG	TG(54:5) [NL-18:3]	FALSE	898.8	Unit	603.5	Unit	11.2	0.7	166	25	5	Positive
589	TG	TG(54:5) [NL-20:4]	FALSE	898.8	Unit	577.5	Unit	11.3	0.7	166	25	5	Positive
590	TG	TG(54:6) [NL-18:3]	FALSE	896.8	Unit	601.5	Unit	11.1	0.7	166	25	5	Positive
591	TG	TG(54:6) [NL-20:4]	FALSE	896.8	Unit	575.5	Unit	11.1	0.7	166	25	5	Positive
592	TG	TG(54:6) [NL-20:5]	FALSE	896.8	Unit	577.5	Unit	11.1	0.7	166	25	5	Positive
593	TG	TG(54:6) [NL-22:6]	FALSE	896.8	Unit	551.5	Unit	11.2	0.7	166	25	5	Positive
594	TG	TG(54:7) [NL-20:5]	FALSE	894.8	Unit	575.5	Unit	11.0	0.7	166	25	5	Positive

化合物 番号	化合物 グループ	化合物名	ISTD?	プリカーサ イオン	MS1 Res	プロダクト イオン	MS2 Res	リテンション タイム (分)	デルタ RT	Frag.	コリジョン エネルギー	セル加速 電圧	極性
595	TG	TG(54:7) [NL-22:6]	FALSE	894.8	Unit	549.5	Unit	11.0	0.7	166	25	5	Positive
596	TG	TG(56:6) [NL-20:4]	FALSE	924.8	Unit	603.5	Unit	11.3	0.7	166	25	5	Positive
597	TG	TG(56:6) [NL-22:5]	FALSE	924.8	Unit	577.5	Unit	11.3	0.7	166	25	5	Positive
598	TG	TG(56:7) [NL-20:4]	FALSE	922.8	Unit	601.5	Unit	11.1	0.7	166	25	5	Positive
599	TG	TG(56:7) [NL-20:5]	FALSE	922.8	Unit	603.5	Unit	11.1	0.7	166	25	5	Positive
600	TG	TG(56:7) [NL-22:5]	FALSE	922.8	Unit	575.5	Unit	11.1	0.7	166	25	5	Positive
601	TG	TG(56:7) [NL-22:6]	FALSE	922.8	Unit	577.5	Unit	11.2	0.7	166	25	5	Positive
602	TG	TG(56:8) [NL-20:4]	FALSE	920.8	Unit	599.5	Unit	11.0	0.7	166	25	5	Positive
603	TG	TG(56:8) [NL-20:5]	FALSE	920.8	Unit	601.5	Unit	11.0	0.7	166	25	5	Positive
604	TG	TG(56:8) [NL-22:6]	FALSE	920.8	Unit	575.5	Unit	11.1	0.7	166	25	5	Positive
605	TG	TG(56:9) [NL-22:6]	FALSE	918.8	Unit	573.5	Unit	10.9	0.7	166	25	5	Positive
606	TG	TG(58:10) [NL-22:6]	FALSE	944.9	Unit	599.5	Unit	11.0	0.7	166	25	5	Positive
607	TG	TG(58:8) [NL-22:6]	FALSE	948.8	Unit	603.5	Unit	11.2	0.7	166	25	5	Positive
608	TG	TG(58:9) [NL-22:6]	FALSE	946.9	Unit	601.5	Unit	11.1	0.7	166	25	5	Positive
609	TG SIM	TG(48:0) [SIM]	FALSE	824.8	Unit	824.8	Unit	11.4	0.7	166	0	5	Positive
610	TG SIM	TG(48:1) [SIM]	FALSE	822.8	Unit	822.8	Unit	11.3	0.7	166	0	5	Positive
611	TG SIM	TG(48:2) [SIM]	FALSE	820.8	Unit	820.8	Unit	11.1	0.7	166	0	5	Positive
612	TG SIM	TG(48:3) [SIM]	FALSE	818.8	Unit	818.8	Unit	11.0	0.7	166	0	5	Positive
613	TG SIM	TG(49:1) [SIM]	FALSE	836.8	Unit	836.8	Unit	11.4	0.7	166	0	5	Positive
614	TG SIM	TG(50:0) [SIM]	FALSE	852.8	Unit	852.8	Unit	11.6	0.7	166	0	5	Positive
615	TG SIM	TG(50:1) [SIM]	FALSE	850.8	Unit	850.8	Unit	11.5	0.7	166	0	5	Positive
616	TG SIM	TG(50:2) [SIM]	FALSE	848.8	Unit	848.8	Unit	11.3	0.7	166	0	5	Positive
617	TG SIM	TG(50:3) [SIM]	FALSE	846.8	Unit	846.8	Unit	11.1	0.7	166	0	5	Positive
618	TG SIM	TG(50:4) [SIM]	FALSE	844.8	Unit	844.8	Unit	11.0	0.7	166	0	5	Positive
619	TG SIM	TG(51:0) [SIM]	FALSE	866.7	Unit	866.7	Unit	11.7	0.7	166	0	5	Positive
620	TG SIM	TG(51:1) [SIM]	FALSE	864.8	Unit	864.8	Unit	11.5	0.7	166	0	5	Positive
621	TG SIM	TG(51:2) [SIM]	FALSE	862.8	Unit	862.8	Unit	11.4	0.7	166	0	5	Positive
622	TG SIM	TG(52:1) [SIM]	FALSE	878.8	Unit	878.8	Unit	11.7	0.7	166	0	5	Positive
623	TG SIM	TG(52:2) [SIM]	FALSE	876.8	Unit	876.8	Unit	11.5	0.7	166	0	5	Positive
624	TG SIM	TG(52:3) [SIM]	FALSE	874.8	Unit	874.8	Unit	11.3	0.7	166	0	5	Positive
625	TG SIM	TG(52:4) [SIM]	FALSE	872.8	Unit	872.8	Unit	11.2	0.7	166	0	5	Positive
626	TG SIM	TG(52:5) [SIM]	FALSE	870.8	Unit	870.8	Unit	11.0	0.7	166	0	5	Positive
627	TG SIM	TG(53:2) [SIM]	FALSE	890.8	Unit	890.8	Unit	11.5	0.7	166	0	5	Positive
628	TG SIM	TG(54:0) [SIM]	FALSE	908.8	Unit	908.8	Unit	12.0	0.7	166	0	5	Positive
629	TG SIM	TG(54:1) [SIM]	FALSE	906.8	Unit	906.8	Unit	11.9	0.7	166	0	5	Positive
630	TG SIM	TG(54:2) [SIM]	FALSE	904.8	Unit	904.8	Unit	11.7	0.7	166	0	5	Positive
631	TG SIM	TG(54:3) [SIM]	FALSE	902.8	Unit	902.8	Unit	11.5	0.7	166	0	5	Positive
632	TG SIM	TG(54:4) [SIM]	FALSE	900.8	Unit	900.8	Unit	11.3	0.7	166	0	5	Positive
633	TG SIM	TG(54:5) [SIM]	FALSE	898.8	Unit	898.8	Unit	11.2	0.7	166	0	5	Positive
634	TG SIM	TG(54:6) [SIM]	FALSE	896.8	Unit	896.8	Unit	11.1	0.7	166	0	5	Positive
635	TG SIM	TG(54:7) [SIM]	FALSE	894.8	Unit	894.8	Unit	11.0	0.7	166	0	5	Positive
636	TG SIM	TG(56:6) [SIM]	FALSE	924.8	Unit	924.8	Unit	11.3	0.7	166	0	5	Positive
637	TG SIM	TG(56:7) [SIM]	FALSE	922.8	Unit	922.8	Unit	11.2	0.7	166	0	5	Positive
638	TG SIM	TG(56:8) [SIM]	FALSE	920.8	Unit	920.8	Unit	11.1	0.7	166	0	5	Positive
639	TG SIM	TG(56:9) [SIM]	FALSE	918.8	Unit	918.8	Unit	10.9	0.7	166	0	5	Positive
640	TG SIM	TG(58:10) [SIM]	FALSE	944.9	Unit	944.9	Unit	11.0	0.7	166	0	5	Positive

化合物 番号	化合物 グループ	化合物名	ISTD?	プリカーサ イオン	MS1 Res	プロダクト イオン	MS2 Res	リテンション タイム (分)	デルタ RT	Frag.	コリジョン エネルギー	セル加速 電圧	極性
641	TG SIM	TG(O-50:1) [SIM]	FALSE	836.8	Unit	836.8	Unit	11.8	0.7	166	0	5	Positive
642	TG SIM	TG(O-50:2) [SIM]	FALSE	834.8	Unit	834.8	Unit	11.6	0.7	166	0	5	Positive
643	TG SIM	TG(O-52:1) [SIM]	FALSE	864.8	Unit	864.8	Unit	12.0	0.7	166	0	5	Positive
644	TG SIM	TG(O-52:2) [SIM]	FALSE	862.8	Unit	862.8	Unit	11.8	0.7	166	0	5	Positive
645	TG SIM	TG(O-54:2) [SIM]	FALSE	890.8	Unit	890.8	Unit	12.0	0.7	166	0	5	Positive
646	TG (O)	TG(O-50:1) [NL-15:0]	FALSE	836.8	Unit	577.5	Unit	11.8	0.7	166	25	5	Positive
647	TG (O)	TG(O-50:1) [NL-16:0]	FALSE	836.8	Unit	563.5	Unit	11.8	0.7	166	25	5	Positive
648	TG (O)	TG(O-50:1) [NL-17:1]	FALSE	836.8	Unit	551.5	Unit	11.8	0.7	166	25	5	Positive
649	TG (O)	TG(O-50:1) [NL-18:1]	FALSE	836.8	Unit	537.5	Unit	11.8	0.7	166	25	5	Positive
650	TG (O)	TG(O-50:2) [NL-16:1]	FALSE	834.8	Unit	563.5	Unit	11.6	0.7	166	25	5	Positive
651	TG (O)	TG(O-50:2) [NL-18:1]	FALSE	834.8	Unit	535.5	Unit	11.6	0.7	166	25	5	Positive
652	TG (O)	TG(O-50:2) [NL-18:2]	FALSE	834.8	Unit	537.5	Unit	11.6	0.7	166	25	5	Positive
653	TG (O)	TG(O-52:0) [NL-16:0]	FALSE	866.8	Unit	593.5	Unit	12.2	0.7	166	25	5	Positive
654	TG (O)	TG(O-52:1) [NL-16:0]	FALSE	864.8	Unit	591.5	Unit	12.0	0.7	166	25	5	Positive
655	TG (O)	TG(O-52:1) [NL-18:1]	FALSE	864.8	Unit	565.5	Unit	12.0	0.7	166	25	5	Positive
656	TG (O)	TG(O-52:2) [NL-16:0]	FALSE	862.8	Unit	589.5	Unit	11.8	0.7	166	25	5	Positive
657	TG (O)	TG(O-52:2) [NL-17:1]	FALSE	862.8	Unit	577.5	Unit	11.8	0.7	166	25	5	Positive
658	TG (O)	TG(O-52:2) [NL-18:1]	FALSE	862.8	Unit	563.5	Unit	11.8	0.7	166	25	5	Positive
659	TG (O)	TG(O-54:2) [NL-17:1]	FALSE	890.8	Unit	605.5	Unit	12.0	0.7	166	25	5	Positive
660	TG (O)	TG(O-54:2) [NL-18:1]	FALSE	890.8	Unit	591.5	Unit	12.0	0.7	166	25	5	Positive
661	TG (O)	TG(O-54:3) [NL-17:1]	FALSE	888.8	Unit	603.5	Unit	11.8	0.7	166	25	5	Positive
662	TG (O)	TG(O-54:3) [NL-18:1]	FALSE	888.8	Unit	589.5	Unit	11.8	0.7	166	25	5	Positive
663	TG (O)	TG(O-54:4) [NL-17:1]	FALSE	886.8	Unit	601.5	Unit	11.6	0.7	166	25	5	Positive
664	TG (O)	TG(O-54:4) [NL-18:2]	FALSE	886.8	Unit	589.5	Unit	11.6	0.7	166	25	5	Positive
665	Ubiquinone	Ubiquinone	FALSE	880.7	Unit	197	Unit	11.0	0.4	166	17	5	Positive

¹一部のトランジションでは、積分時に分離される複数のピークのモニタリングが可能になるため、ここでのトランジションの数は脂質種の最終リストよりも少なくなります。

表 A2. 各脂質種の推奨参照化合物、および応答係数と %CV 値

化合物名	トランジション	タイムリファレンス化合物	ISTD 化合物	応答係数	%CV ¹	% バックグラウンド ²
AC(10:0)	316.3 → 85.1	AcylCarnitine 16:0 d3 (IS) [reference]	AC(16:0) d3	1	7.2	<1
AC(12:0)	344.3 → 85.1	AC(12:0) [reference]	AC(16:0) d3	1	2.7	<1
AC(12:1)	342.3 → 85.1	AcylCarnitine 16:0 d3 (IS) [reference]	AC(16:0) d3	1	5.4	<1
AC(13:0)	358.3 → 85.1	AC(12:0) [reference]	AC(16:0) d3	1	1.8	1.16
AC(14:0)	372.3 → 85.1	AcylCarnitine 16:0 d3 (IS) [reference]	AC(16:0) d3	1	1.7	2.02
AC(14:0)-OH	388.3 → 85.1	AcylCarnitine 16:0 d3 (IS) [reference]	AC(16:0) d3	1	4.0	1.38
AC(14:1)	370.3 → 85.1	AcylCarnitine 16:0 d3 (IS) [reference]	AC(16:0) d3	1	2.6	<1
AC(14:1)-OH	386.3 → 85.1	AcylCarnitine 16:0 d3 (IS) [reference]	AC(16:0) d3	1	5.9	<1
AC(14:2)	368.3 → 85.1	AcylCarnitine 16:0 d3 (IS) [reference]	AC(16:0) d3	1	3.1	<1
AC(15:0) (a)	386.3 → 85.1	AcylCarnitine 16:0 d3 (IS) [reference]	AC(16:0) d3	1	6.2	2.06
AC(15:0) (b)	386.3 → 85.1	AcylCarnitine 16:0 d3 (IS) [reference]	AC(16:0) d3	1	10.3	12.37
AC(16:0)	400.4 → 85.1	AcylCarnitine 16:0 d3 (IS) [reference]	AC(16:0) d3	1	1.6	<1
AC(16:0)-OH	416.4 → 85.1	AcylCarnitine 16:0 d3 (IS) [reference]	AC(16:0) d3	1	7.9	3.41
AC(16:1)	398.3 → 85.1	AcylCarnitine 16:0 d3 (IS) [reference]	AC(16:0) d3	1	2.5	1.29
AC(16:1)-OH	414.3 → 85.1	AcylCarnitine 16:0 d3 (IS) [reference]	AC(16:0) d3	1	6.1	6.41
AC(17:0) (a)	414.4 → 85.1	AcylCarnitine 16:0 d3 (IS) [reference]	AC(16:0) d3	1	6.7	7.62
AC(17:0) (b)	414.4 → 85.1	AcylCarnitine 16:0 d3 (IS) [reference]	AC(16:0) d3	1	6.2	8.87

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

化合物名	トランジション	タイムリファレンス化合物	ISTD 化合物	応答係数	%CV ¹	%バックグラウンド ²
CE(24:5)	744.7 → 369.3	CE 18:0-d6 (IS) [reference]	CE(18:0) d6	0.1	8.1	<1
CE(24:6)	742.7 → 369.3	CE 18:0-d6 (IS) [reference]	CE(18:0) d6	0.1	13.7	<1
Cer(d16:1/16:0)	510.6 → 236.3	Cer(d18:1-d7/18:0) (IS) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	12.6	1.31
Cer(d16:1/18:0)	538.6 → 236.3	Cer(d18:1-d7/18:0) (IS) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	7.5	3.53
Cer(d16:1/20:0)	566.6 → 236.3	Cer(d18:1-d7/18:0) (IS) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	4.2	2.12
Cer(d16:1/22:0)	594.6 → 236.3	Cer(d16:1/22:0) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	14.3	1.33
Cer(d16:1/23:0)	608.6 → 236.3	Cer(d16:1/23:0) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	14.1	1.7
Cer(d16:1/24:0)	622.6 → 236.3	Cer(d16:1/24:0) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	15.3	1.2
Cer(d16:1/24:1)	620.6 → 236.3	Cer(d16:1/24:1) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	14.2	<1
Cer(d17:1/16:0)	524.6 → 250.3	Cer(d18:1-d7/18:0) (IS) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	12.9	7.44
Cer(d17:1/18:0)	552.6 → 250.3	Cer(d18:1-d7/18:0) (IS) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	11.1	28.25
Cer(d17:1/20:0)	580.6 → 250.3	Cer(d18:1-d7/18:0) (IS) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	8.4	8.01
Cer(d17:1/22:0)	608.6 → 250.3	Cer(d17:1/22:0) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	13.5	2.66
Cer(d17:1/23:0)	622.6 → 250.3	Cer(d17:1/23:0) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	16.2	2.04
Cer(d17:1/24:0)	636.6 → 250.3	Cer(d17:1/24:0) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	14.5	2.13
Cer(d17:1/24:1)	634.6 → 250.3	Cer(d17:1/24:1) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	14.2	<1
Cer(d18:1/16:0)	538.5 → 264.3	Cer(d18:1-d7/18:0) (IS) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	3.9	<1
Cer(d18:1/18:0)	566.6 → 264.3	Cer(d18:1-d7/18:0) (IS) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	3.1	1.11
Cer(d18:1/20:0)	594.6 → 264.3	Cer(d18:1/21:0) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	13.7	3.03
Cer(d18:1/21:0)	608.6 → 264.3	Cer(d18:1/21:0) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	14.2	2.95
Cer(d18:1/22:0)	622.6 → 264.3	Cer(d18:1/22:0) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	13.5	<1
Cer(d18:1/23:0)	636.6 → 264.3	Cer(d18:1/23:0) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	13.4	<1
Cer(d18:1/24:0)	650.6 → 264.3	Cer(d18:1/24:0) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	15.9	<1
Cer(d18:1/24:1)	648.6 → 264.3	Cer(d18:1/24:1) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	13.5	<1
Cer(d18:1/26:0)	678.6 → 264.3	Cer(d18:1/26:0) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	17.3	13.36
Cer(d18:2/16:0)	536.5 → 262.3	Cer(d18:1-d7/18:0) (IS) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	9.9	1.09
Cer(d18:2/18:0)	564.6 → 262.3	Cer(d18:1-d7/18:0) (IS) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	7.2	<1
Cer(d18:2/20:0)	592.6 → 262.3	Cer(d18:1-d7/18:0) (IS) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	7.4	<1
Cer(d18:2/22:0)	620.6 → 262.3	Cer(d18:2/22:0) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	14.5	<1
Cer(d18:2/23:0)	634.6 → 262.3	Cer(d18:2/23:0) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	14.4	<1
Cer(d18:2/24:0)	648.6 → 262.3	Cer(d18:2/24:0) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	16.0	<1
Cer(d18:2/24:1)	646.6 → 262.3	Cer(d18:2/24:1) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	14.4	<1
Cer(d18:2/26:0)	676.6 → 262.3	Cer(d18:2/24:0) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	18.2	2.79
Cer(d19:1/18:0)	580.6 → 278.3	Cer(d19:1/20:0) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	13.5	4.15
Cer(d19:1/20:0)	608.6 → 278.3	Cer(d19:1/20:0) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	16.3	13.82
Cer(d19:1/22:0)	636.6 → 278.3	Cer(d19:1/22:0) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	15.2	<1
Cer(d19:1/23:0)	650.6 → 278.3	Cer(d19:1/23:0) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	15.4	<1
Cer(d19:1/24:0)	664.6 → 278.3	Cer(d19:1/24:0) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	16.0	<1
Cer(d19:1/24:1)	662.6 → 278.3	Cer(d19:1/24:1) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	14.8	<1
Cer(d20:1/22:0)	650.6 → 292.3	Cer(d20:1/22:0) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	17.1	8.75
Cer(d20:1/23:0)	664.6 → 292.3	Cer(d20:1/23:0) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	17.0	5.41
Cer(d20:1/24:0)	678.6 → 292.3	Cer(d20:1/24:0) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	16.6	5.37
Cer(d20:1/24:1)	676.6 → 292.3	Cer(d20:1/24:1) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	16.4	1.26
Cer(m18:0/20:0)	580.6 → 268.4	Cer(d18:1-d7/18:0) (IS) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	14.2	3
Cer(m18:0/22:0)	608.6 → 268.4	Cer(d18:1-d7/18:0) (IS) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	15.3	<1
Cer(m18:0/23:0)	622.6 → 268.4	Cer(d18:1-d7/18:0) (IS) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	14.8	1.08
Cer(m18:0/24:0)	636.6 → 268.4	Cer(d18:1-d7/18:0) (IS) [reference]	Cer(d18:1-d7/18:0)	1	15.7	<1

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

化合物名	トランジション	タイムリファレンス化合物	ISTD 化合物	応答係数	%CV ¹	% バックグラウンド ²
FA(14:0)	227.2 → 227.2	FA(22:6) d5 (IS) [reference]	FFA(18:1) d9	1	6.2	67.45
FA(16:0)	255.2 → 255.2	FA(18:1) d9 (IS) [reference]	FFA(18:1) d9	1	2.0	23.4
FA(16:1)	253.2 → 253.2	FA(20:4) d11 (IS) [reference]	FFA(18:1) d9	1	4.8	14.87
FA(17:0)	269.2 → 269.2	FA(18:1) d9 (IS) [reference]	FFA(18:1) d9	1	3.6	79.9
FA(17:1)	267.2 → 267.2	FA(18:1) d9 (IS) [reference]	FFA(18:1) d9	1	2.8	70.54
FA(18:0)	283.3 → 283.3	FA(18:1) d9 (IS) [reference]	FFA(18:1) d9	1	4.5	94.5
FA(18:1)	281.2 → 281.2	FA(18:1) d9 (IS) [reference]	FFA(18:1) d9	1	1.6	2.23
FA(18:2)	279.2 → 279.2	FA(18:1) d9 (IS) [reference]	FFA(18:1) d9	1	3.1	10.48
FA(18:3)	277.2 → 277.2	FA(22:6) d5 (IS) [reference]	FFA(18:1) d9	1	3.8	9.42
FA(20:2)	307.3 → 307.3	FA(18:1) d9 (IS) [reference]	FFA(18:1) d9	1	6.7	73.72
FA(20:3)	305.2 → 305.2	FA(18:1) d9 (IS) [reference]	FFA(18:1) d9	1	3.9	76.41
FA(20:4)	303.2 → 303.2	FA(20:4) d11 (IS) [reference]	FFA(18:1) d9	1	5.1	14.41
FA(20:5)	301.2 → 301.2	FA(22:6) d5 (IS) [reference]	FFA(18:1) d9	1	7.3	26.16
FA(22:4)	331.3 → 331.3	FA(18:1) d9 (IS) [reference]	FFA(18:1) d9	1	4.5	34.32
FA(22:5)	329.2 → 329.2	FA(20:4) d11 (IS) [reference]	FFA(18:1) d9	1	7.8	43.67
FA(22:6)	327.2 → 327.2	FA(22:6) d5 (IS) [reference]	FFA(18:1) d9	1	4.6	26.58
GM3(d18:1/16:0)	1153.7 → 264.3	GM3(d18:1/16:0) [reference]	Hex3Cer(d18:1/17:0)	1	4.2	<1
GM3(d18:1/18:0)	1181.8 → 264.3	GM3(d18:1/16:0) [reference]	Hex3Cer(d18:1/17:0)	1	4.4	<1
GM3(d18:1/20:0)	1209.8 → 264.3	GM3(d18:1/16:0) [reference]	Hex3Cer(d18:1/17:0)	1	7.4	<1
GM3(d18:1/22:0)	1237.8 → 264.3	GM3(d18:1/22:0) [reference]	Hex3Cer(d18:1/17:0)	1	5.6	<1
GM3(d18:1/24:0)	1265.8 → 264.3	GM3(d18:1/24:0) [reference]	Hex3Cer(d18:1/17:0)	1	4.9	<1
GM3(d18:1/24:1)	1263.8 → 264.3	GM3(d18:1/22:0) [reference]	Hex3Cer(d18:1/17:0)	1	5.1	<1
Hex2Cer(d16:1/16:0)	834.6 → 236.3	Hex2Cer(d18:1/15:0) d7 (IS) [reference]	Hex2Cer(d18:1/15:0) d7	1	4.2	<1
Hex2Cer(d16:1/24:1)	944.7 → 236.3	Hex2Cer(d16:1/24:1) [reference]	Hex2Cer(d18:1/15:0) d7	1	8.6	<1
Hex2Cer(d18:1/16:0)	862.6 → 264.3	Hex2Cer(d18:1/16:0) [reference]	Hex2Cer(d18:1/15:0) d7	1	2.4	<1
Hex2Cer(d18:1/20:0)	918.7 → 264.3	Hex2Cer(d18:1/22:0) [reference]	Hex2Cer(d18:1/15:0) d7	1	9.0	<1
Hex2Cer(d18:1/22:0)	946.7 → 264.3	Hex2Cer(d18:1/22:0) [reference]	Hex2Cer(d18:1/15:0) d7	1	3.8	<1
Hex2Cer(d18:1/24:0)	974.8 → 264.3	Hex2Cer(d18:1/24:0) [reference]	Hex2Cer(d18:1/15:0) d7	1	4.4	<1
Hex2Cer(d18:1/24:1)	972.7 → 264.3	Hex2Cer(d18:1/24:1) [reference]	Hex2Cer(d18:1/15:0) d7	1	2.6	<1
Hex2Cer(d18:2/16:0)	860.6 → 262.3	Hex2Cer(d18:1/15:0) d7 (IS) [reference]	Hex2Cer(d18:1/15:0) d7	1	4.6	<1
Hex2Cer(d18:2/24:1)	970.7 → 262.3	Hex2Cer(d18:2/24:1) [reference]	Hex2Cer(d18:1/15:0) d7	1	4.7	<1
Hex3Cer(d18:1/16:0)	1024.7 → 264.3	Hex3Cer(d18:1/17:0) (IS) [reference]	Hex3Cer(d18:1/17:0)	1	4.4	<1
Hex3Cer(d18:1/18:0)	1052.7 → 264.3	Hex3Cer(d18:1/17:0) (IS) [reference]	Hex3Cer(d18:1/17:0)	1	11.2	1.58
Hex3Cer(d18:1/22:0)	1108.8 → 264.3	Hex3Cer(d18:1/17:0) (IS) [reference]	Hex3Cer(d18:1/17:0)	1	5.3	<1
Hex3Cer(d18:1/24:0)	1136.8 → 264.3	Hex3Cer(d18:1/17:0) (IS) [reference]	Hex3Cer(d18:1/17:0)	1	5.3	<1
Hex3Cer(d18:1/24:1)	1134.8 → 264.3	Hex3Cer(d18:1/17:0) (IS) [reference]	Hex3Cer(d18:1/17:0)	1	5.1	<1
HexCer(d16:1/18:0)	700.6 → 236.3	HexCer(d16:1/20:0) [reference]	HexCer(d18:1/15:0) d7	1	16.7	3.78
HexCer(d16:1/20:0)	728.6 → 236.3	HexCer(d16:1/20:0) [reference]	HexCer(d18:1/15:0) d7	1	9.8	2.88
HexCer(d16:1/22:0)	756.7 → 236.3	HexCer(d16:1/24:0) [reference]	HexCer(d18:1/15:0) d7	1	6.8	<1
HexCer(d16:1/24:0)	784.7 → 236.3	HexCer(d16:1/24:0) [reference]	HexCer(d18:1/15:0) d7	1	6.2	<1
HexCer(d18:1/16:0)	700.6 → 264.3	HexCer(d18:1/16:0) [reference]	HexCer(d18:1/15:0) d7	1	8.6	<1
HexCer(d18:1/18:0)	728.6 → 264.3	HexCer(d18:1/18:0) [reference]	HexCer(d18:1/15:0) d7	1	6.9	<1
HexCer(d18:1/20:0)	756.6 → 264.3	HexCer(d18:1/20:0) [reference]	HexCer(d18:1/15:0) d7	1	7.2	<1
HexCer(d18:1/22:0)	784.7 → 264.3	HexCer(d18:1/22:0) [reference]	HexCer(d18:1/15:0) d7	1	2.5	<1
HexCer(d18:1/24:0)	812.7 → 264.3	HexCer(d18:1/24:0) [reference]	HexCer(d18:1/15:0) d7	1	3.5	<1
HexCer(d18:1/24:1)	810.7 → 264.3	HexCer(d18:1/24:1) [reference]	HexCer(d18:1/15:0) d7	1	2.6	<1
HexCer(d18:2/20:0)	754.6 → 262.3	HexCer(d18:2/20:0) [reference]	HexCer(d18:1/15:0) d7	1	13.0	1.36

化合物名	トランジション	タイムリファレンス化合物	ISTD 化合物	応答係数	%CV ¹	% バックグラウンド ²
HexCer(d18:2/22:0)	782.7 → 262.3	HexCer(d18:2/20:0) [reference]	HexCer(d18:1/15:0) d7	1	7.1	<1
HexCer(d18:2/24:0)	810.7 → 262.3	HexCer(d18:2/24:0) [reference]	HexCer(d18:1/15:0) d7	1	4.2	<1
LPC(14:0) [sn1]	468.3 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	2.0	<1
LPC(14:0) [sn2]	468.3 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	3.5	<1
LPC(15:0) [sn1]	482.3 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	1.9	17.68
LPC(15:0) [sn2]	482.3 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	3.7	<1
LPC(15-MHDA) [sn1] / LPC(17:0) [sn2]	510.4 → 184.1	LPC(O-16:0) [reference]	LPC(18:1) d7	1	2.1	<1
LPC(15-MHDA) [sn1] [104_sn1]	510.4 → 104.1	LPC(O-16:0) [reference]	LPC(18:1) d7	1	3.0	<1
LPC(15-MHDA) [sn2]	510.4 → 184.1	LPC(O-16:0) [reference]	LPC(18:1) d7	1	3.7	<1
LPC(16:0) [sn1]	496.3 → 184.1	LPC(O-16:0) [reference]	LPC(18:1) d7	1	1.8	<1
LPC(16:0) [sn2]	496.3 → 184.1	LPC(O-16:0) [reference]	LPC(18:1) d7	1	2.1	<1
LPC(16:1) [sn1]	494.3 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	1.5	<1
LPC(16:1) [sn2]	494.3 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	4.4	<1
LPC(17:0) [sn1]	510.4 → 184.1	LPC(O-16:0) [reference]	LPC(18:1) d7	1	2.1	<1
LPC(17:1) (a) [sn1] [104_sn1]	508.4 → 104.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	3.3	<1
LPC(17:1) [sn1] (a) / LPC(17:1) [sn2] (b)	508.4 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	2.3	<1
LPC(17:1) [sn1] (b)	508.4 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	4.8	2.07
LPC(17:1) [sn2] (a)	508.4 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	5.6	<1
LPC(18:0) [sn1]	524.4 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	2.0	<1
LPC(18:0) [sn2]	524.4 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	2.8	<1
LPC(18:1) [sn1]	522.4 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	1.5	<1
LPC(18:1) [sn2]	522.4 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	1.9	<1
LPC(18:2) [+OH]	536.3 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	8.8	4.8
LPC(18:2) [sn1]	520.3 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	1.7	<1
LPC(18:2) [sn2]	520.3 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	3.6	<1
LPC(18:3) (a) [sn1] [104_sn1]	518.3 → 104.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	4.8	<1
LPC(18:3) [sn1] (a)/LPC(18:3) [sn2] (b)	518.3 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	3.4	<1
LPC(18:3) [sn1] (b)	518.3 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	3.7	<1
LPC(18:3) [sn2] (a)	518.3 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	5.3	<1
LPC(19:0) (a) [sn1] [104_sn1]	538.4 → 104.1	LPC(O-16:0) [reference]	LPC(18:1) d7	1	5.9	<1
LPC(19:0) [sn1] (a) / LPC(19:0) [sn2] (b)	538.4 → 184.1	LPC(O-16:0) [reference]	LPC(18:1) d7	1	4.3	1.21
LPC(19:0) [sn1] (b)	538.4 → 184.1	LPC(O-16:0) [reference]	LPC(18:1) d7	1	3.9	<1
LPC(19:0) [sn2] (a)	538.4 → 184.1	LPC(O-16:0) [reference]	LPC(18:1) d7	1	6.9	6.16
LPC(19:1) (a)	536.4 → 184.1	LPC(O-16:0) [reference]	LPC(18:1) d7	1	10.0	4.92
LPC(19:1) (b)	536.4 → 184.1	LPC(O-16:0) [reference]	LPC(18:1) d7	1	4.4	2.96
LPC(19:1) (c)	536.4 → 184.1	LPC(O-16:0) [reference]	LPC(18:1) d7	1	9.0	28.49
LPC(20:0) [sn1]	552.4 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	4.5	<1
LPC(20:0) [sn2]	552.4 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	4.8	2.53
LPC(20:1) [sn1]	550.4 → 184.1	LPC(O-16:0) [reference]	LPC(18:1) d7	1	4.1	<1
LPC(20:1) [sn2]	550.4 → 184.1	LPC(O-16:0) [reference]	LPC(18:1) d7	1	4.1	1
LPC(20:2) [sn1]	548.4 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	2.8	<1
LPC(20:2) [sn2]	548.4 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	4.1	<1
LPC(20:3) [sn1]	546.4 → 184.1	LPC(O-16:0) [reference]	LPC(18:1) d7	1	2.4	<1
LPC(20:3) [sn2]	546.4 → 184.1	LPC(O-16:0) [reference]	LPC(18:1) d7	1	3.3	<1
LPC(20:4) [+OH]	560.3 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	15.4	25.83
LPC(20:4) [sn1]	544.3 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	3.3	<1
LPC(20:4) [sn2]	544.3 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	4.0	<1

化合物名	トランジション	タイムリファレンス化合物	ISTD 化合物	応答係数	%CV ¹	% バックグラウンド ²
LPC(20:5) [sn1]	542.3 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	4.3	<1
LPC(20:5) [sn2]	542.3 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	5.6	<1
LPC(22:0) [sn1]	580.4 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	8.0	<1
LPC(22:0) [sn2]	580.4 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	8.6	<1
LPC(22:1) [sn1]	578.4 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	5.8	3.53
LPC(22:1) [sn2]	578.4 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	8.3	15.86
LPC(22:4) [sn1]	572.4 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	4.7	<1
LPC(22:4) [sn2]	572.4 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	5.5	<1
LPC(22:5) (n3) [sn1] [104_sn1]	570.4 → 104.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	3.3	<1
LPC(22:5) [sn1] (n3)/LPC(22:5) [sn2] (n6)	570.4 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	3.0	<1
LPC(22:5) [sn1] (n6)	570.4 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	4.8	<1
LPC(22:5) [sn2] (n3)	570.4 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	4.0	<1
LPC(22:6) [sn1]	568.3 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	3.8	<1
LPC(22:6) [sn2]	568.3 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	5.0	<1
LPC(22:6) [+OH]	584.3 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	38.1	53.47
LPC(24:0) [sn1]	608.5 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	6.9	<1
LPC(24:0) [sn2]	608.5 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	8.0	<1
LPC(26:0) [sn1]	636.5 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	6.4	43.83
LPC(26:0) [sn2]	636.5 → 184.1	LPC(18:1) d7 (IS) [reference]	LPC(18:1) d7	1	7.3	51.49
LPC(O-16:0)	482.4 → 104.1	LPC(O-16:0) [reference]	LPC(18:1) d7	1	2.1	<1
LPC(O-18:0)	510.4 → 104.1	LPC(O-16:0) [reference]	LPC(18:1) d7	1	3.5	<1
LPC(O-18:1)	508.4 → 104.1	LPC(O-16:0) [reference]	LPC(18:1) d7	1	2.4	<1
LPC(O-20:0)	538.4 → 104.1	LPC(O-16:0) [reference]	LPC(18:1) d7	1	6.3	<1
LPC(O-20:1)	536.4 → 104.1	LPC(O-16:0) [reference]	LPC(18:1) d7	1	4.3	<1
LPC(O-22:0)	566.5 → 104.1	LPC(O-16:0) [reference]	LPC(18:1) d7	1	5.8	<1
LPC(O-22:1)	564.4 → 104.1	LPC(O-16:0) [reference]	LPC(18:1) d7	1	7.1	<1
LPC(O-24:0)	594.5 → 104.1	LPC(O-16:0) [reference]	LPC(18:1) d7	1	4.4	<1
LPC(O-24:1)	592.5 → 104.1	LPC(O-16:0) [reference]	LPC(18:1) d7	1	5.6	1.54
LPC(O-24:2)	590.5 → 104.1	LPC(O-16:0) [reference]	LPC(18:1) d7	1	7.9	<1
LPC(P-16:0)	480.3 → 104.1	LPC(O-16:0) [reference]	LPC(18:1) d7	1	2.2	<1
LPC(P-17:0) (a)	494.3 → 104.1	LPC(O-16:0) [reference]	LPC(18:1) d7	1	5.3	3.84
LPC(P-17:0) (b)	494.3 → 104.1	LPC(O-16:0) [reference]	LPC(18:1) d7	1	6.7	8.79
LPC(P-18:0)	508.3 → 104.1	LPC(P-18:0) [reference]	LPC(18:1) d7	1	5.1	<1
LPC(P-18:1)	506.3 → 104.1	LPC(P-18:1) [reference]	LPC(18:1) d7	1	4.6	<1
LPC(P-20:0)	536.3 → 104.1	LPC(P-18:1) [reference]	LPC(18:1) d7	1	11.3	<1
LPE(16:0) [sn1]	454.3 → 313.3	LPE(18:1) d7 (IS) [reference]	LPE(18:1) d7	1	5.5	<1
LPE(16:0) [sn2]	454.3 → 313.3	LPE(18:1) d7 (IS) [reference]	LPE(18:1) d7	1	5.1	<1
LPE(17:0)	468.3 → 327.3	LPE(18:1) d7 (IS) [reference]	LPE(18:1) d7	1	22.8	7.3
LPE(18:0) [sn1]	482.3 → 341.3	LPE(18:1) d7 (IS) [reference]	LPE(18:1) d7	1	3.6	<1
LPE(18:0) [sn2]	482.3 → 341.3	LPE(18:1) d7 (IS) [reference]	LPE(18:1) d7	1	5.3	<1
LPE(18:1) [sn1]	480.3 → 339.3	LPE(18:1) d7 (IS) [reference]	LPE(18:1) d7	1	5.0	<1
LPE(18:1) [sn2]	480.3 → 339.3	LPE(18:1) d7 (IS) [reference]	LPE(18:1) d7	1	5.6	<1
LPE(18:2) [sn1]	478.3 → 337.3	LPE(18:1) d7 (IS) [reference]	LPE(18:1) d7	1	3.9	<1
LPE(18:2) [sn2]	478.3 → 337.3	LPE(18:1) d7 (IS) [reference]	LPE(18:1) d7	1	5.0	<1
LPE(20:4) [sn1]	502.3 → 361.3	LPE(18:1) d7 (IS) [reference]	LPE(18:1) d7	1	5.3	<1
LPE(20:4) [sn2]	502.3 → 361.3	LPE(18:1) d7 (IS) [reference]	LPE(18:1) d7	1	6.1	<1
LPE(22:6) [sn1]	526.3 → 385.3	LPE(18:1) d7 (IS) [reference]	LPE(18:1) d7	1	5.0	<1

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

化合物名	トランジション	タイムリファレンス化合物	ISTD 化合物	応答係数	%CV ¹	%バックグラウンド ²
PC(17:0_18:2)	772.6 → 184.1	PC(16:0_18:1) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	2.6	<1
PC(17:0_20:4)	796.6 → 184.1	PC(16:0_18:2) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	2.2	<1
PC(17:0_22:6)	820.6 → 184.1	PC(18:0_22:6) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	2.0	<1
PC(17:1_18:2)	770.6 → 184.1	PC(33:2) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	2.3	<1
PC(18:0_18:1)	788.6 → 184.1	PC(18:0_18:1) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	1.6	<1
PC(18:0_18:2)	786.6 → 184.1	PC(16:0_18:1) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	3.3	<1
PC(18:0_20:3)	812.6 → 184.1	PC(18:0_18:1) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	1.8	<1
PC(18:0_20:4)	810.6 → 184.1	PC(18:0_20:4) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	2.0	<1
PC(18:0_22:4)	838.6 → 184.1	PC(15:0_18:1) d7 (IS) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	1.6	<1
PC(18:0_22:5) (n3)/PC(20:1_20:4)	836.6 → 184.1	PC(15:0_18:1) d7 (IS) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	1.8	<1
PC(18:0_22:5) (n6)	836.6 → 184.1	PC(15:0_18:1) d7 (IS) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	2.1	<1
PC(18:0_22:6)	834.6 → 184.1	PC(18:0_22:6) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	1.6	<1
PC(18:1_18:1)	786.6 → 184.1	PC(16:0_18:1) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	3.3	<1
PC(18:1_18:2)	784.6 → 184.1	PC(33:1) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	1.9	<1
PC(18:1_20:3)	810.6 → 184.1	PC(18:0_20:4) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	1.6	<1
PC(18:1_22:6) (a)	832.6 → 184.1	PC(18:0_22:6) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	1.6	<1
PC(18:1_22:6) (b)	832.6 → 184.1	PC(18:0_22:6) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	3.9	<1
PC(18:2_18:2)	782.6 → 184.1	PC(33:2) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	3.7	<1
PC(18:2_20:5)	804.6 → 184.1	PC(15:0_22:6) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	2.0	<1
PC(20:0_20:4)	838.6 → 184.1	PC(15:0_18:1) d7 (IS) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	3.1	<1
PC(28:0)	678.5 → 184.1	PC(28:0) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	3.5	<1
PC(31:0) (a)	720.6 → 184.1	PC(16:0_18:1) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	2.0	<1
PC(31:0) (b)	720.6 → 184.1	PC(16:0_18:1) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	2.9	<1
PC(31:1)	718.5 → 184.1	PC(14:0_16:0) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	2.4	<1
PC(32:1)	732.6 → 184.1	PC(16:0_16:0) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	1.6	<1
PC(32:2)	730.5 → 184.1	PC(32:2) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	1.8	<1
PC(33:0) (a)	748.6 → 184.1	PC(16:0_18:1) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	1.7	<1
PC(33:0) (b)	748.6 → 184.1	PC(16:0_18:1) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	2.6	<1
PC(33:1)	746.6 → 184.1	PC(33:1) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	1.7	<1
PC(33:2)	744.6 → 184.1	PC(33:2) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	2.8	<1
PC(34:2) [+OH]	774.6 → 184.1	PC(15:0_18:1) d7 (IS) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	50.5	<1
PC(34:5)	752.5 → 184.1	PC(34:5) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	3.6	<1
PC(35:5)	766.5 → 184.1	PC(15:0_20:4) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	3.1	<1
PC(36:4) [+OH]	798.6 → 184.1	PC(15:0_18:1) d7 (IS) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	4.2	<1
PC(36:6) (a)	778.5 → 184.1	PC(15:0_22:6) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	3.0	<1
PC(38:2)	814.6 → 184.1	PC(18:0_18:1) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	2.4	2.16
PC(38:4) (b)	810.6 → 184.1	PC(18:0_20:4) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	1.8	<1
PC(38:5) (a)	808.6 → 184.1	PC(15:0_22:6) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	2.2	<1
PC(38:5) (b)	808.6 → 184.1	PC(15:0_22:6) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	1.8	<1
PC(38:6) (a)	806.6 → 184.1	PC(15:0_22:6) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	1.4	<1
PC(38:6) [+OH]	822.6 → 184.1	PC(18:0_20:4) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	4.3	<1
PC(38:7) (c)	804.6 → 184.1	PC(15:0_22:6) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	3.3	<1
PC(39:5) (a)	822.6 → 184.1	PC(18:0_22:6) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	3.1	<1
PC(39:5) (b)	822.6 → 184.1	PC(18:0_22:6) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	1.9	<1
PC(40:7) (a)	832.6 → 184.1	PC(18:0_22:6) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	2.7	<1
PC(40:8)	830.6 → 184.1	PC(16:0_18:2) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	2.5	<1
PC(42:10)	854.5 → 184.1	PC(34:5) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	3.0	<1

化合物名	トランジション	タイムリファレンス化合物	ISTD 化合物	応答係数	%CV ¹	% バックグラウンド ²
PC(O-16:0/16:0)	720.6 → 184.1	PC(O-16:0/16:0) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	2.7	<1
PC(O-16:0/20:3)	770.6 → 184.1	PC(O-38:5) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	2.1	<1
PC(O-16:0/20:4)	768.6 → 184.1	PC(O-38:5) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	1.6	<1
PC(O-16:0/22:6)	792.6 → 184.1	PC(O-38:5) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	1.6	<1
PC(O-18:0/18:1)	774.6 → 184.1	PC(O-36:0) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	4.6	<1
PC(O-18:0/18:2)	772.6 → 184.1	PC(O-34:1) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	2.3	<1
PC(O-18:0/20:4)	796.6 → 184.1	PC(O-38:5) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	2.4	<1
PC(O-18:0/22:6)	820.6 → 184.1	PC(O-38:5) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	2.6	<1
PC(O-18:1/18:1)	772.6 → 184.1	PC(O-34:1) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	2.6	<1
PC(O-18:1/18:2)	770.6 → 184.1	PC(O-38:5) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	1.6	<1
PC(O-32:1)	718.5 → 184.1	PC(O-16:0/16:0) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	2.8	<1
PC(O-32:2)	716.6 → 184.1	PC(16:0_18:2) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	2.5	1.55
PC(O-34:1)	746.6 → 184.1	PC(O-34:1) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	2.0	<1
PC(O-34:2)	744.6 → 184.1	PC(O-34:1) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	1.7	<1
PC(O-34:4)	740.6 → 184.1	PC(O-34:1) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	2.8	2.57
PC(O-35:4)	754.5 → 184.1	PC(O-34:1) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	1.9	93.31
PC(O-36:0)	776.6 → 184.1	PC(O-36:0) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	3.7	<1
PC(O-36:5)	766.5 → 184.1	PC(O-38:5) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	1.9	<1
PC(O-38:5)	794.6 → 184.1	PC(O-38:5) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	1.9	<1
PC(O-40:5)	822.6 → 184.1	PC(O-38:5) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	2.1	<1
PC(O-40:7)	818.6 → 184.1	PC(O-38:5) [reference]	PC(15:0_18:1) d7	1	2.4	<1
PC(P-15:0/20:4) (a)	752.6 → 184.1	PC(P-16:0/22:6) [reference]	PC(P-18:0/18:1) d9	1	4.5	2.73
PC(P-15:0/20:4) (b)	752.6 → 184.1	PC(P-16:0/22:6) [reference]	PC(P-18:0/18:1) d9	1	4.9	7.07
PC(P-16:0/14:0)	690.4 → 184.1	PC(P-16:0/18:1) [reference]	PC(P-18:0/18:1) d9	1	4.0	<1
PC(P-16:0/16:0)	718.5 → 184.1	PC(P-16:0/18:1) [reference]	PC(P-18:0/18:1) d9	1	3.3	<1
PC(P-16:0/16:1)	716.6 → 184.1	PC(P-16:0/18:1) [reference]	PC(P-18:0/18:1) d9	1	2.6	<1
PC(P-16:0/18:0)	746.6 → 184.1	PC(P-18:0/18:1) d9 (IS) [reference]	PC(P-18:0/18:1) d9	1	2.7	3.56
PC(P-16:0/18:1)	744.6 → 184.1	PC(P-16:0/18:1) [reference]	PC(P-18:0/18:1) d9	1	1.2	<1
PC(P-16:0/18:2)	742.5 → 184.1	PC(P-16:0/18:1) [reference]	PC(P-18:0/18:1) d9	1	3.4	<1
PC(P-16:0/18:3)	740.6 → 184.1	PC(P-16:0/20:4) [reference]	PC(P-18:0/18:1) d9	1	3.1	1.53
PC(P-16:0/20:4)	766.5 → 184.1	PC(P-16:0/20:4) [reference]	PC(P-18:0/18:1) d9	1	2.4	<1
PC(P-16:0/20:5)	764.6 → 184.1	PC(P-16:0/20:4) [reference]	PC(P-18:0/18:1) d9	1	3.3	<1
PC(P-16:0/22:6)	790.6 → 184.1	PC(P-16:0/22:6) [reference]	PC(P-18:0/18:1) d9	1	3.5	<1
PC(P-17:0/20:4) (a)	780.5 → 184.1	PC(P-16:0/20:4) [reference]	PC(P-18:0/18:1) d9	1	3.2	<1
PC(P-17:0/20:4) (b)	780.5 → 184.1	PC(P-16:0/20:4) [reference]	PC(P-18:0/18:1) d9	1	3.8	<1
PC(P-18:0/18:2)	770.6 → 184.1	PC(P-16:0/18:1) [reference]	PC(P-18:0/18:1) d9	1	1.4	<1
PC(P-18:0/20:4)	794.6 → 184.1	PC(P-16:0/20:4) [reference]	PC(P-18:0/18:1) d9	1	1.4	<1
PC(P-18:0/22:5)	820.6 → 184.1	PC(P-16:0/22:6) [reference]	PC(P-18:0/18:1) d9	1	1.8	<1
PC(P-18:0/22:6)	818.6 → 184.1	PC(P-16:0/22:6) [reference]	PC(P-18:0/18:1) d9	1	2.9	<1
PC(P-18:1/18:1)	770.6 → 184.1	PC(P-16:0/18:1) [reference]	PC(P-18:0/18:1) d9	1	2.1	<1
PC(P-18:1/22:6)	816.6 → 184.1	PC(P-16:0/22:6) [reference]	PC(P-18:0/18:1) d9	1	5.8	1.18
PC(P-20:0/20:4)	822.6 → 184.1	PC(P-18:0/18:1) d9 (IS) [reference]	PC(P-18:0/18:1) d9	1	2.6	1.89
PC(P-35:2) (a)	756.6 → 184.1	PC(P-16:0/18:1) [reference]	PC(P-18:0/18:1) d9	1	2.9	<1
PC(P-35:2) (b)	756.6 → 184.1	PC(P-16:0/18:1) [reference]	PC(P-18:0/18:1) d9	1	3.0	<1
PC(P-36:3)	768.5 → 184.1	PC(P-16:0/20:4) [reference]	PC(P-18:0/18:1) d9	1	2.1	<1
PC(P-38:5) (a)	792.6 → 184.1	PC(P-16:0/22:6) [reference]	PC(P-18:0/18:1) d9	1	3.1	<1
PC(P-38:5) (b)	792.6 → 184.1	PC(P-16:0/22:6) [reference]	PC(P-18:0/18:1) d9	1	2.2	<1

化合物名	トランジション	タイムリファレンス化合物	ISTD 化合物	応答係数	%CV ¹	% バックグラウンド ²
PE(15-MHDA_18:1)	732.6 → 591.5	PE(16:0_18:1) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	12.8	17.5
PE(15-MHDA_18:2)	730.5 → 589.5	PE(16:0_18:1) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	9.1	<1
PE(15-MHDA_20:4)	754.6 → 613.5	PE(16:0_18:1) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	11.1	<1
PE(15-MHDA_22:6)	778.5 → 637.5	PE(16:0_22:6) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	9.4	<1
PE(16:0_16:0)	692.5 → 551.5	PE(16:0_18:1) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	17.5	<1
PE(16:0_16:1)	690.5 → 549.5	PE(16:0_16:1) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	8.9	<1
PE(16:0_18:1)	718.5 → 577.5	PE(16:0_18:1) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	2.5	<1
PE(16:0_18:2)	716.5 → 575.5	PE(16:0_18:2) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	2.5	<1
PE(16:0_18:3) (a)	714.5 → 573.5	PE(16:0_18:2) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	7.0	1.14
PE(16:0_18:3) (b)	714.5 → 573.5	PE(16:0_18:2) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	6.9	<1
PE(16:0_20:3)	742.5 → 601.5	PE(16:0_18:1) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	2.7	<1
PE(16:0_20:4)	740.5 → 599.5	PE(18:0_20:4) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	1.5	<1
PE(16:0_20:5)	738.5 → 597.5	PE(16:0_16:1) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	4.3	<1
PE(16:0_22:6)	764.5 → 623.5	PE(16:0_22:6) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	5.8	<1
PE(16:1_18:2)	714.5 → 573.5	PE(16:0_18:2) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	10.5	<1
PE(16:1_20:4)	738.5 → 597.5	PE(16:0_16:1) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	7.3	<1
PE(17:0_18:1)	732.6 → 591.5	PE(16:0_18:1) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	11.0	<1
PE(17:0_18:2)	730.5 → 589.5	PE(16:0_18:1) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	8.0	1.13
PE(17:0_20:4)	754.6 → 613.5	PE(16:0_18:1) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	5.0	<1
PE(17:0_22:6)	778.5 → 637.5	PE(16:0_22:6) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	9.1	2.42
PE(18:0_18:1)	746.6 → 605.6	PE(18:0_18:1) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	2.0	<1
PE(18:0_18:2)	744.6 → 603.5	PE(16:0_18:1) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	1.5	<1
PE(18:0_20:3) (a)	770.6 → 629.6	PE(18:0_18:1) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	2.3	<1
PE(18:0_20:3) (b)	770.6 → 629.6	PE(18:0_18:1) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	4.3	<1
PE(18:0_20:4)	768.6 → 627.5	PE(18:0_20:4) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	1.4	<1
PE(18:0_22:4)	796.6 → 655.6	PE(18:0_18:1) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	4.5	<1
PE(18:0_22:5) (n3)	794.6 → 653.6	PE(18:0_18:1) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	2.5	<1
PE(18:0_22:5) (n6)	794.6 → 653.6	PE(18:0_18:1) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	3.8	<1
PE(18:0_22:6)	792.6 → 651.5	PE(18:0_22:6) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	2.9	<1
PE(18:1_18:1)	744.6 → 603.5	PE(16:0_18:1) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	5.8	<1
PE(18:1_18:2)	742.5 → 601.5	PE(16:0_18:1) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	3.0	<1
PE(18:1_22:6) (a)	790.5 → 649.5	PE(18:0_22:6) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	4.2	1.05
PE(18:1_22:6) (b)	790.5 → 649.5	PE(18:0_22:6) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	7.9	1.59
PE(20:0_20:4)	796.6 → 655.6	PE(18:0_18:1) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	7.8	<1
PE(38:5) (a)	766.5 → 625.5	PE(18:0_20:4) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	3.2	<1
PE(38:5) (b)	766.5 → 625.5	PE(18:0_20:4) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	2.7	<1
PE(O-16:0/18:2)	702.5 → 561.5	PE(O-34:1) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	4.6	<1
PE(O-16:0/20:3)	728.6 → 587.5	PE(18:0_22:6) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	6.9	<1
PE(O-16:0/20:4)	726.5 → 585.5	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	2.5	<1
PE(O-16:0/22:4)	754.6 → 613.6	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	5.1	8.97
PE(O-16:0/22:6)	750.6 → 609.5	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	2.5	<1
PE(O-18:0/20:4)	754.6 → 613.6	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	2.7	<1
PE(O-18:0/22:5)	780.6 → 639.6	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	5.1	<1
PE(O-18:0/22:6)	778.5 → 637.5	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	3.1	<1
PE(O-18:1/18:2)	728.6 → 587.5	PE(18:0_22:6) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	4.5	<1
PE(O-18:1/22:6)	776.6 → 635.5	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	2.9	<1
PE(O-34:1)	704.6 → 563.5	PE(O-34:1) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	3.1	<1

化合物名	トランジション	タイムリファレンス化合物	ISTD 化合物	応答係数	%CV ¹	%バックグラウンド ²
PE(O-36:5)	724.5 → 583.5	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	6.5	1.71
PE(O-38:5) (a)	752.6 → 611.5	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	3.0	<1
PE(O-38:5) (b)	752.6 → 611.5	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(15:0_18:1) d7	1	4.7	1.69
PE(P-15:0/22:6)	734.5 → 385.3	PE(P-16:0/18:2) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	12.0	<1
PE(P-16:0/18:1)	702.5 → 339.3	PE(P-16:0/18:2) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	2.8	<1
PE(P-16:0/18:2)	700.5 → 337.3	PE(P-16:0/18:2) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	2.1	<1
PE(P-16:0/20:3) (a)	726.5 → 363.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	4.9	<1
PE(P-16:0/20:3) (b)	726.5 → 363.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	8.0	1.32
PE(P-16:0/20:4)	724.5 → 361.3	PE(P-16:0/18:2) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	3.0	<1
PE(P-16:0/20:5)	722.5 → 359.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	5.2	<1
PE(P-16:0/22:4)	752.6 → 389.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	5.2	<1
PE(P-16:0/22:5) (n3)	750.5 → 387.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	2.6	<1
PE(P-16:0/22:5) (n6)	750.5 → 387.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	6.2	<1
PE(P-16:0/22:6)	748.5 → 385.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	2.5	<1
PE(P-17:0/20:4) (a)	738.6 → 361.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	4.7	<1
PE(P-17:0/20:4) (b)	738.6 → 361.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	5.2	<1
PE(P-17:0/22:6) (a)	762.6 → 385.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	5.9	<1
PE(P-17:0/22:6) (b)	762.6 → 385.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	5.9	<1
PE(P-18:0/18:1)	730.6 → 339.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	2.9	<1
PE(P-18:0/18:2)	728.6 → 337.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	2.1	<1
PE(P-18:0/18:3)	726.5 → 335.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	12.7	<1
PE(P-18:0/20:3) (a)	754.5 → 363.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	3.6	<1
PE(P-18:0/20:3) (b)	754.5 → 363.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	6.8	<1
PE(P-18:0/20:4)	752.6 → 361.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	1.4	<1
PE(P-18:0/20:5)	750.5 → 359.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	2.8	<1
PE(P-18:0/22:4)	780.6 → 389.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	4.9	<1
PE(P-18:0/22:5) (n3)	778.5 → 387.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	3.2	<1
PE(P-18:0/22:5) (n6)	778.5 → 387.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	6.7	1.39
PE(P-18:0/22:6)	776.6 → 385.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	2.0	<1
PE(P-18:1/18:1) (a)	728.6 → 339.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	3.0	<1
PE(P-18:1/18:1) (b)	728.6 → 339.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	6.2	<1
PE(P-18:1/18:2) (a)	726.5 → 337.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	3.0	<1
PE(P-18:1/18:2) (b)	726.5 → 337.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	5.5	<1
PE(P-18:1/20:3) (a)	752.5 → 363.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	6.1	<1
PE(P-18:1/20:3) (b)	752.5 → 363.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	9.5	<1
PE(P-18:1/20:4) (a)	750.5 → 361.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	2.4	<1
PE(P-18:1/20:4) (b)	750.5 → 361.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	5.0	<1
PE(P-18:1/20:5) (a)	748.5 → 359.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	4.1	<1
PE(P-18:1/20:5) (b)	748.5 → 359.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	7.7	<1
PE(P-18:1/22:4)	778.5 → 389.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	9.4	<1
PE(P-18:1/22:5) (a)	776.6 → 387.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	5.4	2.73
PE(P-18:1/22:5) (b)	776.6 → 387.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	8.9	<1
PE(P-18:1/22:6) (a)	774.5 → 385.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	1.9	<1
PE(P-18:1/22:6) (b)	774.5 → 385.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	4.1	<1
PE(P-19:0/20:4) (a)	766.6 → 361.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	12.3	1.51
PE(P-19:0/20:4) (b)	766.6 → 361.3	PE(P-18:0/20:4) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	9.2	<1
PE(P-20:0/18:1)	758.6 → 339.3	PE(P-18:0/18:1) d9 (IS) [reference]	PE(P-18:0/18:1) d9	1	6.7	3.32

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

化合物名	トランジション	タイムリファレンス化合物	ISTD 化合物	応答係数	%CV ¹	%バックグラウンド ²
SHexCer(d18:1/24:1)	890.8 → 264.3	SHexCer(d18:1/24:1(OH)) [reference]	SHexCer(d18:1/12:0)	1	16.3	<1
SM(34:3)	699.5 → 184.1	SM(d18:2/14:0) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	4.4	<1
SM(35:2) (b)	715.6 → 184.1	SM(d17:1/16:0) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	5.0	<1
SM(37:1)	745.6 → 184.1	SM(d18:1/18:0)/SM(d16:1/20:0) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	1.8	<1
SM(37:2)	743.5 → 184.1	SM(d18:2/18:0) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	1.6	<1
SM(38:3) (a)	755.6 → 184.1	SM(d18:2/20:0) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	3.0	<1
SM(38:3) (b)	755.6 → 184.1	SM(d18:2/20:0) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	2.8	66.33
SM(40:3) (a)	783.6 → 184.1	SM(d18:2/20:0) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	2.2	<1
SM(40:3) (b)	783.6 → 184.1	SM(d18:2/20:0) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	2.0	<1
SM(40:4)	781.5 → 184.1	SM(d18:2/20:0) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	4.5	<1
SM(41:0)	803.7 → 184.1	SM(d18:1/24:0) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	3.3	<1
SM(41:1) (a)	801.7 → 184.1	SM(d16:1/23:0)/SM(d17:1/22:0) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	5.3	<1
SM(43:1)	829.7 → 184.1	SM(43:1) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	2.5	<1
SM(43:2) (b)	827.7 → 184.1	SM(d19:1/24:1) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	2.5	<1
SM(43:2) (c)	827.7 → 184.1	SM(d19:1/24:1) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	2.3	<1
SM(44:1)	843.6 → 184.1	SM(44:2) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	4.5	<1
SM(44:2)	841.6 → 184.1	SM(44:2) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	2.8	<1
SM(44:3)	839.6 → 184.1	SM(44:2) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	4.2	<1
SM(d16:1/19:0)	717.6 → 184.1	SM(d18:2/18:0) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	4.0	<1
SM(d16:1/23:0)/SM(d17:1/22:0)	773.7 → 184.1	SM(d16:1/23:0)/SM(d17:1/22:0) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	2.9	<1
SM(d16:1/24:1)	785.7 → 184.1	SM(d18:1/22:0)/SM(d16:1/24:0) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	2.0	<1
SM(d17:1/14:0)	661.5 → 184.1	SM(d18:1/15:0) d9 (IS) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	2.8	<1
SM(d17:1/16:0)	689.6 → 184.1	SM(d17:1/16:0) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	1.4	<1
SM(d17:1/24:1)	799.7 → 184.1	SM(d16:1/23:0)/SM(d17:1/22:0) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	2.9	<1
SM(d18:0/14:0)	677.6 → 184.1	SM(d18:1/15:0) d9 (IS) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	4.4	<1
SM(d18:0/16:0)	705.6 → 184.1	SM(d18:1/16:0) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	4.2	<1
SM(d18:0/22:0)	789.7 → 184.1	SM(d18:1/22:0)/SM(d16:1/24:0) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	6.6	<1
SM(d18:1/14:0)/SM(d16:1/16:0)	675.5 → 184.1	SM(d18:1/15:0) d9 (IS) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	3.6	<1
SM(d18:1/16:0)	703.6 → 184.1	SM(d18:1/16:0) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	2.8	<1
SM(d18:1/17:0)/SM(d17:1/18:0)	717.6 → 184.1	SM(d18:2/18:0) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	3.0	<1
SM(d18:1/18:0)/SM(d16:1/20:0)	731.6 → 184.1	SM(d18:1/18:0)/SM(d16:1/20:0) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	2.1	<1
SM(d18:1/20:0)/SM(d16:1/22:0)	759.6 → 184.1	SM(d16:1/23:0)/SM(d17:1/22:0) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	1.7	<1
SM(d18:1/22:0)/SM(d16:1/24:0)	787.7 → 184.1	SM(d18:1/22:0)/SM(d16:1/24:0) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	1.6	<1
SM(d18:1/23:0)/SM(d17:1/24:0)	801.7 → 184.1	SM(d16:1/23:0)/SM(d17:1/22:0) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	1.3	<1
SM(d18:1/24:0)	815.7 → 184.1	SM(d18:1/24:0) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	4.0	<1
SM(d18:1/24:1)	813.7 → 184.1	SM(d18:1/24:1) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	1.7	<1
SM(d18:2/14:0)	673.5 → 184.1	SM(d18:2/14:0) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	5.6	<1
SM(d18:2/16:0)	701.6 → 184.1	SM(d18:2/16:0) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	2.8	<1
SM(d18:2/17:0)	715.6 → 184.1	SM(d17:1/16:0) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	2.9	<1
SM(d18:2/18:0)	729.6 → 184.1	SM(d18:2/18:0) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	1.9	<1
SM(d18:2/18:1)	727.6 → 184.1	SM(d18:2/16:0) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	2.2	<1
SM(d18:2/20:0)	757.6 → 184.1	SM(d18:2/20:0) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	2.0	<1
SM(d18:2/22:0)	785.7 → 184.1	SM(d18:1/22:0)/SM(d16:1/24:0) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	1.7	<1
SM(d18:2/23:0)	799.7 → 184.1	SM(d16:1/23:0)/SM(d17:1/22:0) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	2.7	<1
SM(d18:2/24:0)	813.7 → 184.1	SM(d18:1/24:1) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	4.1	<1
SM(d19:1/24:1)	827.7 → 184.1	SM(d19:1/24:1) [reference]	SM(d18:1/15:0) d9	1	4.2	<1
Sph(d18:1)	300.3 → 282.3	Sph(d17:1) [reference]	Sph(d17:1)	1	6.8	58.42

化合物名	トランジション	タイムリファレンス化合物	ISTD 化合物	応答係数	%CV ¹	% バックグラウンド ²
Sph(d18:2)	298.3 → 280.3	Sph(d17:1) [reference]	Sph(d17:1)	1	25.7	76.52
TG(48:0) [NL-16:0]	824.8 → 551.5	TG(48:0) [NL-16:0] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	4.0	1.25
TG(48:0) [NL-18:0]	824.8 → 523.5	TG(48:0) [NL-16:0] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.9	2.08
TG(48:0) [SIM]	824.8 → 824.8	TG(48:0) [NL-16:0] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.5	2.86
TG(48:1) [NL-16:1]	822.8 → 551.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.9	2.66
TG(48:1) [NL-18:1]	822.8 → 523.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.0	<1
TG(48:1) [SIM]	822.8 → 822.8	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.5	1.49
TG(48:2) [NL-14:0]	820.8 → 575.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.0	<1
TG(48:2) [NL-14:1]	820.8 → 577.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.7	1.14
TG(48:2) [NL-16:1]	820.8 → 549.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.7	4.14
TG(48:2) [NL-18:2]	820.8 → 523.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.7	<1
TG(48:2) [SIM]	820.8 → 820.8	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.3	<1
TG(48:3) [NL-14:0]	818.8 → 573.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.7	<1
TG(48:3) [NL-16:1]	818.8 → 547.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.3	5.58
TG(48:3) [NL-18:3]	818.8 → 523.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	4.6	<1
TG(48:3) [SIM]	818.8 → 818.8	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.8	4.47
TG(49:1) [NL-16:1]	836.8 → 565.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	4.9	14.31
TG(49:1) [NL-17:1]	836.8 → 551.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.8	<1
TG(49:1) [SIM]	836.8 → 836.8	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.3	13.44
TG(50:0) [NL-18:0]	852.8 → 551.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	4.8	<1
TG(50:0) [SIM]	852.8 → 852.8	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.3	1.84
TG(50:1) [NL-14:0]	850.8 → 605.5	TG(50:1) [NL-16:0] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	5.4	<1
TG(50:1) [NL-16:0]	850.8 → 577.5	TG(50:1) [NL-16:0] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.2	<1
TG(50:1) [NL-18:1]	850.8 → 551.5	TG(50:1) [NL-16:0] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.5	<1
TG(50:1) [SIM]	850.8 → 850.8	TG(50:1) [NL-16:0] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.5	<1
TG(50:2) [NL-14:0]	848.8 → 603.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	4.0	<1
TG(50:2) [NL-16:1]	848.8 → 577.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.6	<1
TG(50:2) [NL-18:1]	848.8 → 549.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.0	<1
TG(50:2) [NL-18:2]	848.8 → 551.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	4.0	<1
TG(50:2) [SIM]	848.8 → 848.8	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.6	<1
TG(50:3) [NL-14:0]	846.8 → 601.5	TG(50:3) [NL-18:2] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.9	<1
TG(50:3) [NL-14:1]	846.8 → 603.5	TG(50:3) [NL-18:2] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	4.0	<1
TG(50:3) [NL-16:1]	846.8 → 575.5	TG(50:3) [NL-18:2] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.4	<1
TG(50:3) [NL-18:2]	846.8 → 549.5	TG(50:3) [NL-18:2] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.4	<1
TG(50:3) [NL-18:3]	846.8 → 551.5	TG(50:3) [NL-18:2] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.1	<1
TG(50:3) [SIM]	846.8 → 846.8	TG(50:3) [NL-18:2] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.5	<1
TG(50:4) [NL-14:0]	844.8 → 599.5	TG(50:4) [SIM] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.3	<1
TG(50:4) [NL-18:3]	844.8 → 549.5	TG(50:4) [SIM] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.2	<1
TG(50:4) [NL-20:4]	844.8 → 523.5	TG(50:4) [SIM] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	4.2	<1
TG(50:4) [SIM]	844.8 → 844.8	TG(50:4) [SIM] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.4	<1
TG(51:0) [NL-16:0]	866.7 → 593.4	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.2	<1
TG(51:0) [SIM]	866.7 → 866.7	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	9.6	<1
TG(51:1) [NL-17:0]	864.8 → 577.5	TG(51:1) [NL-17:0] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	5.6	<1
TG(51:1) [SIM]	864.8 → 864.8	TG(51:2) [SIM] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.8	<1
TG(51:2) [NL-15:0]	862.8 → 603.5	TG(51:2) [SIM] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	5.6	<1
TG(51:2) [NL-17:0]	862.8 → 575.5	TG(51:2) [SIM] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.9	<1
TG(51:2) [NL-17:1]	862.8 → 577.5	TG(51:2) [SIM] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.3	<1

化合物名	トランジション	タイムリファレンス化合物	ISTD 化合物	応答係数	%CV ¹	%バックグラウンド ²
TG(51:2) [SIM]	862.8 → 862.8	TG(51:2) [SIM] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.4	3.13
TG(52:1) [NL-18:0]	878.8 → 577.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	4.2	<1
TG(52:1) [NL-18:1]	878.8 → 579.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.3	<1
TG(52:1) [SIM]	878.8 → 878.8	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.5	<1
TG(52:2) [NL-16:0]	876.8 → 603.5	TG(52:2) [NL-16:0] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	4.8	<1
TG(52:2) [NL-18:2]	876.8 → 579.5	TG(52:2) [NL-16:0] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.8	<1
TG(52:2) [SIM]	876.8 → 876.8	TG(52:2) [NL-16:0] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	8.1	<1
TG(52:3) [NL-16:1]	874.8 → 603.5	TG(52:3) [NL-18:2] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	6.1	<1
TG(52:3) [NL-18:2]	874.8 → 577.5	TG(52:3) [NL-18:2] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.3	<1
TG(52:3) [SIM]	874.8 → 874.8	TG(52:3) [NL-18:2] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	8.1	<1
TG(52:4) [NL-16:1]	872.8 → 601.5	TG(52:4) [SIM] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.2	<1
TG(52:4) [NL-18:2]	872.8 → 575.5	TG(52:4) [SIM] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.3	<1
TG(52:4) [NL-18:3]	872.8 → 577.5	TG(52:4) [SIM] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.6	<1
TG(52:4) [SIM]	872.8 → 872.8	TG(52:4) [SIM] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.6	<1
TG(52:5) [NL-18:3]	870.8 → 575.5	TG(52:5) [SIM] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.9	<1
TG(52:5) [NL-20:4]	870.8 → 549.5	TG(52:5) [SIM] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.3	<1
TG(52:5) [NL-20:5]	870.8 → 551.5	TG(52:5) [SIM] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	4.0	<1
TG(52:5) [SIM]	870.8 → 870.8	TG(52:5) [SIM] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.7	<1
TG(53:2) [NL-17:1]	890.8 → 605.5	TG(53:2) [NL-18:1] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	5.5	<1
TG(53:2) [NL-18:1]	890.8 → 591.5	TG(53:2) [NL-18:1] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.3	<1
TG(53:2) [SIM]	890.8 → 890.8	TG(53:2) [NL-18:1] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.3	<1
TG(54:0) [NL-18:0]	908.8 → 607.5	TG(53:2) [NL-18:1] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.4	8.23
TG(54:0) [SIM]	908.8 → 908.8	TG(53:2) [NL-18:1] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.0	4.98
TG(54:1) [NL-18:1]	906.8 → 607.5	TG(53:2) [NL-18:1] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.4	<1
TG(54:1) [SIM]	906.8 → 906.8	TG(53:2) [NL-18:1] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.6	<1
TG(54:2) [NL-18:0]	904.8 → 603.5	TG(54:2) [NL-20:1] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	4.1	<1
TG(54:2) [NL-20:1]	904.8 → 577.5	TG(54:2) [NL-20:1] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	4.4	<1
TG(54:2) [SIM]	904.8 → 904.8	TG(54:2) [NL-20:1] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.7	<1
TG(54:3) [NL-18:1]	902.8 → 603.5	TG(54:3) [NL-18:1] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.8	<1
TG(54:3) [NL-18:2]	902.8 → 605.5	TG(54:3) [NL-18:1] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	5.4	<1
TG(54:3) [SIM]	902.8 → 902.8	TG(54:3) [NL-18:1] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.7	<1
TG(54:4) [NL-18:2]	900.8 → 603.5	TG(54:4) [NL-18:2] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	4.3	<1
TG(54:4) [NL-20:3]	900.8 → 577.5	TG(54:4) [NL-18:2] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.9	<1
TG(54:4) [SIM]	900.8 → 900.8	TG(54:4) [NL-18:2] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.0	<1
TG(54:5) [NL-18:3]	898.8 → 603.5	TG(54:5) [SIM] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.6	<1
TG(54:5) [NL-20:4]	898.8 → 577.5	TG(54:5) [SIM] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.3	<1
TG(54:5) [SIM]	898.8 → 898.8	TG(54:5) [SIM] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.4	<1
TG(54:6) [NL-18:3]	896.8 → 601.5	TG(54:6) [SIM] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.0	<1
TG(54:6) [NL-20:4]	896.8 → 575.5	TG(54:6) [SIM] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.0	<1
TG(54:6) [NL-20:5]	896.8 → 577.5	TG(54:6) [SIM] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.8	<1
TG(54:6) [NL-22:6]	896.8 → 551.5	TG(54:6) [SIM] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.1	<1
TG(54:6) [SIM]	896.8 → 896.8	TG(54:6) [SIM] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.2	<1
TG(54:7) [NL-20:5]	894.8 → 575.5	TG(54:7) [NL-22:6] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.7	<1
TG(54:7) [NL-22:6]	894.8 → 549.5	TG(54:7) [NL-22:6] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.5	<1
TG(54:7) [SIM]	894.8 → 894.8	TG(54:7) [NL-22:6] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.1	<1
TG(56:6) [NL-20:4]	924.8 → 603.5	TG(56:6) [SIM] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	6.3	<1
TG(56:6) [NL-22:5]	924.8 → 577.5	TG(56:6) [SIM] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.2	<1

化合物名	トランジション	タイムリファレンス化合物	ISTD 化合物	応答係数	%CV ¹	% バックグラウンド ²
TG(56:6) [SIM]	924.8 → 924.8	TG(56:6) [SIM] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.5	<1
TG(56:7) [NL-20:4]	922.8 → 601.5	TG(56:7) [SIM] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.6	<1
TG(56:7) [NL-20:5]	922.8 → 603.5	TG(56:7) [SIM] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.9	<1
TG(56:7) [NL-22:5]	922.8 → 575.5	TG(56:7) [SIM] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.6	<1
TG(56:7) [NL-22:6]	922.8 → 577.5	TG(56:7) [SIM] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.1	<1
TG(56:7) [SIM]	922.8 → 922.8	TG(56:7) [SIM] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.2	<1
TG(56:8) [NL-20:4]	920.8 → 599.5	TG(56:8) [NL-22:6] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.2	<1
TG(56:8) [NL-20:5]	920.8 → 601.5	TG(56:8) [NL-22:6] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.7	<1
TG(56:8) [NL-22:6]	920.8 → 575.5	TG(56:8) [NL-22:6] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.4	<1
TG(56:8) [SIM]	920.8 → 920.8	TG(56:8) [NL-22:6] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.3	<1
TG(56:9) [NL-22:6]	918.8 → 573.5	TG(56:9) [NL-22:6] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.1	<1
TG(56:9) [SIM]	918.8 → 918.8	TG(56:9) [NL-22:6] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.6	57.34
TG(58:10) [NL-22:6]	944.9 → 599.5	TG(58:10) [NL-22:6] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.7	<1
TG(58:10) [SIM]	944.9 → 944.9	TG(58:10) [NL-22:6] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.2	<1
TG(58:8) [NL-22:6]	948.8 → 603.5	TG(58:8) [NL-22:6] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.8	<1
TG(58:9) [NL-22:6]	946.9 → 601.5	TG(58:9) [SIM] [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	4.0	<1
TG(O-50:1) [NL-15:0]	836.8 → 577.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	6.0	<1
TG(O-50:1) [NL-16:0]	836.8 → 563.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.1	<1
TG(O-50:1) [NL-17:1]	836.8 → 551.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	7.8	<1
TG(O-50:1) [NL-18:1]	836.8 → 537.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.9	<1
TG(O-50:1) [SIM]	836.8 → 836.8	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.6	<1
TG(O-50:2) [NL-16:1]	834.8 → 563.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	5.5	12.07
TG(O-50:2) [NL-18:1]	834.8 → 535.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	4.6	<1
TG(O-50:2) [NL-18:2]	834.8 → 537.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	7.0	<1
TG(O-50:2) [SIM]	834.8 → 834.8	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.1	35.14
TG(O-52:0) [NL-16:0]	866.8 → 593.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	8.3	2.04
TG(O-52:1) [NL-16:0]	864.8 → 591.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.3	<1
TG(O-52:1) [NL-18:1]	864.8 → 565.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.7	<1
TG(O-52:1) [SIM]	864.8 → 864.8	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.5	<1
TG(O-52:2) [NL-16:0]	862.8 → 589.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	4.5	<1
TG(O-52:2) [NL-17:1]	862.8 → 577.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	5.6	<1
TG(O-52:2) [NL-18:1]	862.8 → 563.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	4.7	<1
TG(O-52:2) [SIM]	862.8 → 862.8	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.3	<1
TG(O-54:2) [NL-17:1]	890.8 → 605.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.7	<1
TG(O-54:2) [NL-18:1]	890.8 → 591.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.0	<1
TG(O-54:2) [SIM]	890.8 → 890.8	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	3.3	<1
TG(O-54:3) [NL-17:1]	888.8 → 603.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	7.4	<1
TG(O-54:3) [NL-18:1]	888.8 → 589.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	4.0	<1
TG(O-54:4) [NL-17:1]	886.8 → 601.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	11.7	<1
TG(O-54:4) [NL-18:2]	886.8 → 589.5	TG(48:1) [NL-18:1] d7 (IS) [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	5.6	<1
Ubiquinone	880.7 → 197.0	Ubiquinone [reference]	TG(15:0_18:1-d7_15:0)	1	2.3	<1

¹ %CV は、連続して注入された 50 の TQC から脂質種濃度ごとに計算されました。

² % バックグラウンドは、同じ LC/MS バッチ内の平均 NIST1950 濃度のパーセンテージとしてのブランク濃度の中央値です。

ホームページ

www.agilent.com/chem/jp

カスタムコンタクトセンター

0120-477-111

email_japan@agilent.com

本製品は一般的な実験用途での使用を想定しており、
医薬品医療機器等法に基づく登録を行っていません。
本文書に記載の情報、説明、製品仕様等は予告なしに
変更されることがあります。

RA44413.1612962963

アジレント・テクノロジー株式会社

© Agilent Technologies, Inc. 2021

Printed in Japan, September 23, 2021

5994-3747JAJP