

Putative ID	Ret. Time (min)	<i>m/z</i>	Adduct	Fatty Acids <sup>a</sup>	Accuracy (ppm)	N315 (x10 <sup>3</sup> )	Fold (N315-D8/N315)	<i>P</i> -value <sup>b</sup>
FA 14:0	0.77	227.200	[M-H] <sup>-</sup>		-6.9	9.1 ± 0.3	0.4	2.5 x 10 <sup>-5</sup>
FA 15:0	0.77	241.218	[M-H] <sup>-</sup>		1.7	24.3 ± 0.7	1.2	0.0067
FA 16:0	0.77	255.234	[M-H] <sup>-</sup>		3.2	71.0 ± 0.7	0.8	1.8 x 10 <sup>-5</sup>
FA 17:0	0.74	269.248	[M-H] <sup>-</sup>		-3.8	14.1 ± 0.4	1.8	6.9 x 10 <sup>-5</sup>
FA 18:1	0.71	281.248	[M-H] <sup>-</sup>		-0.7	34.8 ± 0.9	0.6	5.7 x 10 <sup>-5</sup>
FA 18:0	0.74	283.266	[M-H] <sup>-</sup>		4.9	103.5 ± 1.2	0.8	5.1 x 10 <sup>-5</sup>
FA 19:0	0.74	297.282	[M-H] <sup>-</sup>		7.5	11.5 ± 0.2	10.4	6.3 x 10 <sup>-7</sup>
FA 20:0	0.71	311.299	[M-H] <sup>-</sup>		10.3	46.0 ± 1.0	1.6	3.9 x 10 <sup>-5</sup>
FA 21:0	0.71	325.315	[M-H] <sup>-</sup>		10.2	2.1 ± 0.1	20.2	2.0 x 10 <sup>-8</sup>
FA 22:0	0.67	339.326	[M-H] <sup>-</sup>		-3.5	4.0 ± 0.2	3.8	2.2 x 10 <sup>-7</sup>
FA 23:0	0.67	353.341	[M-H] <sup>-</sup>		-4.3	1.2 ± 0.0	7.8	5.9 x 10 <sup>-9</sup>
MGDG 31:0	0.59	734.576	[M+NH <sub>4</sub> ] <sup>+</sup>		-1.7	9.5 ± 0.3	0.8	0.0017
MGDG 32:0	0.59	748.594	[M+NH <sub>4</sub> ] <sup>+</sup>		0.5	10.4 ± 0.3	1.7	2.3 x 10 <sup>-5</sup>
MGDG 33:0	0.59	762.610	[M+NH <sub>4</sub> ] <sup>+</sup>		0.9	21.6 ± 0.9	0.4	3.5 x 10 <sup>-5</sup>
MGDG 34:0	0.59	776.624	[M+NH <sub>4</sub> ] <sup>+</sup>		-0.7	5.7 ± 0.2	3.6	1.7 x 10 <sup>-7</sup>
MGDG 35:0	0.59	790.640	[M+NH <sub>4</sub> ] <sup>+</sup>		-0.2	12.0 ± 0.3	1.3	8.8 x 10 <sup>-5</sup>
MGDG 36:0	0.59	804.652	[M+NH <sub>4</sub> ] <sup>+</sup>		-4.4	2.8 ± 0.1	3.4	4.2 x 10 <sup>-7</sup>
DGDG 28:0	1.17	854.583	[M+NH <sub>4</sub> ] <sup>+</sup>		-0.3	10.0 ± 0.2	0.9	0.0032
DGDG 29:0	1.14	868.599	[M+NH <sub>4</sub> ] <sup>+</sup>		-0.5	40.8 ± 0.3	0.5	1.6 x 10 <sup>-7</sup>
DGDG 30:0	1.14	882.616	[M+NH <sub>4</sub> ] <sup>+</sup>	15:0	1.6	122.3 ± 1.2	1.1	3.8 x 10 <sup>-4</sup>
DGDG 31:0	1.14	896.633	[M+NH <sub>4</sub> ] <sup>+</sup>	16:0, 15:0, 17:0, 14:0	2.2	225.2 ± 2.0	0.3	4.6 x 10 <sup>-8</sup>
DGDG 32:0	1.08	910.649	[M+NH <sub>4</sub> ] <sup>+</sup>	17:0, 15:0	3.0	264.1 ± 0.8	1.7	2.5 x 10 <sup>-9</sup>
DGDG 33:0	1.08	924.665	[M+NH <sub>4</sub> ] <sup>+</sup>	18:0, 15:0	3.8	900.6 ± 3.1	0.5	5.8 x 10 <sup>-9</sup>
DGDG 34:0	1.05	938.680	[M+NH <sub>4</sub> ] <sup>+</sup>	19:0, 15:0	2.2	166.0 ± 1.5	2.8	1.9 x 10 <sup>-9</sup>
DGDG 35:0	1.02	952.697	[M+NH <sub>4</sub> ] <sup>+</sup>	20:0, 15:0	3.7	551.9 ± 6.0	1.1	7.6 x 10 <sup>-5</sup>
DGDG 36:0	0.98	966.708	[M+NH <sub>4</sub> ] <sup>+</sup>	21:0, 15:0, 17:0, 19:0	-0.5	44.3 ± 1.0	6.1	6.6 x 10 <sup>-9</sup>
DGDG 37:0	1.02	980.723	[M+NH <sub>4</sub> ] <sup>+</sup>		-1.0	10.5 ± 0.2	2.8	3.9 x 10 <sup>-8</sup>
DGDG 38:0	1.02	994.735	[M+NH <sub>4</sub> ] <sup>+</sup>		-5.1	2.4 ± 0.0	4.4	1.2 x 10 <sup>-7</sup>
PG p29:1	1.39	661.448	[M-H] <sup>-</sup>		4.0	93.6 ± 11.5	0.1	4.1 x 10 <sup>-4</sup>
PG p30:1	1.36	675.463	[M-H] <sup>-</sup>		3.3	68.2 ± 8.3	0.02	3.4 x 10 <sup>-4</sup>
PG p31:1	1.36	689.478	[M-H] <sup>-</sup>		2.8	69.8 ± 8.3	0.2	7.6 x 10 <sup>-4</sup>
PG p32:1	1.33	703.495	[M-H] <sup>-</sup>		3.7	112.4 ± 12.7	0.1	3.1 x 10 <sup>-4</sup>
PG p33:1	1.33	717.508	[M-H] <sup>-</sup>		-0.1	33.5 ± 4.4	0.4	0.0033
PG p34:1	1.29	731.523	[M-H] <sup>-</sup>		0.1	60.7 ± 6.8	0.2	4.7 x 10 <sup>-4</sup>
PG 24:0	2.45	609.378	[M-H] <sup>-</sup>		1.1	27.7 ± 3.7	0.01	5.0 x 10 <sup>-4</sup>
PG 25:0	2.41	623.396	[M-H] <sup>-</sup>		4.5	76.6 ± 8.6	0.1	3.6 x 10 <sup>-4</sup>
PG 26:0	2.38	637.408	[M-H] <sup>-</sup>		-0.8	16.6 ± 2.1	0.1	4.7 x 10 <sup>-4</sup>
PG 27:0	2.32	651.424	[M-H] <sup>-</sup>		-0.6	19.1 ± 2.2	0.2	5.3 x 10 <sup>-4</sup>
PG 28:0	2.29	665.441	[M-H] <sup>-</sup>		1.2	57.9 ± 5.5	0.1	1.6 x 10 <sup>-4</sup>
PG 29:0	2.26	679.457	[M-H] <sup>-</sup>		2.2	140.7 ± 11.4	0.04	7.1 x 10 <sup>-5</sup>

PG 30:0	2.22	693.475	[M-H] <sup>-</sup>	15:0, 14:0, 16:0	5.9	503.0 ± 38.3	0.1	8.2 x 10 <sup>-5</sup>
PG 31:0	2.17	707.490	[M-H] <sup>-</sup>	15:0, 16:0	4.5	598.9 ± 48.9	0.0	7.8 x 10 <sup>-5</sup>
PG 32:0	2.17	721.506	[M-H] <sup>-</sup>	15:0, 17:0, 14:0, 18:0	4.7	519.9 ± 39.2	0.3	2.6 x 10 <sup>-4</sup>
PG 33:0	2.10	735.521	[M-H] <sup>-</sup>	15:0, 18:0	4.4	807.9 ± 59.2	0.1	6.2 x 10 <sup>-5</sup>
PG 34:0	2.01	749.535	[M-H] <sup>-</sup>	15:0, 19:0, 14:0, 20:0	1.8	226.6 ± 15.7	0.8	0.011
PG 35:0	2.01	763.552	[M-H] <sup>-</sup>	15:0, 20:0	3.8	413.5 ± 23.9	0.3	5.6 x 10 <sup>-5</sup>
PG 36:0	1.98	777.563	[M-H] <sup>-</sup>	15:0, 21:0	-2.2	15.9 ± 1.1	3.6	2.3 x 10 <sup>-5</sup>
CL 55:0	4.81	612.406	[M-2H] <sup>-2</sup>		-4.0	1.4 ± 0.2	0.001	2.5 x 10 <sup>-4</sup>
CL 56:0	4.81	619.414	[M-2H] <sup>-2</sup>	15:0, 18:0, 16:0, 14:0, 17:0	-4.0	2.1 ± 0.2	0.0001	2.5 x 10 <sup>-4</sup>
CL 57:0	4.86	626.421	[M-2H] <sup>-2</sup>	15:0, 14:0, 18:0, 17:0, 16:0	-4.6	1.6 ± 0.2	0.02	1.5 x 10 <sup>-4</sup>
CL 58:0	4.86	633.430	[M-2H] <sup>-2</sup>	15:0, 18:0, 14:0, 20:0, 13:0	-3.7	2.3 ± 0.2	0.005	4.9 x 10 <sup>-5</sup>
CL 59:0	4.89	640.436	[M-2H] <sup>-2</sup>		-6.1	1.2 ± 0.1	0.1	6.4 x 10 <sup>-5</sup>
CL 60:0	4.89	647.445	[M-2H] <sup>-2</sup>	15:0, 14:0, 16:0, 18:0	-4.0	1.9 ± 0.1	0.03	4.5 x 10 <sup>-5</sup>
CL 61:0	4.93	654.453	[M-2H] <sup>-2</sup>	15:0, 16:0, 14:0	-3.6	1.7 ± 0.0	0.03	8.6 x 10 <sup>-7</sup>
CL 62:0	5.01	661.461	[M-2H] <sup>-2</sup>	15:0, 16:0, 18:0, 14:0, 17:0, 13:0	-3.7	2.1 ± 0.1	0.1	1.4 x 10 <sup>-5</sup>
CL 63:0	5.05	668.468	[M-2H] <sup>-2</sup>	15:0, 14:0, 18:0	-3.9	2.7 ± 0.2	0.0	1.7 x 10 <sup>-5</sup>
PA 29:0	6.20	605.416	[M-H] <sup>-</sup>		-4.7	2.4 ± 0.1	0.3	6.5 x 10 <sup>-5</sup>
PA 30:0	6.41	619.434	[M-H] <sup>-</sup>	15:0	-1.4	14.1 ± 0.6	0.9	0.27
PA 31:0	6.17	633.448	[M-H] <sup>-</sup>	16:0, 15:0	-1.9	12.3 ± 2.1	0.3	0.0040
PA 32:0	6.44	647.463	[M-H] <sup>-</sup>	17:0, 15:0	-3.8	20.4 ± 1.5	2.6	3.9 x 10 <sup>-4</sup>
PA 33:0	6.36	661.479	[M-H] <sup>-</sup>	18:0, 15:0	-3.3	17.7 ± 4.4	0.5	0.069
PA 34:0	6.41	675.494	[M-H] <sup>-</sup>	19:0, 15:0	-4.2	12.4 ± 1.5	3.2	0.0082
PA 35:0	6.36	689.509	[M-H] <sup>-</sup>	20:0, 15:0	-5.7	6.4 ± 1.9	1.9	0.085
PA 36:0	6.41	703.525	[M-H] <sup>-</sup>	21:0, 15:0	-4.8	1.2 ± 0.2	7.3	0.020
LysylPG 24:0	7.91	739.488	[M+H] <sup>+</sup>		1.8	16.7 ± 0.3	0.1	1.3 x 10 <sup>-7</sup>
LysylPG 25:0	7.87	753.505	[M+H] <sup>+</sup>		2.8	50.4 ± 0.6	0.2	1.0 x 10 <sup>-7</sup>
LysylPG 26:0	7.84	767.519	[M+H] <sup>+</sup>		0.9	7.3 ± 0.1	0.2	3.4 x 10 <sup>-7</sup>
LysylPG 27:0	7.84	781.534	[M+H] <sup>+</sup>		0.6	8.8 ± 0.3	0.3	5.7 x 10 <sup>-6</sup>
LysylPG 28:0	7.80	795.550	[M+H] <sup>+</sup>		1.2	29.8 ± 0.8	0.1	9.6 x 10 <sup>-7</sup>
LysylPG 29:0	7.75	809.567	[M+H] <sup>+</sup>		2.2	80.2 ± 2.0	0.04	6.5 x 10 <sup>-7</sup>
LysylPG 30:0	7.72	823.586	[M+H] <sup>+</sup>	15:0	6.2	318.1 ± 6.1	0.1	3.9 x 10 <sup>-7</sup>
LysylPG 31:0	7.68	837.601	[M+H] <sup>+</sup>	15:0, 16:0	5.0	328.6 ± 5.3	0.1	1.7 x 10 <sup>-7</sup>
LysylPG 32:0	7.68	851.615	[M+H] <sup>+</sup>	15:0, 17:0	4.1	266.3 ± 5.3	0.5	5.6 x 10 <sup>-6</sup>
LysylPG 33:0	7.65	865.631	[M+H] <sup>+</sup>	15:0, 18:0	4.1	420.9 ± 5.2	0.1	2.4 x 10 <sup>-7</sup>
LysylPG 34:0	7.65	879.644	[M+H] <sup>+</sup>	15:0, 19:0	0.2	92.8 ± 2.5	1.2	4.0 x 10 <sup>-4</sup>
LysylPG 35:0	7.60	893.661	[M+H] <sup>+</sup>	15:0, 20:0	1.8	164.1 ± 2.4	0.3	4.8 x 10 <sup>-7</sup>
LysylPG 36:0	7.60	907.669	[M+H] <sup>+</sup>		-5.9	6.6 ± 0.4	3.1	2.3 x 10 <sup>-6</sup>