

### Supplementary Data 3

Lipids identified during supercritical fluid extraction. Lipids were identified by metabolic fingerprinting using GL-RP-LC-ESI (+/-)-QTOF-MS

Compound	Formula	Mass	RT (min)	Mass Error (ppm)	Adduct	Analytical platform	Detection Mode	ID level	Relative Abundance (%)																
									SC1	SC2	SC3	SC4	SC5	SC6	SC7	SC8	SC9	SC10	SC11	SC12					
<b>Carbohydrates and carbohydrate conjugates</b>																									
Armillarin	C <sub>24</sub> H <sub>36</sub> O <sub>6</sub>	414.2042	1.34	4	[M+H] <sup>+</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +	3	1.38	1.00	1.16	1.03	0.80	0.71	1.02	1.00	0.81	0.95	0.77	0.80					
<b>Fatty Acyls</b>																									
aminopentanoic acid	C <sub>5</sub> H <sub>11</sub> NO <sub>2</sub>	117.079	0.67	4	[M+Na] <sup>+</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +	3	0.57	0.22	0.26	0.16	0.20	0.19	0.20	0.18	0.17	0.18	0.17	0.19					
FAL 16:0	C <sub>16</sub> H <sub>32</sub> O	240.2453	2.3	5	[M+NH <sub>4</sub> ] <sup>+</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +	3	0.17	0.17	0.09	0.35	0.18	0.11	0.10	1.00	0.05	0.26	1.98	0.56					
FA 22:5;O	C <sub>22</sub> H <sub>34</sub> O <sub>3</sub>	346.2508	4.91	0	[M-H] <sup>-</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI -	3	2.88	0.89	2.03	0.72	1.89	1.30	1.35	0.74	1.41	0.68	0.60	1.67					
FA 22:6;O	C <sub>22</sub> H <sub>32</sub> O <sub>3</sub>	344.2351	4.41	0	[M-H] <sup>-</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI -	3	1.91	0.42	1.16	0.31	1.24	0.71	0.80	0.39	0.80	0.36	0.31	1.04					
FA 22:4;O	C <sub>22</sub> H <sub>36</sub> O <sub>3</sub>	348.2664	5.62	0	[M-H] <sup>-</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI -	2	0.54	0.11	0.28	0.08	0.27	0.16	0.14	0.13	0.13	0.06	0.06	0.18					
FA 26:1;O2	C <sub>26</sub> H <sub>50</sub> O <sub>4</sub>	426.3709	7.08	4	[M+H] <sup>+</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +	3	0.35	0.27	0.31	0.42	1.08	0.19	0.10	0.07	0.14	0.11	0.65	0.09					
FOH 5:1	C <sub>5</sub> H <sub>10</sub> O	86.0732	0.67	8	[M+NH <sub>4</sub> ] <sup>+</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +	3	0.11	0.38	0.49	0.17	0.03	0.50	0.10	0.14	0.04	0.28	0.05	0.59					
Stearamide	C <sub>18</sub> H <sub>37</sub> NO	283.2875	5.11	5	[M+H] <sup>+</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +	3	0.41	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00					
NA 23:4	C <sub>23</sub> H <sub>39</sub> NO	345.3032	5.19	5	[M+H] <sup>+</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +	3	0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00					
NA 25:4	C <sub>25</sub> H <sub>43</sub> NO	373.3345	6.09	4	[M+H] <sup>+</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +	3	0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00					
6E-Heneicosen-11-one	C <sub>21</sub> H <sub>40</sub> O	308.3079	5.61	6	[M+NH <sub>4</sub> ] <sup>+</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +	3	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00					
12-Nonadecen-9-one	C <sub>19</sub> H <sub>36</sub> O	280.2766	5.36	5	[M+NH <sub>4</sub> ] <sup>+</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +	3	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00					
WE 24:2;O4	C <sub>24</sub> H <sub>44</sub> O <sub>6</sub>	428.3138	4.38	0	[M+Cl] <sup>-</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI -	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.18	0.00					
<b>Glycerolipids</b>																									
MGDG 16:0_18:1	C <sub>43</sub> H <sub>80</sub> O <sub>10</sub>	756.5752	9.35	2	[M+HCOOH-H]	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI -	2	0.99	1.30	1.33	1.31	1.20	1.09	1.18	1.17	0.47	0.40	0.49	0.41					
MGDG 16:0_18:2	C <sub>43</sub> H <sub>78</sub> O <sub>10</sub>	754.5595	8.71	2	[M+NH <sub>4</sub> ] <sup>+</sup> /M+HCOOH-H	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +/-ESI	2	3.38	4.23	3.91	3.98	4.45	3.69	3.64	4.06	3.15	2.66	3.03	2.62					
MGDG 18:2_18:2	C <sub>43</sub> H <sub>78</sub> O <sub>10</sub>	778.5595	8.15	2	M+HCOOH-H/M+Na	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI -ESI +	2	1.35	1.72	1.70	1.64	1.73	1.86	1.49	1.68	2.30	2.14	2.43	2.02					
MGDG 18:1_18:1	C <sub>43</sub> H <sub>82</sub> O <sub>10</sub>	782.5908	9.45	1	M+HCOOH-H/M+NH <sub>4</sub>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI -ESI +	2	0.46	0.71	0.81	0.85	0.58	0.71	0.75	0.77	0.38	0.33	0.39	0.33					
MGDG 36:6	C <sub>49</sub> H <sub>94</sub> O <sub>10</sub>	774.5282	7.84	6	[M+HCOOH-H]	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI -	3	0.01	0.03	0.00	0.10	0.07	0.07	0.54	0.49	0.06	0.05	0.08	0.07					
DG 34:1	C <sub>37</sub> H <sub>70</sub> O <sub>5</sub>	594.5223	10.56	5	[M+H] <sup>+</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +	3	0.66	0.61	0.85	0.63	0.73	0.47	0.30	0.32	0.28	0.20	0.22	0.22					
DG 36:2	C <sub>39</sub> H <sub>72</sub> O <sub>5</sub>	620.538	10.62	5	[M+H] <sup>+</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +	3	1.01	0.95	1.28	0.97	0.95	0.76	0.44	0.47	0.47	0.32	0.35	0.36					
DG O-40:8	C <sub>43</sub> H <sub>70</sub> O <sub>4</sub>	650.5274	9.28	8	[M-H] <sup>-</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI -	3	0.47	0.49	0.43	0.39	0.47	0.35	0.26	0.29	0.35	0.62	0.59	0.45					
DG 42:6	C <sub>43</sub> H <sub>76</sub> O <sub>5</sub>	696.5693	10.11	6	[M-H-H <sub>2</sub> O] <sup>-</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI -	3	0.78	0.88	0.82	0.81	0.91	0.67	0.52	0.51	0.59	0.98	0.98	0.72					
SQDG 16:0_16:0	C <sub>41</sub> H <sub>78</sub> O <sub>12</sub> S	794.5214	7.75	1	[M-H] <sup>-</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI -	2	0.02	0.04	0.01	0.14	0.09	0.12	0.72	0.61	0.26	0.16	0.29	0.28					
Glycerol 2-(9Z,12Z-octadecadienoate) 1-hexadecanoate 3-O-[alpha-D-galactopyranosyl-(1->6)-beta-D-galactopyranoside]	C <sub>60</sub> H <sub>88</sub> O <sub>15</sub>	916.6123	8.05	2	M-H/M+NH <sub>4</sub>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI -ESI +	3	0.30	0.81	0.33	1.07	1.23	1.03	2.72	2.53	0.95	0.71	0.88	0.80					
<b>Glycerophospholipids</b>																									
PG 34:1	C <sub>40</sub> H <sub>77</sub> O <sub>10</sub> P	748.5254	8.22	2	[M-H] <sup>-</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI -	3	0.05	0.13	0.03	0.19	0.15	0.17	0.46	0.54	0.11	0.09	0.11	0.09					
PG O-36:1	C <sub>42</sub> H <sub>83</sub> O <sub>9</sub> P	762.5775	7.98	4	[M+Cl] <sup>-</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI -	4	0.48	0.61	0.58	0.57	0.65	0.42	0.51	0.59	0.24	0.14	0.16	0.13					
PG 40:1	C <sub>46</sub> H <sub>89</sub> O <sub>10</sub> P	832.6193	11.01	8	[M+K] <sup>+</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +	3	7.26	4.14	6.72	3.66	4.94	3.89	2.32	2.01	1.22	0.82	3.43	1.64					
PG O-38:3	C <sub>44</sub> H <sub>83</sub> O <sub>9</sub> P	786.5775	7.57	4	[M+Cl] <sup>-</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI -	4	0.21	0.32	0.32	0.33	0.29	0.63	0.30	0.32	1.01	0.98	1.11	0.93					
PG 40:6	C <sub>46</sub> H <sub>79</sub> O <sub>10</sub> P	822.5411	8.7	9	[M+HCOOH-H]	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI -	4	0.77	0.89	0.90	0.82	0.95	0.69	0.82	0.89	0.59	0.46	0.52	0.47					
LPC O-14:0	C <sub>22</sub> H <sub>48</sub> NO <sub>3</sub> P	453.3219	6.04	6	M+Na	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +	4	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00					
PC O-34:5	C <sub>42</sub> H <sub>76</sub> NO <sub>7</sub> P	737.5359	8.85	1	[M+NH <sub>4</sub> ] <sup>+</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +	3	1.37	1.59	1.51	1.60	1.86	1.40	1.55	1.46	0.82	0.73	0.79	0.83					
PC 36:1	C <sub>46</sub> H <sub>86</sub> NO <sub>8</sub> P	787.6091	9.83	5	[M+HCOOH-H]/[M+H] <sup>+</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI -ESI +	3	0.75	1.30	0.79	1.76	1.31	1.71	1.90	1.68	1.22	1.46	1.51	1.60					
PC O-38:9	C <sub>46</sub> H <sub>78</sub> NO <sub>7</sub> P	785.5359	8.91	2	[M+NH <sub>4</sub> ] <sup>+</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +	3	0.43	0.42	0.59	0.39	0.39	0.22	0.28	0.26	0.15	0.11	0.10	0.13					
PC 16:1_16:0	C <sub>40</sub> H <sub>78</sub> NO <sub>8</sub> P	731.5465	8.15	5	[M+HCOOH-H]/[M+H] <sup>+</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI -ESI +	2	0.63	1.00	0.58	1.12	1.18	1.65	1.74	1.73	1.46	1.60	1.65	1.70					
PC 16:0_18:1	C <sub>42</sub> H <sub>82</sub> NO <sub>8</sub> P	759.5778	8.8	2	[M+HCOOH-H]	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI -	2	3.30	4.69	3.48	4.75	4.05	5.00	4.95	5.52	6.38	6.82	6.08						
PC 18:1_18:1	C <sub>44</sub> H <sub>86</sub> NO <sub>8</sub> P	785.5935	9.06	5	M+HCOOH-H/M+H	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI -ESI +	2	6.05	7.97	6.54	8.54	7.24	7.98	9.45	9.45	7.79	7.97	7.78	9.01					
PC 18:2_16:0	C <sub>42</sub> H <sub>80</sub> NO <sub>8</sub> P	757.5622	8.32	3	M+H/M+HCOOH-H	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI -ESI +	2	3.86	5.35	2.96	5.05	5.62	7.18	6.19	6.16	7.78	8.12	8.15	9.09					
PC 18:2_18:2	C <sub>44</sub> H <sub>86</sub> NO <sub>8</sub> P	781.5622	8.97	2	[M+HCOOH-H]/[M+H] <sup>+</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI -ESI +	2	1.15	1.39	1.18	1.45	1.32	1.52	1.50	1.40	1.42	1.37	1.65						
LPE O-24:0;O	C <sub>26</sub> H <sub>42</sub> NO <sub>3</sub> P	567.4264	6.13	4	[M+H] <sup>+</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +	3	1.29	1.87	1.68	1.71	1.65	1.53	1.91	1.62	1.04	0.95	0.80	0.87					
PE 36:1	C <sub>41</sub> H <sub>80</sub> NO <sub>8</sub> P	745.5622	8.55	8	[M+H] <sup>+</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +	3	0.70	1.24	0.94	1.74	1.12	2.57	2.03	2.02	2.83	3.21	3.23	3.50					

continued on next page

Supplementary Data 3. (Continued)

Compound	Formula	Mass	RT (min)	Mass Error (ppm)	Adduct	Analytical platform	Detection Mode	ID level	Relative Abundance (%)											
									SC1	SC2	SC3	SC4	SC5	SC6	SC7	SC8	SC9	SC10	SC11	SC12
PE 37:3	C <sub>42</sub> H <sub>78</sub> NO <sub>8</sub> P	755.5465	7.72	4	[M+H] <sup>+</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +		0.07	0.10	0.06	0.13	0.05	0.35	0.07	0.06	0.71	0.91	0.94	0.90
PE 38:2	C <sub>43</sub> H <sub>82</sub> NO <sub>8</sub> P	771.5778	8.65	5	[M+H] <sup>+</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +	3	0.11	0.28	0.19	0.22	0.26	0.50	0.49	0.48	0.44	0.54	0.59	0.57
PE 39:3	C <sub>44</sub> H <sub>86</sub> NO <sub>8</sub> P	783.5778	8.39	5	[M+H] <sup>+</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +	3	1.79	2.89	1.49	2.73	2.87	4.51	3.43	3.49	5.17	5.54	5.47	6.16
PE 18:1_18:1	C <sub>41</sub> H <sub>78</sub> NO <sub>8</sub> P	743.5465	9.05	2	[M-H] <sup>-</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI -	2	0.57	0.89	0.37	1.27	1.23	1.51	2.25	2.80	2.78	2.70	2.97	2.63
PE 18:2_18:1	C <sub>41</sub> H <sub>78</sub> NO <sub>8</sub> P	741.5309	8.41	1	[M-H] <sup>-</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI -	2	0.07	0.10	0.04	0.11	0.13	0.21	0.20	0.26	0.58	0.58	0.63	0.55
PA O-36:0	C <sub>30</sub> H <sub>50</sub> O <sub>7</sub> P	690.5563	11.7	9	[M+NH <sub>4</sub> ] <sup>+</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +	3	0.48	0.37	0.38	0.22	0.46	0.26	0.09	0.19	0.84	0.87	0.51	1.01
PE dO-40:0	C <sub>45</sub> H <sub>84</sub> NO <sub>7</sub> P	791.6768	11.7	9	[M+H] <sup>+</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +	3	0.46	0.36	0.37	0.23	0.43	0.24	0.10	0.20	0.75	0.74	0.48	0.86
PI O-38:1	C <sub>41</sub> H <sub>81</sub> O <sub>12</sub> P	878.6248	7.47	4	[M+Cl] <sup>-</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI -	3	0.05	0.14	0.07	0.23	0.20	0.24	0.59	0.56	0.28	0.22	0.27	0.25
PI 38:4	C <sub>47</sub> H <sub>83</sub> O <sub>13</sub> P	886.5571	10.62	7	[M+H] <sup>+</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +	3	0.26	0.24	0.59	0.09	0.13	0.13	0.06	0.04	0.05	0.04	0.12	0.07
PI 44:8	C <sub>53</sub> H <sub>87</sub> O <sub>13</sub> P	962.5884	9.56	3	[M+Cl] <sup>-</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI -	3	1.20	3.30	1.53	0.33	0.31	0.12	0.13	0.14	0.13	0.06	0.06	0.06
PIP 38:2	C <sub>47</sub> H <sub>86</sub> O <sub>16</sub> P <sub>2</sub>	970.5548	9.36	2	[M+Cl] <sup>-</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI -	4	1.51	1.83	1.93	2.13	1.95	1.73	1.81	2.16	1.77	1.37	1.36	1.31
PIM1 32:1	C <sub>47</sub> H <sub>87</sub> O <sub>18</sub> P	970.563	9.73	3	[M+H-H <sub>2</sub> O] <sup>+</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +	3	0.45	1.00	0.51	0.12	0.12	0.05	0.06	0.05	0.04	0.02	0.02	0.02
PS 39:2	C <sub>48</sub> H <sub>84</sub> NO <sub>10</sub> P	829.5833	8.22	2	[M-H] <sup>-</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI -	3	0.51	0.76	0.45	0.64	0.64	1.09	0.72	0.84	1.82	1.91	2.09	1.79
PS 39:3	C <sub>48</sub> H <sub>82</sub> NO <sub>10</sub> P	827.5676	8.78	1	[M+HCOOH-H] <sup>-</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI -	3	0.44	0.59	0.51	0.57	0.52	0.54	0.57	0.64	0.77	0.74	0.78	0.73
PS 36:0	C <sub>42</sub> H <sub>82</sub> NO <sub>10</sub> P	791.5676	8.38	2	[M-H] <sup>-</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI -	3	0.25	0.46	0.32	0.56	0.34	0.74	0.58	0.66	1.11	1.22	1.32	1.13
PS 39:4	C <sub>48</sub> H <sub>80</sub> NO <sub>10</sub> P	825.552	8.14	1	[M+HCOOH-H] <sup>-</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI -	3	0.17	0.21	0.15	0.19	0.20	0.29	0.18	0.22	0.47	0.48	0.52	0.45
PS(DiMe(11,3)/DiMe(13,5))	C <sub>50</sub> H <sub>84</sub> NO <sub>12</sub> P	921.5731	8.17	2	[M+NH <sub>4</sub> ] <sup>+</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +	3	0.04	0.14	0.05	0.22	0.29	0.24	0.86	0.67	0.15	0.12	0.14	0.16
<b>Polyketides</b>																				
Anacardic acid	C <sub>22</sub> H <sub>30</sub> O <sub>3</sub>	342.2195	4.02	0	[M-H] <sup>-</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI -	3	2.29	0.65	1.55	0.50	1.65	1.06	1.13	0.69	1.16	0.67	0.47	1.52
<b>Prenol lipids</b>																				
Lucidenic acid	C <sub>27</sub> H <sub>38</sub> O <sub>7</sub>	474.2618	4.44	2	[M+NH <sub>4</sub> ] <sup>+</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +	3	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Hydroxyglabrolide	C <sub>30</sub> H <sub>44</sub> O <sub>5</sub>	484.3189	5.34	1	[M+H] <sup>+</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +	3	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Zeaxanthin diglucoside/ Zeaxanthin beta-D-diglucoside	C <sub>53</sub> H <sub>76</sub> O <sub>12</sub>	892.5337	9.38	3	[M+H] <sup>+</sup> /[M+HCOOH-H] <sup>+</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI -/ESI +	3	7.55	9.32	9.72	10.91	9.98	8.67	9.10	10.95	9.65	7.22	7.16	6.87
tocopheronolactone	C <sub>46</sub> H <sub>72</sub> O <sub>4</sub>	278.1518	5.53	4	[M+H] <sup>+</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +	3	0.94	0.07	0.04	0.02	0.04	0.02	0.00	0.00	0.03	0.05	0.01	0.03
tocotrienol	C <sub>28</sub> H <sub>42</sub> O <sub>2</sub>	410.3185	4.89	4	[M+H] <sup>+</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +	3	0.34	0.72	0.56	0.37	0.45	0.27	0.34	0.38	0.44	0.62	0.15	0.58
Flavoxanthin	C <sub>30</sub> H <sub>36</sub> O <sub>3</sub>	584.4229	5.15	5	[M+H-H <sub>2</sub> O] <sup>+</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +	4	2.69	2.84	3.14	2.81	3.03	2.53	3.00	2.85	2.10	1.85	1.92	2.22
Triterpenoid	C <sub>30</sub> H <sub>48</sub> O <sub>5</sub> S	552.3121	2.44	8	[M+H] <sup>+</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +	4	0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Curcumadiol	C <sub>18</sub> H <sub>26</sub> O <sub>2</sub>	238.1933	0.7	0	[M+Na] <sup>+</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +	3	0.96	1.46	1.09	1.42	1.30	1.18	1.69	1.76	1.13	1.11	1.12	1.24
Cedryl acetate	C <sub>17</sub> H <sub>28</sub> O <sub>2</sub>	264.2089	0.71	1	[M+Na] <sup>+</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +	3	0.54	0.61	0.47	0.58	0.58	0.44	0.69	0.69	0.37	0.34	0.37	0.42
Armillane	C <sub>23</sub> H <sub>32</sub> O <sub>7</sub>	420.2148	2.25	6	[M+H] <sup>+</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +	3	0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
<b>Sphingolipids</b>																				
Termitomycesphin A	C <sub>41</sub> H <sub>77</sub> NO <sub>10</sub>	743.5548	9.19	6	[M+H] <sup>+</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +	3	0.36	0.60	0.26	0.92	0.89	1.14	1.94	2.08	1.53	1.57	1.63	1.73
CerPE 40:3;O3	C <sub>42</sub> H <sub>81</sub> N <sub>2</sub> O <sub>10</sub> P	756.5781	9.49	7	[M+NH <sub>4</sub> ] <sup>+</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +	3	0.79	1.28	1.27	1.87	1.47	1.60	1.63	1.60	0.80	0.88	0.91	0.96
CerP 44:1;O2	C <sub>44</sub> H <sub>89</sub> NO <sub>10</sub> P	757.6349	8.28	2	[M+K] <sup>+</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +	3	0.56	0.77	0.66	0.80	0.91	0.89	0.74	0.74	0.71	0.66	0.69	0.74
HexCer 37:0;O4	C <sub>43</sub> H <sub>85</sub> NO <sub>10</sub>	775.6173	8.93	7	[M+Na] <sup>+</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +	3	0.70	0.91	0.97	1.00	0.95	0.80	0.88	0.85	0.43	0.36	0.39	0.41
HexCer 36:1;O4	C <sub>42</sub> H <sub>81</sub> NO <sub>10</sub>	759.586	7.72	3	[M+Na] <sup>+</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +	3	0.19	0.27	0.13	0.22	0.26	0.74	0.27	0.25	1.16	1.42	1.49	1.41
HexCer 39:2;O2	C <sub>46</sub> H <sub>88</sub> NO <sub>8</sub>	767.6275	10.72	1	[M+HCOOH-H] <sup>-</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI -	3	1.08	0.98	1.32	1.83	1.53	1.74	1.38	1.43	1.49	1.92	1.58	2.04
HexCer 40:2;O3	C <sub>46</sub> H <sub>87</sub> NO <sub>9</sub>	797.6381	11.27	1	[M-H] <sup>-</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI -	3	0.53	0.45	0.76	0.86	0.69	0.80	0.60	0.60	0.64	0.76	0.75	0.77
N,N-dimethyl-Safingol	C <sub>29</sub> H <sub>43</sub> NO <sub>2</sub>	329.3294	6.05	5	[M+H-H <sub>2</sub> O] <sup>+</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +	3	0.28	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
SPB 17:0;O2	C <sub>17</sub> H <sub>27</sub> NO <sub>2</sub>	287.2824	4.49	4	[M+H-H <sub>2</sub> O] <sup>+</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +	3	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Cer 40:0;O3	C <sub>40</sub> H <sub>81</sub> NO <sub>4</sub>	639.6166	10.36	2	[M+HCOOH-H] <sup>-</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI -	3	0.27	0.27	0.46	0.65	0.40	0.61	0.51	0.51	0.55	0.68	0.59	0.74
Cer 40:0;O4	C <sub>40</sub> H <sub>81</sub> NO <sub>5</sub>	655.6115	10.58	3	[M-H] <sup>-</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI -	3	0.76	0.74	1.18	1.36	1.04	1.22	0.89	0.90	1.16	1.26	1.28	1.30
Cer 41:0;O4	C <sub>41</sub> H <sub>83</sub> NO <sub>5</sub>	669.6271	11.48	1	[M-H] <sup>-</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI -	3	0.65	0.50	0.73	0.67	0.79	0.53	0.36	0.34	0.48	0.47	0.49	0.46
Cer 44:0;O4	C <sub>44</sub> H <sub>89</sub> NO <sub>5</sub>	711.6741	11.89	2	[M-H] <sup>-</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI -	3	0.45	0.37	0.65	0.72	0.58	0.61	0.56	0.47	0.56	0.64	0.70	0.69
Cer 44:0;O3	C <sub>44</sub> H <sub>89</sub> NO <sub>4</sub>	695.6792	11.7	2	[M+HCOOH-H] <sup>-</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI -	3	0.33	0.30	0.37	0.54	0.46	0.46	0.47	0.50	0.55	0.69	0.54	0.72
CerPE 38:3;O3	C <sub>40</sub> H <sub>77</sub> N <sub>2</sub> O <sub>10</sub> P	728.5468	8.55	3	[M+HCOOH-H] <sup>-</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI -	3	0.52	0.70	0.65	0.65	0.82	0.45	0.54	0.63	0.11	0.02	0.03	0.02
<b>Steroids and steroid derivatives</b>																				
Benzoyloxystigmast-5-ene-3-ol	C <sub>36</sub> H <sub>54</sub> O <sub>3</sub>	534.4073	9.05	10	[M+NH <sub>4</sub> ] <sup>+</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +	3	2.08	1.67	3.07	1.52	1.77	0.92	1.12	1.01	0.84	0.51	0.61	0.53

continued on next page

## Supplementary Data 3. (Continued)

Compound	Formula	Mass	RT (min)	Mass Error (ppm)	Adduct	Analytical platform	Detection Mode	ID level	Relative Abundance (%)												
									SC1	SC2	SC3	SC4	SC5	SC6	SC7	SC8	SC9	SC10	SC11	SC12	
Dehydrotestosterone	C <sub>28</sub> H <sub>46</sub> O <sub>4</sub>	446.3396	5.45	4	[M+H-H <sub>2</sub> O] <sup>+</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +	3	0.48	0.52	0.56	0.40	0.49	0.34	0.25	0.38	0.49	0.47	0.28	0.53	
Torvonin A	C <sub>39</sub> H <sub>64</sub> O <sub>12</sub>	724.4398	4.02	9	[M-H-H <sub>2</sub> O] <sup>-</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI -	4	1.04	0.04	0.29	0.03	0.50	0.16	0.18	0.05	0.14	0.05	0.02	0.32	
<b>Sterol Lipids</b>																					
ST 29:2:O2	C <sub>29</sub> H <sub>48</sub> O <sub>2</sub>	428.3654	7.46	5	[M+H] <sup>+</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +	3	0.46	0.68	0.85	0.85	0.43	0.42	0.22	0.49	1.08	0.58	0.34	0.69	
<b>Tetrapyrroles and derivatives</b>																					
Chlorophyll b	C <sub>55</sub> H <sub>71</sub> MgN <sub>3</sub> O <sub>6</sub>	907.5219	9.25	4	[M+H] <sup>+</sup>	GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +	3	0.47	0.85	1.27	0.19	0.24	0.17	0.13	0.04	0.04	0.03	0.04	0.02	
Unknown			0.69			GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +		1.54	2.03	1.62	1.89	1.75	1.84	2.44	2.57	1.64	1.76	1.78	1.95	
Unknown			10.42			GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +		0.99	0.96	1.37	0.84	0.96	0.57	0.55	1.08	0.90	0.65	0.41	0.74	
Unknown			0.65			GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +		0.62	0.65	0.61	0.62	0.57	0.55	0.66	0.69	0.44	0.45	0.48	0.61	
Unknown			0.72			GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +		0.60	0.63	0.58	0.57	0.59	0.47	0.64	0.65	0.39	0.37	0.39	0.50	
Unknown			9.36			GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +		0.68	0.78	0.96	0.59	0.82	0.42	0.56	0.61	0.55	0.30	0.38	0.38	
Unknown			11.16			GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +		0.56	0.57	0.70	0.37	0.53	0.25	0.34	0.32	0.31	0.17	0.19	0.17	
Unknown			5.53			GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +		1.79	0.16	0.14	0.05	0.13	0.05	0.00	0.00	0.11	0.11	0.06	0.05	
Unknown			1.26			GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +		1.22	0.12	0.09	0.11	0.03	0.34	0.04	0.01	0.09	0.02	0.00	0.04	
Unknown			2.55			GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +		0.58	0.07	0.05	0.05	0.04	0.13	0.02	0.01	0.04	0.01	0.03	0.02	
Unknown			1.19			GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +		0.58	0.10	0.04	0.06	0.07	0.13	0.02	0.01	0.04	0.01	0.01	0.02	
Unknown			1.93			GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +		0.57	0.06	0.04	0.05	0.01	0.13	0.02	0.00	0.04	0.01	0.00	0.02	
Unknown			1.8			GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +		0.59	0.07	0.02	0.03	0.04	0.08	0.01	0.00	0.02	0.01	0.00	0.01	
Unknown			5.53			GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +		0.57	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
Unknown			8.97			GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +		0.18	0.63	0.19	0.81	0.65	0.81	0.90	0.88	0.73	0.78	0.78	0.89	
Unknown			1.46			GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +		0.33	0.32	0.15	0.62	0.42	0.23	0.21	1.81	0.10	0.58	2.13	1.20	
Unknown			7.91			GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +		0.12	0.18	0.16	0.18	0.19	0.58	0.18	0.16	0.79	0.88	0.98	0.91	
Unknown			0.78			GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +		0.07	0.00	0.05	0.04	0.00	0.00	0.14	0.00	2.69	2.39	1.74	0.23	
Unknown			0.78			GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +		0.07	0.00	0.05	0.04	0.00	0.00	0.14	0.00	2.79	2.47	1.77	0.22	
Unknown			0.79			GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +		0.04	0.00	0.03	0.03	0.00	0.00	0.07	0.00	1.61	1.43	0.99	0.12	
Unknown			0.78			GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	1.41	1.23	0.87	0.10	
Unknown			0.79			GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	0.00	0.59	0.52	0.34	0.04	
Unknown			0.85			GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +		0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.01	1.10	0.03	0.25	
Unknown			8.92			GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +		0.44	0.52	0.54	0.54	0.54	0.44	0.49	0.49	0.27	0.23	0.25	0.27	
Unknown			8.46			GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +		0.29	0.11	0.53	0.22	0.36	0.14	0.19	0.23	0.08	0.08	0.08	0.04	
Unknown			5.83			GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +		0.29	0.39	0.46	0.72	0.66	0.40	0.57	0.42	0.26	0.17	0.07	0.21	
Unknown			5.83			GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +		0.29	0.39	0.46	0.71	0.66	0.40	0.57	0.42	0.26	0.17	0.07	0.21	
Unknown			10.86			GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +		0.29	0.23	0.38	0.57	0.46	0.52	0.40	0.36	0.27	0.37	0.28	0.49	
Unknown			0.89			GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +		0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
Unknown			3.56			GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +		0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
Unknown			0.9			GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +		0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
Unknown			1.93			GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +		0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
Unknown			11.94			GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +		0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
Unknown			3.59			GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +		0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
Unknown			4.29			GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +		0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
Unknown			1.02			GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +		0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
Unknown			2.67			GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI +		0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
Unknown			2.8			GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI -		1.83	0.43	0.12	0.18	0.22	0.48	0.09	0.04	0.21	0.06	0.10	0.12	
Unknown			4.91			GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI -		0.87	0.03	0.23	0.02	0.30	0.10	0.10	0.02	0.08	0.02	0.01	0.14	
Unknown			1.46			GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI -		0.67	0.09	0.05	0.06	0.10	0.15	0.02	0.03	0.05	0.04	0.06	0.03	
Unknown			1.46			GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI -		0.73	0.09	0.03	0.06	0.12	0.18	0.02	0.01	0.07	0.01	0.03	0.03	
Unknown			0.82			GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI -		0.12	0.70	0.16	0.01	0.03	0.01	0.00	0.03	0.04	1.72	0.13	0.75	
Unknown			0.82			GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI -		0.09	0.47	0.11	0.01	0.02	0.01	0.00	0.02	0.02	1.21	0.08	0.51	

continued on next page

**Supplementary Data 3.** (Continued)

Compound	Formula	Mass	RT (min)	Mass Error (ppm)	Adduct	Analytical platform	Detection Mode	ID level	Relative Abundance (%)											
									SC1	SC2	SC3	SC4	SC5	SC6	SC7	SC8	SC9	SC10	SC11	SC12
Unknown			0.82			GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI -		0.07	0.29	0.09	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01	0.02	0.52	0.06	0.27
Unknown			8.13			GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI -		0.31	0.44	0.48	0.50	0.49	0.51	0.45	0.49	0.54	0.48	0.55	0.48
Unknown			9.09			GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI -		0.13	0.58	0.85	0.05	0.07	0.06	0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Unknown			9.42			GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI -		0.47	0.64	0.40	0.20	0.21	0.21	0.18	0.21	0.28	0.15	0.11	0.09
Unknown			9.42			GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI -		0.38	0.52	0.34	0.13	0.15	0.15	0.12	0.13	0.16	0.09	0.07	0.06
Unknown			10.84			GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI -		0.48	0.24	0.51	0.26	0.34	0.23	0.16	0.14	0.14	0.09	0.30	0.12
Unknown			8.69			GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI -		0.10	0.25	0.13	0.41	0.38	0.35	1.02	0.92	0.15	0.09	0.12	0.12
Unknown			8.14			GL-RP-LC-QTOF-MS	ESI -		0.07	0.19	0.10	0.29	0.26	0.20	0.77	0.73	0.10	0.05	0.06	0.06

GL: global lipidomics, LC: liquid chromatography, QTOF-MS: quadrupole time-of-flight mass spectrometer.