

SUPPLEMENT

Tokareva A.O., Chagovets V.V., Starodubtseva N.L., Rodionov V.V., Kometova V.V., Chingin K.S., Frankevich V.E. (2022) Lipidomic markers of breast cancer malignant tumor histological types. *Biomeditsinskaya khimiya*, **68**(5), 375-382.

DOI: 10.18097/PBMC20226805375

Table S1. Lipid level in margin tissue in positive ion mode, according tumor histological types.

Format of value – median(1st quartile;3rd quartile).

Lipid	Ductal	Lobular	Mixed	Special
OxTG 14:0_16:1_18:2(OH)	2,6e4(1,6e4;3,9e4)	2,8e4(2,1e4;3,5e4)	1,9e4(1,5e4;2,3e4)	1,2e4(1,1e4;1,3e4)
OxTG 14:1 OH_16:1(OOOO)_18:1	7,0e2(3,5e2;1,3e3)	2,1e2(8,2e1;4,5e2)	9,3e2(6,2e2;1,5e3)	1,5e3(1,4e3;1,9e3)
OxTG 16:0_18:1_22:5(OOO)	3,3e3(1,1e3;3,8e3)	1,1e3(7,0e2;1,5e3)	2,7e3(2,2e3;4,9e3)	4,7e3(4,6e3;5,7e3)
OxTG 16:0_18:2_18:3(OO)	7,4e3(6,0e3;1,2e4)	7,0e3(5,1e3;1,3e4)	1,7e4(1,1e4;3,9e4)	4,5e4(2,8e4;4,6e4)
OxTG 18:0_18:0_22:5(OH)	2,1e3(1,5e3;4e3)	1,5e3(9,9e2;3,4e3)	4,2e3(3,5e3;6,2e3)	6,0e3(5,0e3;7,2e3)
OxTG 18:0_22:5_16:1(OOO)	2,3e3(8,3e2;3,4e3)	9,4e2(4,5e2;1,2e3)	1,7e3(1,2e3;2,2e3)	4,2e3(3,4e3;5,1e3)
OxTG 18:1_18:1_22:5(OOO)	3,9e2(2,6e2;6,5e2)	1,7e2(1,5e2;2,9e2)	3,8e2(2,8e2;4,6e2)	7,5e2(6,4e2;9,0e2)
OxTG 22:1 (OH)_18:4(OO)_14:1	4,3e3(2,4e3;7,1e3)	2,1e3(1,5e3;2,9e3)	3,7e3(2,5e3;6,4e3)	8,6e3(4,8e3;1,1e4)
OxTG 22:3 (OH)_16:1(Ke,OH)_20:4	2,8e2(1,3e2;4,2e2)	1,2e2(9,5e01;1,7e2)	2,3e2(1,7e2;3,2e2)	4,9e2(3,2e2;5,5e2)
PC 12:0_14:1	3,8e4(1,6e4;1,7e5)	2,9e4(1,1e4;5,7e4)	1,6e5(6,7e4;2,1e5)	9,6e4(6,8e4;2,0e5)
PC 14:0_20:4	1,1e4(9,0e3;1,3e4)	6,8e3(5,3e3;9,6e3)	6,5e3(4,2e3;9,0e3)	6,9e3(4,5e3;8,6e3)
PC 16:1_16:1	1,4e3(1,2e3;1,9e3)	1,7e3(9,7e2;2,0e3)	1,0e3(8,0e2;1,3e3)	1,4e3(1,4e3;2,6e3)
PC 16:1_20:5	2,7e3(2,4e3;3,0e3)	2,0e3(1,2e3;2,6e3)	1,4e3(9,5e2;2,1e3)	1,8e3(1,5e3;2,8e3)
PC 18:1_22:6	3,3e4(3,0e4;3,6e4)	2,3e4(1,8e4;2,9e4)	1,9e4(1,4e4;2,5e4)	2,4e4(1,5e4;2,8e4)
PC 18:2_22:6	2,5e4(2,2e4;3,0e4)	1,7e4(1,6e4;1,9e4)	1,6e4(3,3e3;2,2e4)	2,2e4(1,2e4;3,0e4)
PC O-18:1/18:1	1,3e4(9,9e3;1,5e4)	2,0e4(1,5e4;2,3e4)	1,6e4(1,4e4;2,1e4)	1,4e4(9,9e3;2,0e4)
PC P-18:0/22:6	7,1e3(6,0e3;1,0e4)	5,1e3(4,0e3;6,2e3)	5,5e3(5,0e3;7,6e3)	7,4e3(7,0e3;8,7e3)
PE 16:0_20:4	1,3e4(1,2e4;2,0e4)	1,4e4(7,7e3;1,8e4)	9,3e3(6,7e3;1,1e4)	9,9e3(7,9e3;1,1e4)
PE 18:0_22:3	1,7e3(1,3e3;2,5e3)	5,5e2(3,8e2;1,3e3)	5,8e2(3,0e2;1,3e3)	1,3e3(9,0e2;1,5e3)
PE 18:1_20:0	3,2e4(2,2e4;4,8e4)	2,3e4(1,7e4;2,7e4)	1,9e4(1,3e4;2,2e4)	2,4e4(1,8e4;4,0e4)
PE 18:1_20:1	3,7e3(3,2e3;4,1e3)	2,3e3(1,6e3;3,2e3)	2,0e3(9,2e2;2,6e3)	3,0e3(2,3e3;3,4e3)
PE 18:1_20:4	1,1e4(9,0e3;1,7e4)	6,0e3(5,3e3;8,3e3)	5,9e3(4,0e3;9,9e3)	7,6e3(6,0e3;9,7e3)
PE P-16:0/18:2	2,6e4(1,5e4;3,2e4)	5,8e4(4,2e4;7,1e4)	3,0e4(2,4e4;4,6e4)	2,3e4(1,5e4;3,3e4)
PE P-18:0/18:2	3,8e4(2,9e4;5,3e4)	7,6e4(5,7e4;1,1e5)	4,0e4(3,2e4;5,2e4)	2,6e4(1,9e4;4,3e4)
PE P-18:0/22:6	6,0e3(5,3e3;8,7e3)	4,8e3(4,2e3;5,5e3)	4,4e3(3,6e3;5,5e3)	5,6e3(4,8e3;8,1e3)
PE P-18:1/18:2	2,0e4(1,6e4;2,4e4)	2,8e4(2,5e4;3,2e4)	2,2e4(1,7e4;2,7e4)	1,6e4(1,2e4;1,9e4)
PEtOH 18:1_22:2	1,4e3(7,9e2;1,8e3)	4,5e2(1,7e2;7,3e2)	4,8e2(1,3e2;1,3e3)	1,6e3(9,4e2;2,2e3)
PG 22:0_22:0	5,5e3(4,6e3;8,4e3)	5,9e3(4,7e3;7,4e3)	9,2e3(7,2e3;1,1e4)	1,2e4(9,4e3;1,3e4)
PS O-16:0/18:1	4,3e2(2,3e2;5,2e2)	2,3e2(1,6e2;3,2e2)	1,9e2(1,5e2;2,5e2)	2,5e2(2,0e2;3,0e2)
SM d16:1/18:3	1,1e4(7,8e3;1,3e4)	7,4e3(4,5e3;1,2e4)	7,3e3(5,4e3;9,8e3)	5,1e3(3,5e3;7,9e3)
TG 10:0_12:0_18:2	2,0e5(5,5e4;3,2e5)	5,4e5(3,8e5;6,6e5)	1,4e5(1,2e5;2,3e5)	7,6e4(5,1e4;1,3e5)
TG 10:0_18:2_18:2	1,6e5(1,1e5;2,1e5)	2,4e5(1,9e5;2,7e5)	1,7e5(1,4e5;2,0e5)	1,2e5(9,8e4;1,4e5)
TG 12:0_14:0_18:2	4,5e5(3,0e5;7,8e5)	8,0e5(6,9e5;8,5e5)	5,4e5(4,8e5;6,2e5)	4,0e5(3,5e5;4,8e5)
TG 12:0_16:1_18:2	4,3e5(3,4e5;5,1e5)	5,2e5(4,7e5;6,3e5)	4,2e5(3,8e5;4,6e5)	3,5e5(3,5e5;3,8e5)
TG 14:1_16:1_18:2	1,2e4(7,6e3;1,4e4)	1,0e4(7,7e3;1,6e4)	1,6e4(1,2e4;1,8e4)	2,0e4(1,5e4;2,3e4)
TG 16:1_16:1_18:3	4,6e3(2,8e3;6,9e3)	3,8e3(2,8e3;4,6e3)	5,8e3(4,5e3;7,0e3)	7,1e3(6,4e3;7,6e3)
TG 16:1_16:1_18:4	2,2e3(8,4e2;4,2e3)	1,4e3(1,0e3;1,8e3)	3,0e3(1,4e3;3,6e3)	4,2e3(3,7e3;4,6e3)
TG 16:1_18:1_18:4	2,5e3(1,2e3;4,2e3)	1,5e3(1,2e3;1,8e3)	3,4e3(2,5e3;3,9e3)	4,4e3(3,7e3;5,3e3)

Table S2. Lipid level in margin tissue in negative ion mode, according tumor histological types.

Format of value – median(1st quartile;3rd quartile).

Lipid	Ductal	Lobular	Mixed	Special
CL 16:0_18:1_20:4_22:5	4,4e4(3,7e4;6,2e4)	3,0e4(2,6e4;3,6e4)	3,3e4(2,2e4;3,7e4)	3,0e4(2,3e4;3,5e4)
CL 16:0_18:2_20:4_22:5	9,0e4(6,8e4;1,06e5)	6,2e4(5,1e4;7,2e4)	5,9e4(4,0e4;7,7e4)	5,5e4(4,1e4;7,5e4)
CL 18:0_18:1_18:2_18:3	9,6e3(7,2e3;1,3e4)	1,4e4(1,1e4;1,7e4)	8,0e3(6,5e3;1,3e4)	4,9e3(4,5e3;8,7e3)
CL 18:0_18:1_18:2_20:3	6,7e3(5,5e3;9,0e3)	5,1e3(3,8e3;7,6e3)	4,1e3(2,4e3;5,1e3)	3,6e3(2,5e3;3,8e3)
MGDG 18:0_20:2	3,9e4(3,4e4;4,9e4)	2,0e4(9,1e3;3,6e4)	2,0e4(1,4e4;3,4e4)	2,3e4(9,9e3;4,1e4)
OxCL 16:0_20:3_18:3(OOH)2_20:4	3,8e4(3,5e4;5,0e4)	2,8e4(2,0e4;3,5e4)	2,7e4(1,5e4;3,0e4)	2,5e4(1,2e4;3,2e4)
OxCL 18:1_18:2_20:3_20:3(OOH)	7,7e3(5,9e3;8,7e3)	5,4e3(3,3e3;5,8e3)	3,9e3(2,9e3;5,2e3)	4,2e3(3,2e3;5,0e3)
OxCL 18:2_20:3(OH)_20:3_20:4	1,7e4(1,3e4;2,3e4)	1,1e4(9,1e3;1,3e4)	9,4e3(7,5e3;1,2e4)	9,9e3(8,2e3;1,2e4)
OxPC 16:0_14:1(COOH)	1,1e5(8,0e4;1,4e5)	6,1e4(5,7e4;6,7e4)	7,4e4(4,6e4;9,1e4)	9,8e4(5,3e4;1,0e5)
OxPC 20:3_18:2(OOO)	1,7e4(1,5e4;2,17e4)	1,5e4(1,2e4;1,7e4)	1,4e4(1,0e4;1,6e4)	1,1e4(9,0e3;1,4e4)
OxPE 20:2_18:2(OOO)	9,6e3(6,8e3;1,1e4)	4,9e3(4,0e3;6,5e3)	5,7e3(4,3e3;8,4e3)	8,1e3(4,3e3;9,1e3)
PC 14:0_20:4	2,2e3(1,8e3;2,5e3)	1,7e3(1,4e3;1,9e3)	1,4e3(9,1e2;1,8e3)	1,6e3(1,3e3;1,9e3)
PC 16:0_20:2	3,2e3(2,5e3;4,4e3)	2,7e3(1,6e3;3,9e3)	2,0e3(1,7e3;2,7e3)	1,9e3(1,7e3;2,5e3)
PC 18:0_20:4	8,2e4(6,4e4;9,5e4)	3,9e4(3,7e4;6,9e4)	4,7e4(3,5e4;6,5e4)	4,5e4(1,9e4;8,2e4)
PC 18:1_18:2	1,2e5(1,1e5;1,4e5)	1,0e5(7,3e4;1,1e5)	6,5e4(4,9e4;1,1e5)	6,5e4(5,7e4;9,3e4)
PC 18:1_20:4	3,8e4(3,3e4;5,0e4)	1,9e4(8,7e3;2,7e4)	2,2e4(1,3e4;3,0e4)	2,4e4(1,4e4;3,2e4)
PE 16:0_20:4	1,5e4(1,2e4;2,0e4)	1,1e4(8,4e3;1,6e4)	8,6e3(5,1e3;1,2e4)	8,2e3(5,5e3;8,4e3)
PE 18:0_20:3	2,6e4(1,8e4;2,9e4)	1,7e4(1,2e4;2,1e4)	1,6e4(8,9e3;2,1e4)	1,3e4(1,1e4;1,6e4)
PE 18:0_20:4	8,2e4(7,5e4;1,1e5)	5,7e4(4,2e4;7,5e4)	5,6e4(3,1e4;6,4e4)	5,3e4(2,5e4;6,6e4)
PE 18:1_20:4	4,2e3(2,9e3;5,5e3)	2,6e3(1,7e3;3,5e3)	2,5e3(1,7e3;3,1e3)	1,7e3(1,4e3;2,4e3)
PG 20:4_20:4	1,4e4(1,2e4;1,7e4)	1,1e4(9,0e3;1,3e4)	1,1e4(8,0e3;1,3e4)	1,1e4(7,9e3;1,3e4)
PC O-18:1/22:6	9,1e3(7,1e3;1,0e4)	1,1e4(7,5e3;1,5e4)	6,3e3(5,5e3;8,9e3)	4,7e3(4,1e3;6,9e3)
PE P-16:0/20:4	1,4e5(1,1e5;1,7e5)	9,2e4(8,1e4;1,3e5)	9,3e4(6,6e4;1,5e5)	8,8e4(5,2e4;9,7e4)
PE P-18:1/18:2	2,1e4(1,7e4;2,9e4)	3,2e4(2,4e4;3,7e4)	1,8e4(1,5e4;2,9e4)	1,1e4(1,0e4;2,0e4)
SM d14:0/18:1	1,6e4(1,1e4;1,9e4)	1,1e4(7,8e3;1,6e4)	1,0e4(7,7e3;1,4e4)	6,7e3(5,4e3;9,2e3)

Table S3. Lipid level in tumor tissue in positive ion mode, according tumor histological types.

Format of value – median(1st quartile;3rd quartile).

Lipid	Ductal	Lobular	Mixed	Special
Cer-NS d18:1/24:0	1,4e4(1,2e4;1,9e4)	7,2e3(4,9e3;9,5e3)	9,2e3(4,7e3;1,2e4)	1,5e4(7,9e3;1,6e4)
DG 18:1_20:0	3,4e3(1,7e3;5,2e3)	1,2e3(7,3e2;2,7e3)	1,7e3(1,0e3;2,0e3)	1,6e3(1,1e3;2,6e3)
OxTG 16:0_18:2_8:0(CHO)	4,6e3(4,0e3;5,4e3)	3,1e3(2,4e3;3,6e3)	3,3e3(2,7e3;4,8e3)	3,3e3(3,0e3;3,7e3)
PC 18:0_20:5	7,7e4(7,3e4;9,3e4)	1,1e5(9,6e4;1,3e5)	7,8e4(6,9e4;9,1e4)	1,0e5(9,6e4;1,1e5)
PC P-18:0/22:6	9,6e3(7,9e3;1,3e4)	7,7e3(5,4e3;8,2e3)	7,5e3(5,4e3;1,1e4)	1,0e4(8,4e3;1,4e4)
PE 18:1_20:4	2,5e3(2,2e3;3,6e3)	4,6e3(3,8e3;5,0e3)	2,9e3(2,1e3;3,3e3)	3,7e3(3,1e3;4,1e3)
PE 20:4_20:5	5,0e3(4,1e3;6,2e3)	2,9e3(2,5e3;4,1e3)	4,1e3(3,2e3;4,9e3)	5,1e3(4,1e3;5,7e3)
PE P-16:0/18:2	1,2e4(7,2e3;2,3e4)	3,3e4(2,0e4;4,7e4)	1,4e4(8,0e3;2,2e4)	2,1e4(1,2e4;2,8e4)
PE P-18:0/22:6	7,1e3(5,8e3;8,8e3)	5,3e3(4,8e3;6,1e3)	5,7e3(4,2e3;7,1e3)	8,5e3(6,2e3;1,2e4)
PG 18:1_22:6	6,2e3(3,4e3;8,9e3)	1,7e3(1,4e3;3,1e3)	2,6e3(1,3e3;8,2e3)	4,8e3(4,0e3;1,5e4)
PG 18:2_22:6	6,1e3(3,1e3;7,7e3)	2,0e3(1,1e3;3,5e3)	2,8e3(8,7e2;6,7e3)	5,9e3(4,2e3;9,7e3)
PG 22:6_22:6	2,9e3(9,5e2;4,5e3)	7,8e2(6,0e2;1,7e3)	8,5e2(6,0e2;4,0e3)	2,6e3(2,2e3;4,0e3)
SM d16:0/16:0	2,1e4(1,2e4;2,6e4)	1,1e4(5,4e3;1,7e4)	1,0e4(7,9e3;1,4e4)	1,2e4(9,6e3;1,6e4)
SM d18:1/18:0	4,3e4(3,9e4;5,7e4)	9,5e4(7,4e4;1,1e5)	6,2e4(5,0e4;8,5e4)	6,2e4(5,0e4;1,0e5)
TG 18:2_18:2_22:6	3,2e4(1,7e4;5,5e4)	1,6e4(1,3e4;2,1e4)	2,9e4(2,5e4;4,2e4)	4,6e4(4,3e4;5,6e4)

Table S4. Lipid level in tumor tissue in negative ion mode, according tumor histological types.

Format of value – median(1st quartile;3rd quartile).

Lipid	Ductal	Lobular	Mixed	Special
CL 16:0_20:1_22:5_22:6	2,5e4(2,0e4;3,3e4)	1,4e4(1,2e4;1,5e4)	1,3e4(7,9e3;2,2e4)	2,2e4(1,5e4;3,3e4)
CL 18:1_20:4_22:5_22:0	1,1e4(9,4e3;1,4e4)	4,3e3(3,6e3;6,3e3)	6,9e3(5,2e3;8,6e3)	9,4e3(7,7e3;1,2e4)
OxPC 16:0_14:1(COOH)	2,4e5(1,4e5;2,8e5)	1,2e5(1,1e5;1,6e5)	1,6e5(8,9e4;2,4e5)	1,9e5(1,8e5;2,3e5)
OxPE 20:2_18:2(OOO)	2,2e4(1,7e4;2,8e4)	1,3e4(9,3e3;1,5e4)	1,7e4(1,1e4;2,1e4)	2,1e4(1,9e4;2,7e4)
PC 18:1_22:4	1,5e4(1,3e4;1,9e4)	1,3e4(1,1e4;1,4e4)	1,0e4(4,0e3;1,3e4)	1,5e4(1,3e4;1,7e4)
PC 18:2_22:6	7,7e3(5,6e3;8,5e3)	3,7e3(2,6e3;4,8e3)	3,4e3(2,8e3;4,4e3)	6,5e3(3,9e3;8,1e3)
PE P-18:0/22:5	5,7e4(5,0e4;7,3e4)	3,4e4(2,8e4;4,1e4)	3,3e4(1,8e4;4,7e4)	5,1e4(3,3e4;6,5e4)
PE P-18:0/22:6	4,9e4(3,9e4;6,6e4)	2,9e4(1,9e4;3,0e4)	2,6e4(1,6e4;4,6e4)	4,5e4(3,1e4;6,4e4)

Figure S1. Boxplot of lipids, which are characterized molecular profile of margin tissue according tumor histological types (positive ion mode).

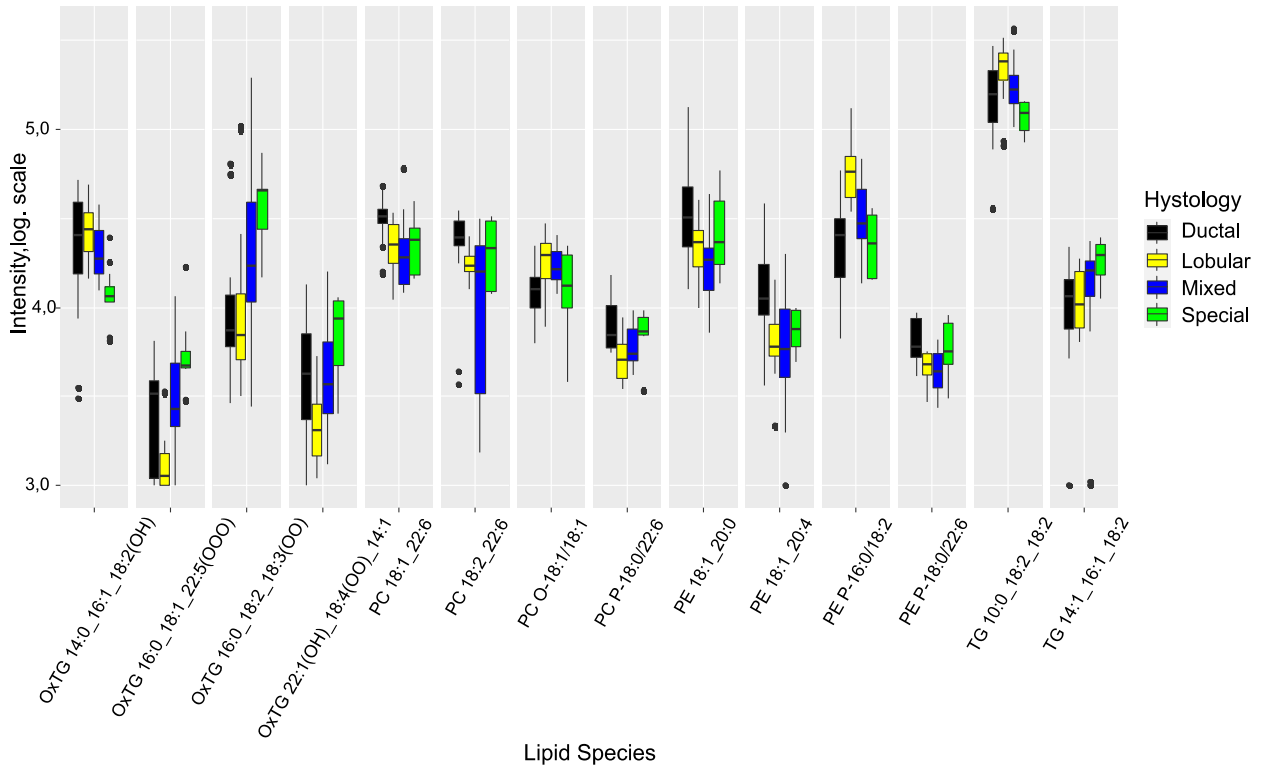


Figure S2. Boxplot of lipids, which are characterized molecular profile of margin tissue according tumor histological types (negative ion mode).

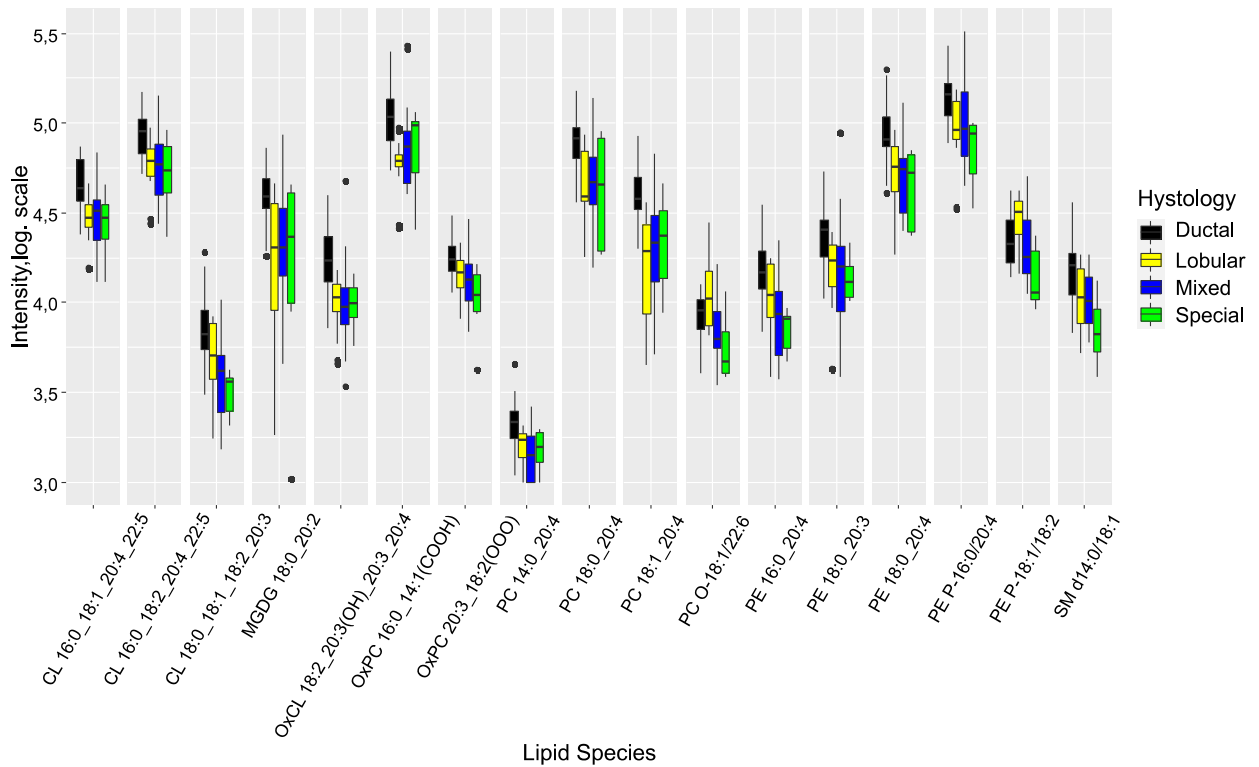


Figure S3. Boxplot of lipids, which are characterized molecular profile of tumor tissue according tumor histological types (positive ion mode).

