

ДОПОЛНИТЕЛЬНЫЕ МАТЕРИАЛЫ

Токарева А.О., Чаговец В.В., Стародубцева Н.Л., Родионов В.В., Кометова В.В., Чингин К.С., Франкевич В.Е. (2022) Липидомные маркеры гистологических типов злокачественной опухоли молочной железы. Биомедицинская химия, 68(5), 375-382.

DOI: 10.18097/PBMC20226805375

Таблица S1. Уровни липидов пограничной ткани в режиме положительных ионов, характеризующих гистологические типы опухоли. Формат записи значений – медиана(1-ый квартиль; 3-й квартиль).

Липид	Протоковый	Дольковый	Смешанный	Специфический
ОxTG 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)
ОxTG 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)
ОxTG 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)
ОxTG 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)
ОxTG 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)
ОxTG 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)
ОxTG 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)
ОxTG 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)
ОxTG 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)

Таблица S2. Уровни липидов пограничной ткани в режиме отрицательных ионов, характеризующих гистологические типы опухоли (Формат записи значений – медиана(1-ый квартиль; 3-й квартиль).

Липид	Протоковый	Дольковый	Смешанный	Специфический
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)
ОxCL 16:0_20:3_18:3(ООН)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)
ОxCL 18:1_18:2_20:3_20:3(ООН)	7,7e3(5,9e3;8,7e3)	5,4e3(3,3e3;5,8e3)	3,9e3(2,9e3;5,2e3)	4,2e3(3,2e3;5,0e3)
ОxCL 18:2_20:3(ОН)_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)
ОxPC 16:0_14:1(СООН)	1,1e5(8,0e4;1,4e5)	6,1e4(5,7e4;6,7e4)	7,4e4(4,6e4;9,1e4)	9,8e4(5,3e4;1,0e5)
ОxPC 20:3_18:2(ООО)	1,7e4(1,5e4;2,1e4)	1,5e4(1,2e4;1,7e4)	1,4e4(1,0e4;1,6e4)	1,1e4(9,0e3;1,4e4)
ОxPE 20:2_18:2(ООО)	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)

Таблица S3. Уровни липидов опухолевой ткани в режиме положительных ионов, характеризующих гистологические типы опухоли. Формат записи значений – медиана(1-ый квартиль; 3-й квартиль).

Липид	Протоковый	Дольковый	Смешанный	Специфический
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)
ОxTG 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)

Таблица S4. Уровни липидов опухолевой ткани в режиме отрицательных ионов, характеризующих гистологические типы опухоли. Формат записи значений – медиана(1-ый квартиль; 3-й квартиль).

Липиды	Протоковый	Дольковый	Смешанный	Специфический
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)
ОxPC 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)
ОxPE 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)

Рисунок S1. Диаграмма размаха липидов, характеризующих молекулярный профиль пограничной ткани в зависимости от гистологического типа опухоли (режим положительных ионов).

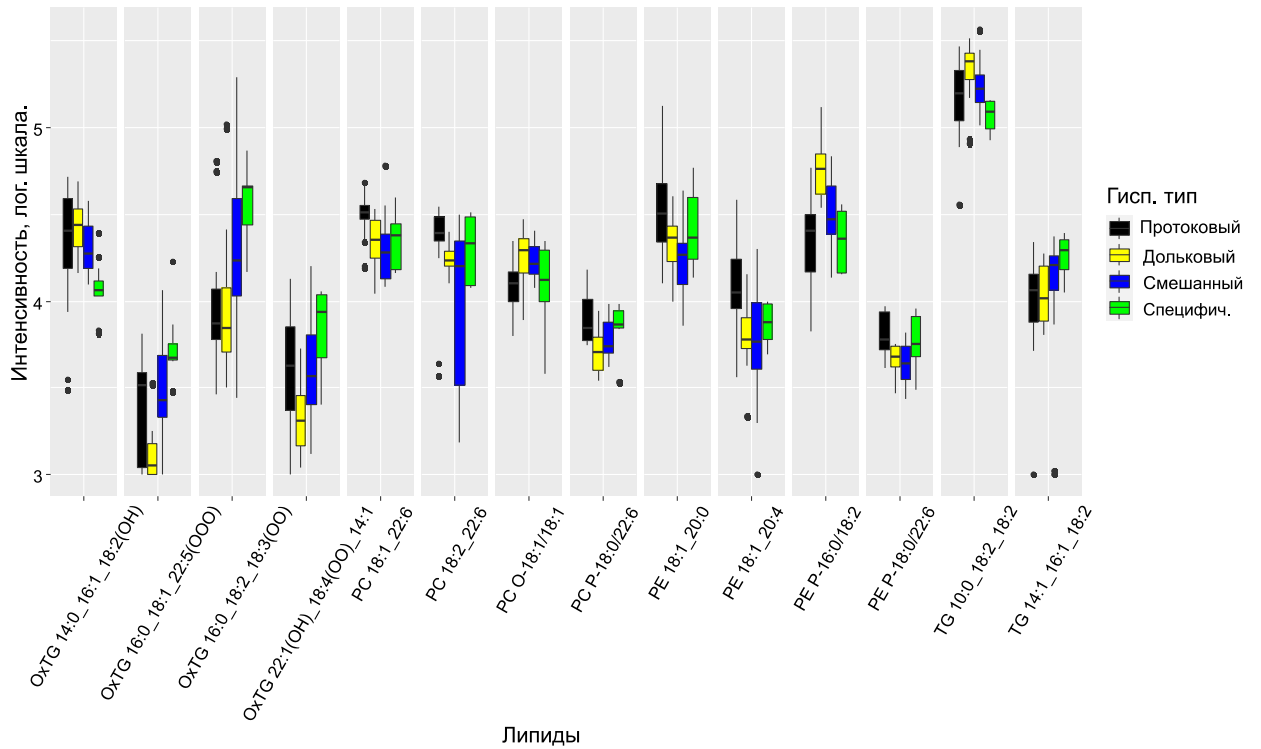


Рисунок S2. Диаграмма размаха липидов, характеризующих молекулярный профиль пограничной ткани в зависимости от гистологического типа опухоли (режим отрицательных ионов).

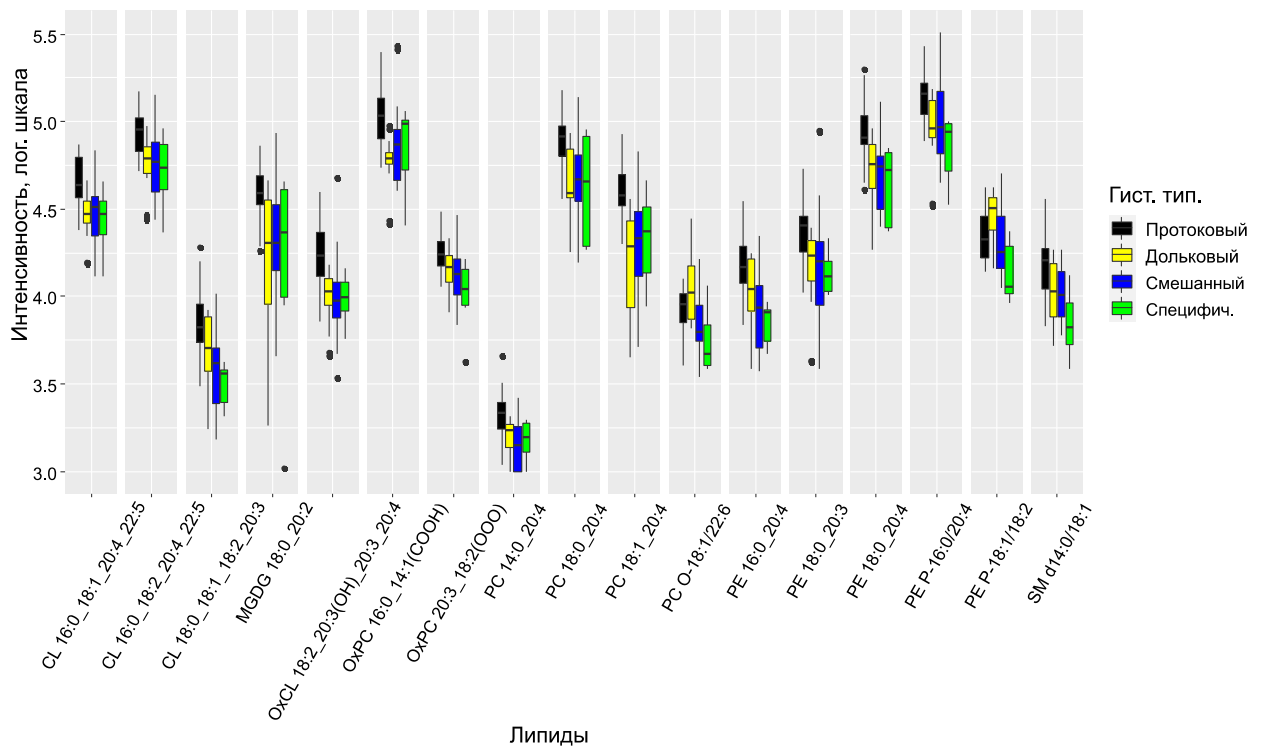


Рисунок S3. Диаграмма размаха липидов, характеризующих молекулярный профиль опухолевой ткани в зависимости от гистологического типа опухоли (режим положительных ионов).

