

Simulation of triacylglycerol ion profiles: Bioinformatics for interpretation of triacylglycerol biosyntheses

Rowland H. Han, Miao Wang, Xiaoling Fang, and Xianlin Han
Diabetes and Obesity Research Center
Sanford-Burnham Medical Research Institute
Orlando, FL 32827

Table S2. Mass levels of individual fatty acyl chains of TAG ions determined by neutral loss scanning of all potentially occurring fatty acids

TAG	[TAG+Li] ⁺	226(14:1)	228(14:0)	252(16:2)	254(16:1)	256(16:0)	278(18:3)	280(18:2)	282(18:1)
C48:3	807.705	0.07±0.01	0.06±0.01	0.01±0.00	0.11±0.03	0.07±0.02	0.00±0.00	0.07±0.02	0.02±0.01
C48:2/C49:9	809.721	0.04±0.01	0.16±0.02	0.00±0.00	0.22±0.05	0.28±0.05	0.00±0.00	0.07±0.01	0.07±0.02
C48:1/C49:8	811.737	0.00±0.00	0.10±0.01	0.00±0.00	0.08±0.01	0.32±0.08	0.00±0.00	0.00±0.00	0.05±0.01
C48:0/C49:7	813.752	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.07±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00
C50:5	831.705	0.02±0.01	0.02±0.00	0.02±0.01	0.06±0.01	0.05±0.01	0.03±0.01	0.05±0.01	0.00±0.00
C50:4	833.721	0.04±0.01	0.09±0.01	0.09±0.01	0.47±0.10	0.18±0.02	0.09±0.02	0.29±0.02	0.06±0.02
C50:3/C51:10	835.737	0.02±0.00	0.20±0.01	0.05±0.01	1.55±0.21	1.40±0.15	0.04±0.01	0.96±0.09	0.43±0.06
C50:2/C51:9	837.752	0.00±0.00	0.12±0.02	0.00±0.00	1.05±0.12	2.81±0.29	0.00±0.00	0.47±0.03	1.17±0.13
C50:1/C51:8	839.768	0.00±0.00	0.01±0.00	0.00±0.00	0.02±0.00	1.45±0.12	0.00±0.00	0.00±0.00	0.53±0.03
C51:3/C52:10	849.752	0.00±0.00	0.01±0.00	0.01±0.00	0.06±0.01	0.05±0.01	0.01±0.00	0.07±0.01	0.03±0.01
C51:2/C52:9	851.768	0.00±0.00	0.02±0.00	0.01±0.00	0.11±0.03	0.18±0.03	0.04±0.01	0.06±0.02	0.09±0.01
C51:1/C52:8	853.690	0.00±0.00	0.01±0.00	0.00±0.00	0.03±0.01	0.11±0.03	0.11±0.01	0.01±0.01	0.04±0.01
C51:0/C52:7	855.705	0.01±0.00	0.01±0.00	0.01±0.00	0.02±0.00	0.05±0.01	0.04±0.01	0.07±0.01	0.02±0.01
C52:6	857.721	0.00±0.00	0.02±0.00	0.03±0.00	0.14±0.01	0.10±0.01	0.13±0.02	0.15±0.01	0.10±0.01
C52:5	859.737	0.00±0.00	0.01±0.00	0.06±0.01	0.60±0.02	0.57±0.02	0.63±0.03	1.11±0.02	0.23±0.03
C52:4/C53:11	861.752	0.00±0.00	0.01±0.00	0.04±0.01	1.36±0.14	2.96±0.45	0.43±0.03	4.88±0.71	1.73±0.18
C52:3/C53:10	863.768	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.87±0.12	6.35±0.59	0.00±0.00	4.46±0.47	7.48±0.21
C52:2/C53:9	865.784	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.04±0.01	3.79±0.18	0.00±0.00	0.11±0.02	6.14±0.29
C52:1/C53:8	867.799	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.14±0.03	0.00±0.00	0.00±0.00	0.10±0.03
C53:4/C54:11	875.768	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.05±0.01	0.05±0.01	0.05±0.01	0.13±0.02	0.06±0.01
C53:3/C54:10	877.784	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.10±0.02	0.26±0.02	0.08±0.01	0.33±0.03	0.23±0.03
C53:2/C54:9	879.705	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.04±0.01	0.26±0.03	0.10±0.01	0.15±0.02	0.30±0.04
C53:1/C54:8	881.721	0.00±0.00	0.01±0.00	0.01±0.00	0.05±0.00	0.14±0.02	0.09±0.01	0.05±0.01	0.21±0.03
C53:0/C54:7	883.737	0.00±0.00	0.01±0.00	0.00±0.00	0.12±0.01	0.18±0.03	0.16±0.01	0.28±0.03	0.09±0.02
C54:6	885.752	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.07±0.01	0.42±0.04	0.35±0.01	0.98±0.07	0.44±0.03
C54:5/C55:12	887.768	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.03±0.00	0.29±0.03	0.22±0.02	2.18±0.01	1.79±0.05
C54:4/C55:11	889.784	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.03±0.01	0.12±0.01	0.01±0.00	1.67±0.13	4.18±0.48
C54:3/C55:10	891.799	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.03±0.01	0.11±0.01	0.00±0.00	0.15±0.02	2.93±0.39
C54:2/C55:9	893.815	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.01±0.01	0.10±0.02	0.00±0.00	0.00±0.00	0.23±0.03
C55:4/C56:11	903.799	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.01	0.01±0.01	0.14±0.03	0.15±0.02
C55:3/C56:10	905.721	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.01±0.00	0.00±0.00	0.01±0.00	0.06±0.01	0.17±0.04
C55:2/C56:9	907.737	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.06±0.01	0.05±0.02	0.03±0.00	0.08±0.02	0.11±0.02
C55:1/C56:8	909.752	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.06±0.01	0.35±0.10	0.02±0.00	0.27±0.04	0.14±0.02
C55:0/C56:7	911.768	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.02±0.00	0.37±0.05	0.01±0.00	0.17±0.01	0.40±0.04
C56:6	913.784	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.01±0.00	0.13±0.02	0.01±0.00	0.09±0.01	0.26±0.02
C56:5/C57:12	915.799	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.03±0.01	0.01±0.00	0.06±0.00	0.13±0.02
C56:4/C57:11	917.815	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.05±0.01	0.12±0.02
C56:3/C57:10	919.831	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.01	0.11±0.03
C57:3/C58:10	933.752	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.01±0.00	0.06±0.01	0.01±0.01
C57:2/C58:9	935.768	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.07±0.01	0.13±0.02

C57:1/C58:8	937.784	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.03±0.00	0.13±0.01
C57:0/C58:7/C59:14	939.799	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.01±0.01	0.03±0.03	0.00±0.00	0.02±0.01	0.05±0.01
C58:6/C59:13	941.815	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.04±0.03	0.00±0.00	0.00±0.00	0.04±0.03
Total FA		0.22±0.05	0.87±0.11	0.36±0.07	7.47±1.04	23.89±2.61	2.72±0.25	19.88±1.99	30.69±2.47

Continued

TAG	[TAG+Li] ⁺	284(18:0)	304(20:4)	306(20:3)	308(20:2)	310(20:1)	312(20:0)	326(21:0)	328(22:6)
C48:3	807.705	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00
C48:2/C49:9	809.721	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00
C48:1/C49:8	811.737	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00
C48:0/C49:7	813.752	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00
C50:5	831.705	0.01±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00
C50:4	833.721	0.05±0.01	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00
C50:3/C51:10	835.737	0.02±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00
C50:2/C51:9	837.752	0.05±0.01	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00
C50:1/C51:8	839.768	0.17±0.03	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00
C51:3/C52:10	849.752	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00
C51:2/C52:9	851.768	0.00±0.00	0.01±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00
C51:1/C52:8	853.690	0.00±0.00	0.02±0.01	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00
C51:0/C52:7	855.705	0.01±0.00	0.01±0.00	0.01±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.01±0.00
C52:6	857.721	0.08±0.01	0.02±0.00	0.00±0.00	0.01±0.00	0.01±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.01±0.00
C52:5	859.737	0.36±0.01	0.04±0.00	0.01±0.00	0.01±0.00	0.03±0.00	0.01±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00
C52:4/C53:11	861.752	0.28±0.01	0.02±0.00	0.02±0.00	0.00±0.00	0.01±0.00	0.02±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00
C52:3/C53:10	863.768	0.24±0.03	0.00±0.00	0.01±0.00	0.01±0.00	0.01±0.00	0.01±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00
C52:2/C53:9	865.784	1.00±0.05	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.02±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00
C52:1/C53:8	867.799	0.88±0.03	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.01±0.00	0.01±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00
C53:4/C54:11	875.768	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00
C53:3/C54:10	877.784	0.00±0.00	0.05±0.01	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00
C53:2/C54:9	879.705	0.02±0.00	0.12±0.01	0.01±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00
C53:1/C54:8	881.721	0.06±0.01	0.11±0.01	0.03±0.00	0.02±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.02±0.00
C53:0/C54:7	883.737	0.11±0.01	0.06±0.00	0.03±0.00	0.09±0.01	0.04±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.09±0.01
C54:6	885.752	0.19±0.01	0.30±0.04	0.03±0.00	0.07±0.01	0.18±0.02	0.02±0.00	0.00±0.00	0.05±0.01
C54:5/C55:12	887.768	0.18±0.02	0.22±0.02	0.15±0.02	0.02±0.00	0.15±0.00	0.08±0.01	0.00±0.00	0.00±0.00
C54:4/C55:11	889.784	0.27±0.00	0.01±0.00	0.10±0.01	0.08±0.00	0.05±0.01	0.07±0.01	0.00±0.00	0.00±0.00
C54:3/C55:10	891.799	0.62±0.05	0.00±0.00	0.00±0.00	0.07±0.01	0.15±0.01	0.02±0.01	0.00±0.00	0.00±0.00
C54:2/C55:9	893.815	0.46±0.05	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.11±0.02	0.07±0.01	0.00±0.00	0.00±0.00
C55:4/C56:11	903.799	0.00±0.00	0.05±0.01	0.01±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.01±0.00	0.01±0.00
C55:3/C56:10	905.721	0.01±0.00	0.06±0.01	0.01±0.00	0.01±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.01±0.00
C55:2/C56:9	907.737	0.04±0.01	0.06±0.01	0.02±0.00	0.02±0.01	0.01±0.00	0.01±0.00	0.01±0.01	0.09±0.01
C55:1/C56:8	909.752	0.02±0.01	0.07±0.00	0.02±0.00	0.04±0.00	0.04±0.00	0.01±0.00	0.01±0.00	0.39±0.08
C55:0/C56:7	911.768	0.02±0.00	0.16±0.01	0.04±0.00	0.03±0.00	0.09±0.00	0.02±0.00	0.00±0.00	0.33±0.04
C56:6	913.784	0.06±0.01	0.11±0.01	0.08±0.01	0.03±0.00	0.07±0.00	0.05±0.00	0.00±0.00	0.01±0.00
C56:5/C57:12	915.799	0.07±0.01	0.03±0.01	0.06±0.01	0.05±0.01	0.07±0.01	0.04±0.01	0.00±0.00	0.00±0.00
C56:4/C57:11	917.815	0.02±0.01	0.00±0.00	0.01±0.00	0.04±0.01	0.11±0.01	0.03±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00
C56:3/C57:10	919.831	0.01±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.01±0.01	0.07±0.01	0.05±0.02	0.00±0.00	0.00±0.00
C57:3/C58:10	933.752	0.00±0.00	0.02±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.01±0.00	0.00±0.00	0.01±0.00	0.07±0.01
C57:2/C58:9	935.768	0.00±0.00	0.01±0.00	0.01±0.00	0.00±0.00	0.01±0.00	0.01±0.00	0.00±0.00	0.15±0.01
C57:1/C58:8	937.784	0.02±0.00	0.01±0.00	0.01±0.00	0.01±0.00	0.01±0.00	0.01±0.00	0.00±0.00	0.09±0.01
C57:0/C58:7/C59:14	939.799	0.02±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.01±0.00	0.01±0.00	0.02±0.00	0.00±0.00	0.01±0.00
C58:6/C59:13	941.815	0.01±0.01	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.01±0.00	0.01±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00
Total FA		5.39±0.42	1.60±0.20	0.67±0.10	0.66±0.11	1.29±0.14	0.57±0.11	0.08±0.04	1.37±0.21

Continued

TAG	[TAG+Li] ⁺	330(22:5)	332(22:4)	334(22:3)	336(22:2)	338(22:1)	340(22:0)
C48:3	807.705	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00
C48:2/C49:9	809.721	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00
C48:1/C49:8	811.737	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00
C48:0/C49:7	813.752	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.01±0.00
C50:5	831.705	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00
C50:4	833.721	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00
C50:3/C51:10	835.737	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00
C50:2/C51:9	837.752	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00
C50:1/C51:8	839.768	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00
C51:3/C52:10	849.752	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00
C51:2/C52:9	851.768	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00
C51:1/C52:8	853.690	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00
C51:0/C52:7	855.705	0.00±0.00	0.00±0.00	0.01±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00
C52:6	857.721	0.00±0.00	0.00±0.00	0.01±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00
C52:5	859.737	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00
C52:4/C53:11	861.752	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00
C52:3/C53:10	863.768	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00
C52:2/C53:9	865.784	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00
C52:1/C53:8	867.799	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00
C53:4/C54:11	875.768	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00
C53:3/C54:10	877.784	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00
C53:2/C54:9	879.705	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00
C53:1/C54:8	881.721	0.00±0.00	0.00±0.00	0.02±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00
C53:0/C54:7	883.737	0.01±0.00	0.00±0.00	0.06±0.00	0.01±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00
C54:6	885.752	0.03±0.00	0.00±0.00	0.04±0.01	0.02±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00
C54:5/C55:12	887.768	0.01±0.00	0.01±0.00	0.00±0.00	0.01±0.00	0.01±0.00	0.00±0.00
C54:4/C55:11	889.784	0.00±0.00	0.01±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.01±0.00	0.00±0.00
C54:3/C55:10	891.799	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00
C54:2/C55:9	893.815	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00
C55:4/C56:11	903.799	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00
C55:3/C56:10	905.721	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00
C55:2/C56:9	907.737	0.01±0.00	0.01±0.00	0.05±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00
C55:1/C56:8	909.752	0.03±0.00	0.01±0.00	0.22±0.04	0.02±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00
C55:0/C56:7	911.768	0.14±0.03	0.01±0.00	0.21±0.03	0.08±0.02	0.01±0.00	0.00±0.00
C56:6	913.784	0.12±0.01	0.07±0.01	0.01±0.00	0.08±0.01	0.04±0.01	0.00±0.00
C56:5/C57:12	915.799	0.00±0.00	0.05±0.01	0.03±0.01	0.00±0.00	0.04±0.00	0.02±0.00
C56:4/C57:11	917.815	0.00±0.00	0.00±0.00	0.02±0.00	0.02±0.00	0.01±0.00	0.02±0.00
C56:3/C57:10	919.831	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00	0.02±0.00	0.02±0.01	0.01±0.00
C57:3/C58:10	933.752	0.01±0.00	0.01±0.00	0.03±0.01	0.00±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00
C57:2/C58:9	935.768	0.02±0.01	0.01±0.00	0.08±0.01	0.01±0.00	0.00±0.00	0.00±0.00
C57:1/C58:8	937.784	0.05±0.00	0.01±0.00	0.06±0.00	0.03±0.00	0.01±0.00	0.00±0.00
C57:0/C58:7/C59:14	939.799	0.03±0.01	0.03±0.00	0.01±0.00	0.02±0.01	0.02±0.00	0.00±0.00
C58:6/C59:13	941.815	0.01±0.00	0.02±0.00	0.01±0.00	0.01±0.00	0.01±0.00	0.01±0.00
Total FA		0.48±0.08	0.27±0.05	0.88±0.14	0.35±0.07	0.19±0.04	0.10±0.03