ΕΘΝΙΚΟ ΚΑΙ ΚΑΠΟΔΙΣΤΡΙΑΚΟ ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΑΘΗΝΩΝ
ΣΧΟΛΗ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ ΥΓΕΙΑΣ
ΙΑΤΡΙΚΗ ΣΧΟΛΗ
Δ'ΠΑΘΟΛΟΓΙΚΗ ΚΛΙΝΙΚΗ
Διευθυντής: Καθηγητής Σωτήριος Τσιόδρας

ΤΡΟΠΟΠΟΙΗΣΗ ΤΩΝ ΜΕΤΑΒΟΛΙΚΩΝ ΟΔΩΝ ΣΤΟΝ ΣΗΠΤΙΚΟ ΑΣΘΕΝΗ

ΚΡΑΝΙΔΙΩΤΗ ΕΛΕΥΘΕΡΙΑ
ΙΑΤΡΟΣ ΠΑΘΟΛΟΓΟΣ

ΔΙΔΑΚΤΟΡΙΚΗ ΔΙΑΤΡΙΒΗ

ΑΘΗΝΑ, 2024

- Ημερομηνία αίτησης έναρξης διδακτορικής διατριβής: 14/6/2018
- Ημερομηνία ορισμού τριμελούς συμβουλευτικής επιτροπής: 4/10/2018
- Ημερομηνία κατάθεσης θέματος και πρωτοκόλλου διατριβής: 21/12/2018
- Ημερομηνία κατάθεσης πρώτης έκθεσης προόδου: 21/10/2019
- Ημερομηνία κατάθεσης δεύτερης έκθεσης προόδου: 23/6/2021
- Ημερομηνία κατάθεσης τρίτης έκθεσης προόδου: 2/7/2024
- Ημερομηνία παρουσίασης διδακτορικής διατριβής : 23/09/2024 με βαθμό «Άριστα»

Τριμελής συμβουλευτική επιτροπή :

1. Καθηγητής Ευάγγελος Γιαμαρέλλος-Μπουρμπούλης, Επιβλέπων
2. Καθηγητής Γεώργιος Δημόπουλος
3. Καθηγητής Ηρακλής Τσαγκάρης

Πρόεδρος Ιατρικής Σχολής : Καθηγητής Νικόλαος Φ. Αρκαδόπουλος

Επταμελής συμβουλευτική επιτροπή

1. Καθηγητής Ευάγγελος Γιαμαρέλλος-Μπουρμπούλης, Επιβλέπων
2. Καθηγητής Γεώργιος Δημόπουλος
3. Καθηγητής Ηρακλής Τσαγκάρης
4. Καθηγητής Αντώνιος Παπαδόπουλος
5. Καθηγήτρια Ελένη Μπουτάτη
6. Καθηγήτρια Βαϊα Λαμπαδιάρη
7. Καθηγήτρια Ελένη Μάγειρα

Αγνώς και οσίως διατηρήσω βίον τον εμόν και τέχνην την εμήν.

Ιπποκράτης (460-370 π.Χ.)


ΟΡΚΟΣ
1. Ὄμνυμι Ἀπόλλωνα ἰητρὸν καὶ Ἀσκληπιὸν καὶ Ὑγείαν καὶ Πανάκειαν καὶ θεοὺς πάντας τε καὶ πάσας, ἵστορας ποιεύμενος, ἐπιτελέα ποιήσειν κατὰ δύναμιν καὶ κρίσιν ἐμὴν ὅρκον τόνδε καὶ ξυγγραφὴν τήνδε.
2. Ἡγήσεσθαι μὲν τὸν διδάξαντα με τὴν τέχνην ταύτην ἴσα γενέτῃσιν ἐμοῖσι, καὶ βίου κοινώσεσθαι, καὶ χρεῶν χρηίζοντι μετάδοσιν ποιήσεσθαι, καὶ γένος τὸ ἐξ ωὐτέου ἀδελφοῖς ἴσον ἐπικρινέειν ἄρρεσι, καὶ διδάξειν τὴν τέχνην ταύτην, ἢν χρηίζωσι μανθάνειν, ἄνευ μισθοῦ καὶ ξυγγραφῆς, παραγγελίης τε καὶ ἀκροήσιος καὶ τῆς λοιπῆς ἁπάσης μαθήσιος μετάδοσιν ποιήσεσθαι υἱοῖσί τε ἐμοῖσι, καὶ τοῖσι τοῦ ἐμὲ διδάξαντος, καὶ μαθηταῖσι συγγεγραμμένοισί τε καὶ ὡρκισμένοις νόμῳ ἰητρικῷ ἄλλῳ δὲ οὐδενί.
3. Διαιτήμασί τε χρήσομαι ἐπ' ὠφελείῃ καμνόντων κατὰ δύναμιν καὶ κρίσιν ἐμήν, ἐπὶ δηλήσει δὲ καὶ ἀδικίῃ εἴρξειν.
4. Οὐ δώσω δὲ οὐδὲ φάρμακον οὐδενὶ αἰτηθεὶς θανάσιμον, οὐδὲ ὑφηγήσομαι ξυμβουλίην τοιήνδε· ὁμοίως δὲ οὐδὲ γυναικὶ πεσσὸν φθόριον δώσω.
5. Ἁγνῶς δὲ καὶ ὁσίως διατηρήσω βίον τὸν ἐμὸν καὶ τέχνην τὴν ἐμήν.
6. Οὐ τεμέω δὲ οὐδὲ μὴν λιθιῶντας, ἐκχωρήσω δὲ ἐργάτῃσιν ἀνδράσι πρήξιος τῆσδε.
7. Ἐς οἰκίας δὲ ὁκόσας ἂν ἐσίω, ἐσελεύσομαι ἐπ' ὠφελείῃ καμνόντων, ἐκτὸς ἐὼν πάσης ἀδικίης ἑκουσίης καὶ φθορίης τῆς τε ἄλλης καὶ ἀφροδισίων ἔργων ἐπί τε γυναικείων σωμάτων καὶ ἀνδρώων, ἐλευθέρων τε καὶ δούλων.
8. Ἃ δ' ἂν ἐν θεραπείῃ ἢ ἴδω ἢ ἀκούσω, ἢ καὶ ἄνευ θεραπείης κατὰ βίον ἀνθρώπων, ἃ μὴ χρή ποτε ἐκλαλέεσθαι ἔξω, σιγήσομαι, ἄρρητα ἡγεύμενος εἶναι τὰ τοιαῦτα.
9. Ὅρκον μὲν οὖν μοι τόνδε ἐπιτελέα ποιέοντι, καὶ μὴ ξυγχέοντι, εἴη ἐπαύρασθαι καὶ βίου καὶ τέχνης δοξαζομένῳ παρὰ πᾶσιν ἀνθρώποις ἐς τὸν αἰεὶ χρόνον· παραβαίνοντι δὲ καὶ ἐπιορκέοντι, τἀναντία τουτέων.

Περιεχόμενα

ΓΕΝΙΚΟ ΜΕΡΟΣ

1. ΣΗΨΗ: ΟΡΙΣΜΟΣ ΚΑΙ ΕΠΙΔΗΜΙΟΛΟΓΙΚΑ ΧΑΡΑΚΤΗΡΙΣΤΙΚΑ 15

2. ΑΝΑΣΚΟΠΗΣΗ ΤΗΣ ΠΑΘΟΓΕΝΕΙΑΣ ΤΗΣ ΣΗΨΗΣ 20

2.1. Σύνδρομο ομοιάζον με σύνδρομο ενεργοποίησης μακροφάγων (ΣΟΕΜ) ή Macrophage Activation-Like Syndrome (MALS) 23

2.2. Ανοσοπαράλυση σχετιζόμενη με την σήψη (Sepsis-induced immunoparalysis) 26

3. ΜΕΤΑΒΟΛΟΜΙΚΗ – ΜΕΤΑΒΟΛΙΚΟ ΠΡΟΦΙΛ –METABOLOMICS 30

3.1. Μεθοδολογία Metabolomics - Πλατφόρμες επεξεργασίας μεταβολιτών 36

ΕΙΔΙΚΟ ΜΕΡΟΣ

4. ΕΙΣΑΓΩΓΙΚΑ ΣΤΟΙΧΕΙΑ 42

5. ΜΕΘΟΔΟΛΟΓΙΑ 45

5.1. Σχεδιασμός της μελέτης 45

5.2. Μη στοχευμένη προσέγγιση μεταβολομικης (untargeted metabolomics) ... 53

5.3. Στατιστική ανάλυση 54

5.4. Ανάλυση εμπλουτισμού βιοχημικου μονοπατιου (pathway enrichment analysis) 55

6. ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ 57

7. ΣΥΖΗΤΗΣΗ 68

7.1. Περιορισμοί της μελέτης 74

7.2. Συμπεράσματα 74

ΠΕΡΙΛΗΨΗ 76

ABSTRACT 77

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ 78

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ 88

Πίνακας 1: Πρωτόκολλα εγκρίσεων συμμετοχής στην έρευνα των 14 Νοσηλευτικών Ιδρυμάτων που συμμετείχαν 89

2. Πίνακας 2: Κατάλογος μεταβολιτών που αναλύθηκαν..... 90
3. Πίνακας 3: Κανονικοποιημένα δεδομένα..... 497
4. Πίνακας 4: Μεταβολίτες που είναι διαφορετικά ρυθμισμένοι σε όλες τις κοορτές542
5. Πίνακας 5: Λίστα των σημαντικών μεταβολιτών από όλες τις αναλύσεις..... 651
6. Πίνακας 6: Μεταβολίτες που διαφοροποιούνται μεταξύ ασθενών με σύνδρομο τύπου ενεργοποίησης μακροφάγων (MALS) έναντι ασθενών με ανοσοπαράλυση που προκαλείται από σήψη..... 674
7. Πίνακας 7: Μεταβολίτες που διαφοροποιούνται ανάμεσα σε ασθενείς με σύνδρομο ενεργοποίησης μακροφάγων (MALS) και σε ασθενείς με μη ταξινομημένη κατάσταση891
8. Πίνακας 8: Μεταβολίτες που διαφοροποιούνται ανάμεσα σε ασθενείς με ανοσοπαράλυση που προκαλείται από σήψη και σε ασθενείς με μη ταξινομημένη κατάσταση..... 1073

Σύντομο βιογραφικό σημείωμα

Σπουδές

Πτυχίο Ιατρικής:	Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας – Τμήμα Ιατρικής
Ημερομηνία κτήσης πτυχίου:	25/07/2013
Βαθμός Πτυχίου:	8,37
Αρ. Πρωτοκόλλου:	3378
Άδεια Άσκησης Επαγγέλματος:	01/08/2013
Αριθμός Πρωτοκόλλου:	Υ. 2393
Τίτλος Ειδικότητας :	ΕΣΩΤΕΡΙΚΗ ΠΑΘΟΛΟΓΙΑ , 2019

Εργασία

Παρούσα Θέση:	Επιμελήτρια Β' ΕΣΥ – ΓΝΑ «Ο ΕΥΑΓΓΕΛΙΣΜΟΣ» Α' Παθολογική Κλινική Ευαγγελισμού (26/02/2024 –σήμερα)
Προϋπηρεσία:	Επικουρικός Παθολόγος, ΓΝΑ «Ο ΕΥΑΓΓΕΛΙΣΜΟΣ» Γ' Παθολογική Κλινική Ευαγγελισμού - COVID 19 Κλινική Ευαγγελισμού (4/6/2020 -26/02/24)
Υπηρεσία Υπαίθρου:	Μηνιαία Εκπαίδευση στο «Τζάνειο» 25/11/2013 - 24/12/2013 ΚΥ Γαλατά 25/12/2013 – 23/06/2014 (δεν ολοκληρώθηκε λόγω έναρξης ειδικότητας). **ΝΟΜΙΜΗ ΑΠΑΛΛΑΓΗ ΑΠΟ ΤΗΝ ΥΠΟΧΡΕΩΤΙΚΗ ΕΚΠΛΗΡΩΣΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑΣ ΥΠΑΙΘΡΟΥ** με αριθμό πρωτοκόλλου Γ4γ/Γ.Π.74541-Με βάση το άρθρο 19 του ν.4999/7-12-2022.

Επιστημονικό Έργο

Κλινικές Μελέτες

Sub investigator at:	**AIDA study**, a prospective, open label, randomized controlled clinical trial, with pharmacokinetic-pharmacodynamic validation, to compare antimicrobial treatment with oral minocycline plus rifampicin to treatment with oral linezolid for complicated skin and skin structure infections (cSSSI) caused by Methicillin resistant Staphylococcus aureus (MRSA). (30/05/2016 - 31/12/2016) **PROVIDE study**, a personalized randomized trial of vadilation and restoration of immune dysfunction in

severe infections and sepsis (THE PROVIDE TRIAL). (5/11/2018 -31/12/2019)

REACT study, Biomarker-Guided Early Clarithromycin treatment to prevent sepsis progression in community-acquired pneumonia: the react randomized clinical trial (2024-ongoing)

Sub-Investigator,

Standard of Clinical Care at: **SAVE –MORE study**, suPAR-GUIDED ANAKINRA TREATMENT for validation of the risk and early management of severe respiratory failure by covid-19. THE SAVE-MORE DOUBLE-BLIND, RANDOMIZED, PHASE III CONFIRMATORY TRIAL (21/12/2020 – 04/2021)

Συνέδρια -Παρουσιάσεις

20th Congress of the European Shock Society (21-23/9/ 2023), Vienna: "Metabolomic profile in sepsis according to the state of immune activation"-abstract 202 **Presenter: Eleftheria Kranidioti**

49οΕΤΗΣΙΟ ΠΑΝΕΛΛΗΝΙΟ ΙΑΤΡΙΚΟ ΣΥΝΕΔΡΙΟ 11-13 ΜΑΙΟΥ 2023: ΚΛΙΝΙΚΗ ΠΕΡΙΠΤΩΣΗ ΣΑΡΚΟΕΙΔΙΚΟΥ ΤΥΠΟΥ ΜΕΣΟΘΩΡΑΚΙΚΗΣ ΛΕΜΦΑΔΕΝΟΠΑΘΕΙΑΣ

Δ. Εξαρχοπούλου, Α. Κατσανδρή, Α. Παπαποστόλου, Κ. Αθανασιάδη, Γ. Σαρρή, **Ε. Κρανιδιώτη**, Χ.Βουρλάκου, Ε. Μαλλιαρού, Κ. Παπαχριστοδούλου , Β. Σεβαστιανός.

21st EUROPEAN CONGRESS OF INTERNAL MEDICINE (Athens Greece) 15-18 /03/2023: **-E-Poster in AS09.** Infectious Diseases Demographic and Clinical Characteristics of Patients diagnosed with extrapulmonary Tuberculosis (EPTB) in a tertiary hospital of Athens, Greece. Panagopoulos C., Katsandri A., Sarri G., **Kranidioti, E.,** Papapostolou, A., Athanasiadi, K., Sevastianos, V.

-**Moderator in Poster Discussion Schedule 16/03/2023**: Cerebrovascular and Neurologic diseases I

(Board No 59-64) 17/03/2023 Gastrointestinal and Liver Diseases I (Board No 50-56) 18/03/2023 Endocrine and Metabolic Diseases II (Board No 101- 107)

25ο ΠΑΝΕΛΛΗΝΙΟ ΣΥΝΕΔΡΙΟ ΕΣΩΤΕΡΙΚΗΣ ΠΑΘΟΛΟΓΙΑΣ (POSTER ΑΑ12) 6/10/22: ΡΗΞΗ ΜΥΩΝ ΣΤΡΟΦΙΚΟΥ ΠΕΤΑΛΟΥ ΤΟΥ ΩΜΟΥ ΣΕ ΕΔΑΦΟΣ ΣΥΝΔΡΟΜΟΥ ΜΑΚΡΟΥ COVID **Ελευθερία Κρανιδιώτη**, Ανδρονίκη Παπαποστόλου, Ανδρέας Παναγόπουλος , Γεωργία Σαρρή , Αικατερίνη Κατσανδρή, Βασίλειος Σεβαστιανός

26ο ΕΤΗΣΙΟ ΣΕΜΙΝΑΡΙΟ ΣΥΝΕΧΙΖΟΜΕΝΗΣ ΙΑΤΡΙΚΗΣ ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗΣ ΝΟΣΟΚΟΜΕΙΟΥ «Ο ΕΥΑΓΓΕΛΙΣΜΟΣ» 31 ΜΑΙΟΥ-4 ΙΟΥΝΙΟΥ 2021: **e-poster** Ε. Μυλωνά, Ε. Μαργέλλου, **Ε. Κρανιδιώτη**, Β. Βλαχάκος, Α. Κορκοτζέλου, Σ. Δασκαλοπούλου, Η. Μονιεμ, Ε. Παπαγεωργίου, Α.Λ. Χαλιάσου, Α. Παναγόπουλος, Δ. Τσιλιβαράκης, Ε. Βαβουράκη, Σ. Πλαβούκου, Γ. Ζακυνθινός, Σ. Παπαλαμπίδου, Γ. Καραμπέκος, Α. Λαυρεντάκη, Σ. Κανελλοπούλου, Π. Ράπτη, Π. Μουχτούρης, Ι. Σταματάκης, Κ. Μελάνης, Μ. Παπαντωνίου, Α. Μεγαρισιώτου, Χ. Κοσσυβάκης, Α-Μ. Κάκκου, Ν. Γιαννιού, Κ. Ελευθερίου, Β. Σύψα, Β. Σακκά, Ε. Μπαλής, Ι. Καλομενίδης.

45Ο ΕΤΗΣΙΟ ΠΑΝΕΛΛΗΝΙΟ ΙΑΤΡΙΚΟ ΣΥΝΕΔΡΙΟ (15-18 ΜΑΙΟΥ 2019): ΔΙΑΓΝΩΣΗ ΦΥΜΑΤΙΩΔΟΥΣ ΠΕΡΙΤΟΝΙΤΙΔΑΣ ΞΗΡΟΥ ΤΥΠΟΥ ΣΕ ΑΣΘΕΝΗ ΜΕ ΠΑΡΑΤΕΙΝΟΜΕΝΟ ΠΥΡΕΤΟ ΚΑΙ ΕΝΔΟΚΟΙΛΙΑΚΗ ΜΑΖΑ. Α. Παναγόπουλος, Σ. Κομπόγιωργας, **Ε. Κρανιδιώτη**, Σ. Κατσίλα, Π. Παυλή, Ε. Λαζαρίδου, Δ. Εξαρχος, Ζ. Ψαρουδάκη, Α. Κατσανδρή, Χ. Δολαψάκης, Κ. Καζιάνη,Σ. Γκολφινοπούλου. Γ' Παθολογική Κλινική, Γ.Ν.Α. «Ο Ευαγγελισμός», Πνευμονολογική Κλινική, Γ.Ν.Α. «Ο Ευαγγελισμός», Τμήμα Αξονικού & Μαγνητικού

Τομογράφου, Γ.Ν.Α. «Ο Ευαγγελισμός», Μικροβιολογικό Τμήμα, Γ.Ν.Α. «Ο Ευαγγελισμός»

44ο ΕΤΗΣΙΟ ΠΑΝΕΛΛΗΝΙΟ ΙΑΤΡΙΚΟ ΣΥΝΕΔΡΙΟ (9-12 ΜΑΙΟΥ 2018): ΘΡΟΜΒΩΣΗ ΣΗΡΑΓΓΩΔΟΥΣ ΚΟΛΠΟΥ ΩΣ ΕΠΙΠΛΟΚΗ ΟΞΕΙΑΣ ΣΦΗΝΟΕΙΔΙΤΙΔΑΣ. **Ε. Κρανιδιώτη**, Σ. Κατσίλα, Α. Παναγόπουλος, Ι. Σταματάκης, Χ. Δολαψάκης, Α. Ναξάκη, Σ. Γκολφινοπούλου. Γ' Παθολογική Κλινική, Γ.Ν.Α. «Ο Ευαγγελισμός - Οφθαλμιατρείο-Πολυκλινική».

9th International Congress of Internal Medicine March 9-11, 2017
Hilton Athens Hotel: Theano Kontopoulou, Androniki Papapostolou (presentation), Panteleimon Tsiamalos, Elpida Charalampaki, **Eleftheria Kranidioti**, Anastasia Mantzavini, Petros Avgerinos. 3rd Internal Medicine Department, Evangelismos Hospital, Athens Greece

ΠΑΡΟΥΣΙΑΣΗ ΠΕΡΙΣΤΑΤΙΚΟΥ ΤΡΙΤΗ 14 ΜΑΡΤΙΟΥ 2017: «Λοίμωξη από HOOKWORM σε Αφγανό μετανάστη» Αμφιθέατρο του Αιγινητείου Νοσοκομείου ΕΤΑΙΡΕΙΑ ΚΛΙΝΙΚΗΣ ΜΙΚΡΟΒΙΟΛΟΓΙΑΣ & ΕΡΓΑΣΤΗΡΙΑΚΗΣ ΔΙΑΓΝΩΣΗΣ. Θεανώ Κοντοπούλου, **Ελευθερία Κρανιδιώτη (παρουσίαση),** Παντελής Τσιάμαλος, Αθηνά Αργυροπούλου, Ευσταθία Περιβολιώτη, Ελπίδα Χαραλαμπάκη, Ανδρονίκη Παπαποστόλου, Αμαλία Τζανάτου, Πέτρος Αυγερινός. Γ' Παθολογική Κλινική, Μικροβιολογικό Εργαστήριο, Γ.Ν.Α. «Ο Ευαγγελισμός»

ΔΩΜΑ ΕΥΑΓΓΕΛΙΣΜΟΥ (20 ΔΕΚΕΜΒΡΙΟΥ 2017): ΘΕΜΑ: «Άνδρας 71 ετών με μάζα ελάσσονος πυέλου». Παρουσίαση περιστατικού: Ευαγγελάτου Ειρήνη, Ειδικευόμενη Ενδοκρινολογίας, Ενδοκρινολογικό Τμήμα-Διαβητολογικό Κέντρο - PDF 1, PDF 2.

Διαφορική Διάγνωση: Κρανιδιώτη Ελευθερία, Ειδικευόμενη Παθολογίας, Γ' Παθολογικό Τμήμα.
Σχολιασμός: Μαυρομάτης Θεόδωρος, Συντονιστής Διευθυντής Γ' Χειρουργικού Τμήματος, Μάγκου Χριστίνα,Επιμελήτρια Α', Παθολογοανατομικό Τμήμα Στρατηγού Θεοδώρα,Επιμελήτρια Β', Ενδοκρινολογικό Τμήμα-Διαβητολογικό Κέντρο

5ο Πανελλήνιο Συνέδριο Ταξιδιωτικής, Γεωγραφικής & Τροπικής Ιατρικής
7 – 9 Οκτωβρίου 2016, 251 Γενικό Νοσοκομείο Αεροπορίας, Αθήνα: "ΛΟΙΜΩΞΗ ΑΠΟ HOOKWORM ΣΕ ΑΦΓΑΝΟ ΜΕΤΑΝΑΣΤΗ". Θ. Κοντοπούλου, **Ε. Κρανιδιώτη (παρουσίαση)**, Π. Τσιάμαλος, Α. Αργυροπούλου, Ε. Περιβολιώτη, Ε. Χαραλαμπάκη, Α. Παπαποστόλου, Α. Τζανάτου, Π. Αυγερινος. Γ' Παθολογική Κλινική και Μικροβιολογικό Εργαστήριο ΓΝΑ "Ο Ευαγγελισμός"

Συγγραφικό έργο

Critical Care Medicine, 2024: Modulation of metabolomic profile in sepsis according to the state of immune activation. **Kranidioti, E.**, Ricaño-Ponce, I., Antonakos, N., Kyriazopoulou, E., Kotsaki, A., Tsangaris, I., Markopoulou, D., Rovina, N., Antoniadou, E., Koutsodimitropoulos, I., Dalekos, G.N, Vlachogianni, G., Akinosoglou, K., Koulouras, V., Komnos, A., Kontopoulou, T., Dimopoulos, G., Netea, M.G., Kumar, V., Giamarellos-Bourboulis, E.J. doi:10.1097/CCM.0000000000006391.

Critical Care, 2023: Complement activation in severely ill patients with sepsis: no relationship with inflammation and disease severity. de Nooijer AH, Kotsaki A, **Kranidioti E,** Kox M, Pickkers P, Toonen EJM, Giamarellos-Bourboulis EJ, Netea MG. Crit Care. 2023 Feb 16;27(1):63. doi: 10.1186/s13054-023-04344-6. PMID: 36797757; PMCID: PMC9933299.

Pneumon, 2022:	Outcomes of hospitalized COVID-19 patients belonging to ethnic/racial minorities in Greece (2022). Alexandrou, M., Daskalopoulou, S., Haliassou, A., **Kranidioti, E**., Margellou, E., Panagopoulos, A., Papageorgiou, E., Rodopoulou, A., Stavropoulou, G., Pappas, A., and Kalomenidis, I. Pneumon, 35(4), 25. https://doi.org/10.18332/pne/154601
J Pers Med, 2022:	Moderate COVID-19: Clinical Trajectories and Predictors of Progression and Outcomes. Pappas AG, Panagopoulos A, Rodopoulou A, Alexandrou M, Chaliasou AL, Skianis K, **Kranidioti E**, Chaini E, Papanikolaou I, Kalomenidis I. J Pers Med. 2022 Sep 8;12(9):1472. doi: 10.3390/jpm12091472. PMID: 36143257; PMCID: PMC9505620.
Τόμος Πρακτικών, 2021:	ΑΝΤΙΜΕΤΩΠΙΣΗ ΑΣΘΕΝΩΝ ΜΕ COVID19 ΛΟΙΜΩΞΗ ΣΤΗΝ ΚΛΙΝΙΚΗ ΤΟΥ ΝΟΣΟΚΟΜΕΙΟΥ ΜΑΣ. 26ο ΕΤΗΣΙΟ ΣΕΜΙΝΑΡΙΟ ΣΥΝΕΧΙΖΟΜΕΝΗΣ ΙΑΤΡΙΚΗΣ ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗΣ ΝΟΣΟΚΟΜΕΙΟΥ «Ο ΕΥΑΓΓΕΛΙΣΜΟΣ» 31 ΜΑΙΟΥ-4 ΙΟΥΝΙΟΥ 2021. Ελευθερία Κρανιδιώτη , Ανδρέας Παναγόπουλος, Ιωάννης Καλομενίδης. https://www.evaggelismos-hosp.gr/files/epistimoniki_enosi/26%CE%95%CE%A3%CE%A3%CE%99%CE%95/4-6-21_TOMOS_PRAKTIKON_26_ASCME_HR.pdf.
Pathog Glob Health, 2021:	Clinical features and outcomes of hospitalized COVID-19 patients in a low burden region. Mylona E., Margellou E., **Kranidioti E.,** Vlachakos V., Sypsa V., Sakka V., Balis E., Kalomenidis I. Pathog Glob Health. 2021 Jun;115(4):243-249. doi: 10.1080/20477724.2021.1893485. Epub 2021 Feb 28. PMID: 33645468; PMCID: PMC8168732.
Clin Lymphoma Myeloma	

Leuk, 2020:	Plerixafor-aided Mobilization of Peripheral Blood Hematopoietic Stem Cells to Support Subsequent High-dose Chemotherapy After a Prior Autologous Transplant. Fergadis, E., Assi, A., **Kranidioti, E.,** Kosma, A., Karakosta, M., Miltiadous, C., Dimitriadis, G. K., Grivas, A., Athanasopoulos, A., Lianos, E., & Kosmas, C. (2020). Clinical lymphoma, myeloma & leukemia, 20(2), e50–e57. https://doi.org/10.1016/j.clml.2019.11.022.
Leuk Lymphoma, 2019:	Re-mobilization of hematopoietic progenitors for further autografting after prior myelo-ablative high-dose chemotherapy and autologous hematopoietic stem cell transplantation; the role of plerixafor. Kosmas, C., **Kranidioti, E.,** Kosma, A., Karakosta, M., Miltiadous, C., Grivas, A., Athanasopoulos, A., & Lianos, E. (2019). Leukemia & lymphoma, 60(7), 1819–1822. https://doi.org/10.1080/10428194.2018.1543879.
BMJ Case Rep 2019:	Cavernous sinus thrombosis due to ipsilateral sphenoid sinusitis. Dolapsakis, C., **Kranidioti, E**., Katsila, S., & Samarkos, M. (2019). BMJ case reports, 12(1), e227302. https://doi.org/10.1136/bcr-2018-227302.
Int J Antimicrob Agents, 2019:	Microbiology of acute bacterial skin and skin-structure infections in Greece: A proposed clinical prediction score for the causative pathogen. Nodaras, C., Kotsaki, A., Tziolos, N., Kontopoulou, T., Akinosoglou, K., Chrisanthakopoulou, M., **Kranidioti, E**., Kritselis, I., Voloudakis, N., Vittoros, V., Gogkou, A., Fillas, I., Toutouzas, K. G., Bristianou, M., Tsoutsos, D., Christaki, E., Adamis, G., Kaziani, K., Tsironis, C., Lada, M., Giamarellos-Bourboulis, E. J. (2019). International journal of antimicrobial agents, 54(6), 750–756. https://doi.org/10.1016/j.ijantimicag.2019.08.020.

Ευχαριστίες

Με την ολοκλήρωση της παρούσας διδακτορικής διατριβής, η οποία εκπονήθηκε στο Ερευνητικό Εργαστήριο Ανοσολογίας Λοιμώξεων της Δ' Πανεπιστημιακής Παθολογικής Κλινικής του Νοσοκομείου «ΑΤΤΙΚΟΝ», θέλω να εκφράσω την βαθιά ευγνωμοσύνη μου, προς τον μέντορα και επιβλέποντα καθηγητή μου, κύριο Ευάγγελο Γιαμαρέλλο-Μπουρμπούλη για την επιστημονική καθοδήγηση και την στήριξη που μου παρείχε καθ' όλη την διάρκεια της αναζήτησης και εξειδίκευσης των γνώσεων μου στην επιστήμη της ιατρικής. Τίποτα δεν θα ήταν εφικτό χωρίς την εμπιστοσύνη που μου έδειξε, την βοήθεια που μου παρείχε ανελλιπώς και τις ευκαιρίες που μου έδωσε σε όλα τα στάδια υλοποίησης της παρούσας διατριβής.

Επίσης, θερμά ευχαριστώ τους καθηγητές Γεώργιο Δημόπουλο και Ηρακλή Τσαγκάρη που, μαζί με τον επιβλέποντα καθηγητή μου Ευάγγελο Γιαμαρέλλο-Μπουρμπούλη, συναποτελούν την τριμελή συμβουλευτική επιτροπή του ΕΚΠΑ.

Θερμές ευχαριστίες απευθύνω και σε όλα τα μέλη, ιατρούς και επιστήμονες-ερευνητές του Εργαστηρίου Ανοσολογίας Λοιμώξεων της Δ' Παθολογικής Κλινικής του νοσοκομείου «ΑΤΤΙΚΟΝ» για την εξαιρετική συνεργασία που είχα μαζί τους. Επιπλέον, στην κυρία Λήδα Ευστρατίου για την βοήθεια της σε οργανωτικά ζητήματα της μελέτης.

Στους ασθενείς που μετείχαν στην μελέτη και στις οικογένειες τους, εκφράζω τις ευχαριστίες μου και τον βαθύ σεβασμό μου. Η συμμετοχή τους στην έρευνα έδωσε την ευκαιρία ενδελεχούς μελέτης ενός σημαντικού ιατρικού ζητήματος, την αντιμετώπιση του οποίου ευελπιστεί να φωτίσει περαιτέρω η παρούσα διατριβή.

Θα ήταν παράλειψη να μην ευχαριστήσω την διευθύντρια μου, στην Α' Παθολογική Κλινική του νοσοκομείου «ΕΥΑΓΓΕΛΙΣΜΟΣ», την κυρία Θεανώ Κοντοπούλου, η στήριξη της οποίας ήταν πολύτιμη σε όλα τα βήματα που έκανα για την επιστημονική μου κατάρτιση και εξέλιξη.

Τέλος, ευχαριστώ όλους τους ιατρούς και τα νοσοκομεία που συμμετείχαν στη μελέτη αυτή, τους συγγενείς και τους φίλους που στάθηκαν δίπλα μου.

ΓΕΝΙΚΟ ΜΕΡΟΣ

1. ΣΗΨΗ: ΟΡΙΣΜΟΣ ΚΑΙ ΕΠΙΔΗΜΙΟΛΟΓΙΚΑ ΧΑΡΑΚΤΗΡΙΣΤΙΚΑ

Ως σήψη ορίζεται η απειλητική, για τη ζωή, οργανική ανεπάρκεια η οποία προκαλείται από την διαταραγμένη απόκριση του ξενιστή σε μία λοίμωξη[1] . Ο ορισμός αυτός θεσπίστηκε το 2016 από επιτροπή 19 ειδικών στον τομέα αυτό και κατόπιν έγινε αποδεκτός από τουλάχιστον 30 ακαδημαϊκές κοινότητες παγκοσμίως. Η σήψη, ως κλινικό σύνδρομο παθοφυσιολογικών και βιοχημικών ανωμαλιών απότοκων λοίμωξης , εγείρει σημαντική ανησυχία για τον τομέα της δημόσιας υγείας. Εκτιμάται πως η θνητότητα της είναι εξαιρετικά υψηλή προσεγγίζοντας το 20%, με 11.000.000 θανάτους παγκοσμίως[2]. Ο αριθμός των θανόντων εκτιμάται ότι είναι διπλάσιος σε σχέση με παλαιότερες καταγραφές σε παγκόσμιο επίπεδο, καθώς συμπεριλήφθησαν περισσότερα δεδομένα προερχόμενα από κράτη χαμηλού και μέσου οικονομικού εισοδήματος, περιοχές όπου η επίπτωση και η θνητότητα της σήψης είναι σημαντικά υψηλότερη και τα δεδομένα που προέρχονταν από χώρες με αυτά τα χαρακτηριστικά υποεκτιμώνταν και ήταν επισφαλή[3].

Αξίζει να σημειωθεί πως αναφορικά με τον ορισμό της σήψης και της σηπτικής καταπληξίας υπάρχουν ποικίλες προκλήσεις. Πρωτίστως, η σήψη αποτελεί έναν αρκετά ευρύ όρο που εφαρμόζεται σε μία πληθώρα από ατελώς κατανοητούς μηχανισμούς. Η Διεθνής Ομάδα των Ειδικών αναγνώρισε την αδυναμία του να θεσπίσει κανείς με απόλυτη συναίνεση έναν αυστηρό ορισμό που θα αποτελεί κατά κάποιον τρόπο απαράβατο κανόνα, ως εκ τούτου δόθηκε έμφαση στην χρήση μετρήσιμων μεταβλητών που θα μπορούσαν να προσδιορίσουν με όσο γίνεται μεγαλύτερη ακρίβεια τους υποκείμενους μηχανισμούς του φαινομένου της σήψης. Επιπροσθέτως, έχει αναδειχθεί πως οι άνθρωποι που επιβιώνουν από την σήψη, παρουσιάζουν μακροπρόθεσμες σωματικές, ψυχολογικές και νοητικές διαταραχές αντικατοπτρίζοντας την ανάγκη για την έγκαιρη και αποτελεσματική αντιμετώπιση του προβλήματος της σήψης [4].

Στο παρελθόν, η βασική προσέγγιση των Ειδικών ήταν η σύνδεση της σήψης με τις φλεγμονώδεις διαδικασίες που ενεργοποιούνται από το ανοσοποιητικό σύστημα του ξενιστή, μετά από την προσβολή από το παθογόνο. Το 1991 διενεργήθηκε η πρώτη διεθνής επιστημονική συνεργασία (γνωστή ως Sepsis-1) εκ της οποίας

θεσπίστηκαν οι αρχικές ερμηνείες από την Διεθνή Ομάδα των Ειδικών με γνώμονα -την τότε επικρατούσα άποψη- πως η σήψη ήταν απόρροια της συστηματικής φλεγμονώδης απόκριση του ξενιστή στη λοίμωξη.

Ως σήψη (η οποία χαρακτηρίσθηκε αργότερα ως απλή σήψη) ορίστηκε το Συστηματικό Σύνδρομο Φλεγμονώδους Απόκρισης (Systematic Inflammatory Response Syndrome –SIRS) του ξενιστή που προκύπτει ως απόρροια της λοίμωξης. Για την διάγνωση του SIRS έπρεπε να πληρούνται τουλάχιστον δύο εκ των τεσσάρων κάτωθι κριτηρίων :

α) θερμοκρασία > 38ο C ή < 36ο C,

β) καρδιακή συχνότητα> 90 σφύξεων / λεπτό ,

γ) αναπνευστική συχνότητα > 20 αναπνοών/λεπτό ή μερική πίεση διοξειδίου του άνθρακα (PaCO2) <32 mmHg

δ) αριθμός λευκών αιμοσφαιρίων > 12000/ mm3 ή <4000/ mm3 ή παρουσία άωρων μορφών > 10 %.

Η παρουσία σήψης με βάση τα ανωτέρω κριτήρια σε συνδυασμό με την ανεπάρκεια ενός ή περισσοτέρων συστημάτων οργάνων ορίστηκε ως «Σοβαρή Σήψη». Ο ασθενής που πληροί τα κριτήρια για την «Σοβαρή Σήψη», σε συνδυασμό με εμμένουσα υπόταση (με τιμή συστολικής αρτηριακής πίεσης ≤90 mmHg), παρά την χορήγηση υγρών -που οφείλεται και συνδέεται με την σήψη και χρήζει αντιμετώπισης με την χορήγηση ινότροπων φαρμάκων- αντιμετωπίζει την κατάσταση που ορίζουμε ως «Σηπτική Καταπληξία» [1].

Το 2001, συντελέστηκε μία δεύτερη διεθνής προσπάθεια για την επανεξέταση των ορισμών της σήψης. Σύμφωνα με το Διεθνές Συνέδριο για τους Ορισμούς της Σήψης (γνωστή πλέον ως Sepsis-2), η ομάδα των Ειδικών, επανεξετάζοντας τις νεότερες τότε μελέτες, τροποποίησε ελάχιστα τον ορισμό της σήψης, προσθέτοντας -επί της ουσίας- διαγνωστικά κριτήρια για την σοβαρή σήψη [1]. Παράλληλα, τις τελευταίες τρείς δεκαετίες, η βασική προσέγγιση της παγκόσμιας ιατρικής κοινότητας ήταν η προσπάθεια σύνδεσης της σήψης με τις φλεγμονώδεις διαδικασίες (υπερφλεγμονώδεις και αντιφλεγμονώδεις) που ενεργοποιούνται από το ανοσοποιητικό σύστημα του ξενιστή, εξ αιτίας της προσβολής του από παθογόνο μικροοργανισμό. Ωστόσο, οι ορισμοί αυτοί μειονεκτούσαν ως προς την αδυναμία διάκρισης της σήψης από την απλή/ανεπίπλεκτη λοίμωξη [5] και δεν καταδείκνυαν πως τα στάδια της σήψης -ως κλινικό σύνδρομο- επέρχονται με γραμμική κλιμάκωση.

Το 2016, αποδόθηκε νέος ορισμός, ύστερα από απόφαση της Τρίτης Διεθνούς Ομοφωνίας Ορισμών της Σήψης (Sepsis-3), δίνει έμφαση στην πρωτεύουσα σημασία της διαταραχής της ομοιόστασης του ξενιστή/οργανισμού, ως απόκριση αυτού στη λοίμωξη, και την θνητότητα η οποία είναι σημαντικά υψηλότερη συγκρινόμενη με μία ανεπίπλεκτη λοίμωξη. Παράλληλα, πραγματοποιήθηκε αξιολόγηση δεδομένων και στοιχείων από ασθενείς που ανήκαν σε μεγάλες ανεξάρτητες βάσεις (cohorts). Έτσι, οι ορίζοντες του πεδίου της σήψης ανοίγονται πλέον προς την κατεύθυνση της αντιμετώπισης της ανοσιακής δυσλειτουργίας, ως θεραπευτική επιλογή με στοχευμένο και προσωποποιημένο τρόπο, λαμβάνοντας υπόψιν πως δεν παρουσιάζουν όλοι οι ασθενείς με σήψη τον ίδιο τύπο ανοσιακής διαταραχής και ως εκ τούτου δεν θα πρέπει να λαμβάνουν όλοι την ίδια φαρμακευτική αγωγή [1].

Σύμφωνα με την τρέχουσα ιατρική γνώση, η ύπαρξη υπερφλεγμονωδών και αντιφλεγμονωδών φαινομένων στον σηπτικό ασθενή και η διαταραχή της ομοιόστασης των μηχανισμών αυτών, φαίνεται να οδηγεί στην σήψη και την αυξανόμενη θνητότητα που συνεπάγεται αυτής. Ωστόσο, εξέχουσας σημασίας δεν είναι μόνο οι ιδιότητες και τα χαρακτηριστικά του λοιμογόνου παράγοντα αλλά και οι ιδιότητες και τα χαρακτηριστικά του ξενιστή (όπως για παράδειγμα οι συννοσηρότητες του). Έτσι, για την διάγνωση της Σήψης εισήχθη ως κλινικό μέτρο διάγνωσης η κλίμακα SOFA (Sequential Organ Failure Assessment score). Η αύξηση της τιμής αξιολόγησης του σηπτικού ασθενούς ίσης ή μεγαλύτερης του 2, σε ασθενή με την υποψία λοίμωξης ισοδυναμεί με διάγνωση σήψης[1].

Η διάγνωση της Σήψης συνδέεται με ενδονοσοκομειακή θνητότητα περί τα 10%. Για τον υπολογισμό της τιμής αξιολόγησης της βαθμολογίας SOFA έχουν θεσπιστεί έξι παράμετροι, όπως φαίνεται και στον πίνακα 1. Στο πλαίσιο αυτό, ως Σηπτική Καταπληξία ορίζεται η μείωση της μέσης αρτηριακής πίεσης (ΜΑΠ) χαμηλότερα από τα 65 mm Hg , με αύξηση της τιμής του γαλακτικού μεγαλύτερη απο 2 mmol/l, κατάσταση που απαιτεί την χορήγηση αγγειοσυσπαστικών ουσιών προκειμένου να επιτευχθεί η αιμοδυναμική σταθερότητα του ασθενούς, και συνδέεται με ενδονοσοκομειακή θνητότητα που φτάνει το 40% [1].

Πίνακας 1: Βαθμολογία SOFA

Μεταβλητή	**0**	**1**	**2**	**3**	**4**
pO2/FiO2 (mmHg)	≥400	<400	<300	<200	<100
Αιμοπετάλια($10^3/mm^3$)	≥150	<150	<100	<50	<20
Υπόταση	Μέση Αρτηριακή Πίεση (ΜΑΠ) ≥ 70mmHg	Μέση Αρτηριακή Πίεση (ΜΑΠ)< 70mmHg	Δοβουταμίνη οποιαδήποτε δόση	Αδρεναλίνη≤0,1μg/kg/min ή Νοραδρεναλίνη ≤0,1μg/kg/min	Αδρεναλίνη>0,1 μg/kg/min ή Νοραδρεναλίνη >0,1 μg/kg/min
Κλίμακα Γλασκώβης	15	13-14	10-12	6-9	<6
Χολερυθρίνη	<1,2	1,2-1,9	2,0-5,9	6,0-11,9	>12,0
Κρεατινίνη(mg/dl) ή διούρηση	<1,2	1,2-1,9	2,0-3,4	3,5-4,9 ή <500 ml διούρηση	>5,0 ή <200ml

Θα ήταν άτοπο να οριστεί η Σήψη ως μία συγκεκριμένη ασθένεια. Καλύτερο και πιό στοχευμένο θα ήταν να χαρακτηριστεί ως μία οντότητα, ένα σύνδρομο που περιλαμβάνει μια πολύπλοκη παθοφυσιολογία, με μία ποικιλία κλινικοεργαστηριακών εκδηλώσεων και εκφάνσεων. Δεδομένου ότι δεν υπάρχει η απόλυτα εξειδικευμένη διαγνωστική εξέταση, ή μια “gold standard” μέθοδος διάγνωσης, η ομάδα των ειδικών στόχευσε στο να καθορίσει ορισμούς και κλινικά κριτήρια που ήταν σαφή και πληρούσαν πολλούς τομείς χρησιμότητας και εγκυρότητας. Άλλωστε, η σήψη είναι μια πολυδιάστατη απόκριση του ξενιστή σε ένα παθογόνο, που μπορεί όμως να

ενισχυθεί σημαντικά από ενδογενείς παράγοντες. Η αρχική σύλληψη της έννοιας της σήψης ως λοίμωξης με τουλάχιστον δύο από τα τέσσερα κριτήρια SIRS επικεντρώθηκε αποκλειστικά στην φλεγμονώδη διαδικασία. Ωστόσο, η ακρίβεια του SIRS ως αναπαράσταση της παθοφυσιολογίας της σήψης έχει αμφισβητηθεί. Η σήψη αναγνωρίζεται πλέον ότι περιλαμβάνει έγκαιρη και πρώιμη ενεργοποίηση τόσο των προ- όσο και των αντι-φλεγμονωδών αποκρίσεων, καθώς και σημαντικές αλλοιώσεις σε μη ανοσολογικές οδούς όπως καρδιαγγειακές, νευρωνικές, αυτόνομες, ορμονικές, βιοενεργειακές, μεταβολικές και διαταραχές πήξης, οι οποίες έχουν προγνωστική σημασία. Έτσι, ο ορισμός της «Σοβαρής Σήψης» δεν χρησιμοποιείται πλέον, καθώς ο νέος ορισμός εμπεριέχει την οργανική δυσλειτουργία [1].

Να σημειωθεί ότι, ο σκοπός ύπαρξης των ορισμών αυτών δεν είναι να χρησιμοποιούνται με απόλυτο και αυστηρό τρόπο αλλά να μας βοηθούν στην έγκαιρη διάγνωση και ταξινόμηση των ασθενών με βάση την κλινική εξέταση και τις εργαστηριακές και απεικονιστικές εξετάσεις. Οι ορισμοί στοχεύουν στο να παρέχουν την μέγιστη κατά το δυνατό ευελιξία στην ιατρική κοινότητα στο να ταξινομεί τους ασθενείς και να αξιολογεί την κλινική τους εικόνα με βάση συγκεκριμένες παραμέτρους. Άλλωστε, η διάγνωση της σήψης δεν είναι πάντοτε εύκολη. Πολλές φορές η κλινική εικόνα είναι πασιφανής καθώς περιλαμβάνει σημεία και συμπτώματα τα οποία μπορούν να αποδοθούν μόνο στην σήψη. Ωστόσο η κλινική εικόνα μπορεί, και μάλιστα συχνά, να είναι ασαφής. Σε αυτή την περίπτωση απαιτείται ο συνδυασμός γνώσεων και εμπειρίας προκειμένου να διερευνηθεί η υποψία του σηπτικού συνδρόμου. Πολύτιμος σύμβουλος μπορεί να αναδειχθούν οι διάφορες βαθμολογίες που έχουν αναπτυχθεί, προκειμένου να ανιχνευθούν με αυξημένη ευαισθησία οι ασθενείς με υποψία λοίμωξης που παρουσιάζουν σήψη ώστε έγκαιρα να γίνουν οι απαραίτητες θεραπευτικές παρεμβάσεις. Μία τέτοια βαθμολογία είναι το quick SOFA (qSOFA) , το οποίο συνίσταται να λαμβάνεται υπόψη όταν ο ασθενής παρουσιάζει συμπτώματα σύγχυσης, ταχύπνοιας με αριθμό αναπνοών ≥ 22 ανά λεπτό και συστολικής αρτηριακής πίεσης ≤ 100 mm Hg [1].

Η Ελληνική Ομάδα Μελέτης της Σήψης (HSSG-Hellenic Sepsis Study Group) χρησιμοποιώντας τις ελληνικές βάσεις δεδομένων, έκανε μία αξιοσημείωτη αναδρομική μελέτη αξιολόγησης των ορισμών κατά Sepsis-3, με εργαλείο την κλίμακα αξιολόγησης SOFA προκειμένου να προβλέψει την θνητότητα στις 28 ημέρες σε ασθενείς εκτός της Μονάδος Εντατικής Θεραπείας(ΜΕΘ) και στους ασθενείς που νοσηλεύονται εντός της Μονάδος. Η εισαγωγή των κριτηρίων κατά Sepsis-3

διευκόλυνε την αναγνώριση των περιπτώσεων ασθενών που βρίσκονταν σε σοβαρή κατάσταση. Εν αντιθέσει, η αποτελεσματικότητα του quick SOFA (qSOFA) ήταν πτωχή. Είναι σημαντικό να αναφερθεί πως συγκρίνοντας το qSOFA με τα κριτήρια SIRS (με 3 τουλάχιστον), το qSOFA αναδείχθηκε πιο ευαίσθητο για την πρόγνωση της θνητότητας στις 28 ημέρες στους ασθενείς εκτός ΜΕΘ, με την ευαισθησία να φτάνει την τιμή του 60.8%. Αντιθέτως, μεγαλύτερη ευαισθησία αναδείχθηκε στην παρουσία 3 κριτηρίων SIRS στην πρόγνωση της οργανικής ανεπάρκειας σε ασθενείς εκτός ΜΕΘ. Η Ελληνική Ομάδα συστήνει την προσθήκη ακόμα ενός κριτηρίου, την μέτρηση της τιμής του pH του αρτηριακού αίματος ≤7,30 προκειμένου να αυξηθεί η ευαισθησία του qSOFA.[5]

2. ΑΝΑΣΚΟΠΗΣΗ ΤΗΣ ΠΑΘΟΓΕΝΕΙΑΣ ΤΗΣ ΣΗΨΗΣ

Είναι κοινή παραδοχή ότι η σήψη συμβαίνει στον οργανισμό του ξενιστή εξ αιτίας της συστηματικής ενεργοποίησης του ανοσοποιητικού συστήματος ως απόκριση στην εισβολή ενός παθογόνου μικροοργανισμού. Οι μικροοργανισμοί αυτοί φέρουν κοινά στοιχεία, καλά διατηρημένες δομές γνωστές ως «μοριακά μοτίβα ή μοριακές δομές σχετιζόμενες με παθογόνα», οι λεγόμενες PAMPs (Pathogen-associated molecular patterns) [6].

Παραδείγματα αυτών των δομών, είναι τα MDP (μουραμυλ-διπεπτίδιο της πεπτιδογλυκάνης /muramyl dipeptide) του κυτταρικού τοιχώματος των Gram θετικών κόκκων, οι λιποπολυσακχαρίτες (LPS) της εξωτερικής μεμβράνης των Gram αρνητικών βακτηρίων, το εξωτερικό λιπιδιακό περίβλημα των ιών του τύπου της γρίππης Α, τα βακτηριακά CpG DNA . Οι PAMPs προσδέονται και ενεργοποιούν τους υποδοχείς των κυττάρων του ανοσοποιητικού συστήματος, κυρίως των μονοκυττάρων και των ιστικών μακροφάγων, γνωστοί και ως PRRs (pattern recognition receptors/υποδοχείς αναγνώρισης συγκεκριμένων μοριακών δομών). Είναι τοποθετημένοι είτε στις κυτταρικές μεμβράνες ή στο κυτταρόπλασμα. Συνοπτικά, οι PAMPs παράγονται μόνο από μικροβιακά παθογόνα, όχι από τον ξενιστή, είναι γενικά μη ειδικά μόρια που ανήκουν σε μεγάλες τάξεις μικροοργανισμών γεγονός που επιτρέπει την εξελικτική διατήρηση ενός σχετικά μικρού αριθμού των PRRs που αναγνωρίζουν τεράστιους αριθμούς από πιθανά παθογόνα και τέλος είναι δομές ζωτικής σημασίας για την επιβίωση και την εκδήλωση της παθογόνου δράσης του μικροοργανισμού [6].

Υπάρχουν δύο συγκεκριμένες κατηγορίες των υποδοχέων PRR που έχουν μελετηθεί καλύτερα, οι TLRs (Toll-Like Receptors) και οι δεσμευτικές πρωτείνες νουκλεοτιδίων-πλούσιες σε λευκίνη (NLRs- nucleotide-binding leucine-rich repeat receptors). Οι καλά προσδιορισμένοι PRRs είναι υποδοχείς Toll-Like, υποδοχείς που εκφράζονται στα μυελοειδή κύτταρα (TREMs –triggering receptors expressed on myeloid cells), η δεκτίνη-1 και το «φλεγμονώσωμα»(inflammasome). Οι υποδοχείς TLR2 και TLR4 ελιναι διαμεμβρανικοί υποδοχείς που δεσμεύουν τις πεπτιδογλυκάνες και τους λιποπολυσακχαρίτες, αντίστοιχα. Οι TLR3 και TLR9 εγκαθίστανται στο κυτταρόπλασμα και δεσμεύουν το ιικό λιπιδιακό «φάκελο» και το βακτηριακό μεθυλιωμένο DNA (CpG DNA) αντίστοιχα. Ο TREM-1 είναι ένας διαμεμβρανικός υποδοχέας των πολυμορφοπυρήνων και των μονοκυττάρων του αίματος. Η β-D-γλυκάνη της μεμβράνης του μυκητησιακού κυττάρου δεσμεύεται στην δεκτίνη-1. Μόλις πραγματοποιηθεί η ενεργοποίηση των PRRs, ξεκινάει η ενεργοποίηση μίας σειράς από διακυτταρικά προσαρμοστικά μόρια, η οποία καταλήγει στην ενεργοποίηση διαφόρων μεταγραφικών παραγόντων, οι σημαντικότεροι εξ αυτών είναι οι NFκB (nuclear factor kappa B) και η AP-1(activator protein-1). Οι παράγοντες αυτοί προάγουν την μεταγραφή μίας ποικιλίας από προ-φλεγμονώδεις και άντιφλεγμονώδεις κυτταροκίνες. Παραδείγματα από προφλεγμονώδεις κυτταροκίνες είναι ο παράγοντας νέκρωσης όγκου-άλφα (TNF-α), η ιντερλευκίνη-1β(IL-1β), η ιντερευκίνη-6(IL-6) και η ιντερλευκίνη-8(IL-8). Οι πιο σημαντικοί αντιφλεμονώδεις μεσολαβητές είναι η IL-10 και οι διαλυτοί υποδοχείς κυτταροκινών όπως ο TNFR1, ο TNFR2 , IL1RA και ο sTREM-1. Οι προφλεγμονώδεις κυτταροκίνες ορχηστρώνουν κλινικά προ-φλεγμονώδη φαινόμενα όπως ο πυρετός, η ταχυκαρδία, η λευκοκυττάρωση, η εξαγγείωση υγρών, η υπόταση και η παραγωγή πρωτεινών οξείας φάσης. Πραγματοποιείται η στρατολόγηση των πολυμορφοπυρήνων στις εστίες της φλεγμονής, απελευθερώνουν ρίζες οξυγόνου, οδηγώντας στην καταστροφή των ιστών [6].

Τα «φλεγμονοσώματα» (inflammasomes) είναι πολυμερή πρωτεινών που εντοπίζονται στο κυτταρόπλασμα του κυττάρου. Έχουν περιγραφεί τρείς τύποι: NALP, IPAF , και NOD(nucleotide-binding oligomerization domain). Οι PRRs ενεργοποιούνται επίσης και από τα ενδογενή προιόντα του ξενιστή, τα οποία απελευθερώνονται από τους ιστούς κατά την διάρκεια της φλεγμονώδους διαδικασίας. Τέτοιο παράδειγμα είναι το μιτοχονδριακό DNA από τους μυικούς ιστούς, οι κρύσταλλοι ουρικού οξέος μετά την αποδόμηση του DNA, οι ρίζες

οξυγόνου που απελευθερώνονται από τα πολυμορφοπύρημα και η HMGB1(high-mobility group box) πρωτείνη 1. Τις τελευταίες δύο δεκαετίες είχε περιγραφεί πως η ενεργοποίηση του φλεγμονοσώματος NALP3 από τους κρυστάλλους ουρικού μονονατρίου είναι συνεργική με την ενεργοποίηση του TLR4 από τους λιποπολυσακχαρίτες, οδηγώντας στην εκσεσημασμένη παραγωγή της ιντερλευκίνης 1β [7].

Δύο παράγοντες είναι ζωτικής σημασίας για την ταχεία αναγνώριση του παθογόνου από το εγγενές ανοσοποιητικό σύστημα: η παρουσία των υποδοχέων εναντίον των δεικτών των παθογόνων και η «απανταχού παρούσα» φύση των υποδοχέων αυτών στον οργανισμό του ξενιστή. Οι υποδοχείς αυτοί εκφράζονται σε αρκετά είδη κυττάρων του ανοσιακού συστήματος, όπως είναι τα μακροφάγα, τα πολυμορφοπύρηνα, τα δενδριτικά κύτταρα και τα λεμφοκύτταρα αλλά και στα κύτταρα του ενδοθηλίου και του μυικού ιστού[8,9].

Δεν υπάρχει αμφιβολία πως η κατανόηση για την παθογένεια της σήψης έχει σημαντικά διευρυνθεί την τελευταία δεκαετία. Ωστόσο, τις τελευταίες τρεις δεκαετίες οι κλινικές δοκιμές που εφήρμοσαν ανοσοτροποιητικούς παράγοντες, είχαν απογοητευτικά αποτελέσματα. Υπάρχει, η κοινώς παραδεκτή, άποψη πως η ανάπτυξη του φαινομένου της σήψης ακολουθεί σε γενικές γραμμές την ίδια πορεία, όμως διαφορετική σε κάθε ασθενή και ιδίως διαφορετική αναλόγως του είδους της λοίμωξης [10].

Η ανοσιακή απάντηση κατά την οξεία φάση της σήψης χαρακτηρίζεται από την φλεγμονή και την ενεργοποίηση των δραστικών κυττάρων του ανοσοποιητικού συστήματος (όπως είναι η φαγοκυττάρωση και η ενδοκυτταρική καταστροφή) στοχεύοντας στην εξολόθρευση του παθογόνου εισβολέα. Στην όψιμη φάση , το ανοσοποιητικό σύστημα πραγματοποιεί μία μετατόπιση στην αντιφλεγμονώδη κατάσταση προκειμένου να ελαχιστοποιήσει την φλεγμονή και να ξεκινήσει την επιδιόρθωση των ιστών. Αυτή η αλυσίδα των γεγονότων μπορεί να παραμορφωθεί με απρόβλεπτα σοβαρές συνέπειες για τον οργανισμό και να ακολουθήσει μία εκ σεσημασμένη συστηματική απελευθέρωση κυτταροκινών (η λεγόμενη «καταιγίδα κυτταροκινών»/cytokine storm). Αυτή η μαζική απελευθέρωση των κυτταροκινών προκαλεί προκαλέσει υπόταση, καρδιαγγειακή δυσλειτουργία, ιστική καταστροφή και πολυοργανική ανεπάρκεια, ενώ στην όψιμη φάση της σήψης, η ενεργοποίηση των προσαρμοστικών μονοπατιών μπορεί να αναστείλει πρόωρα την άμυνα του ξενιστή (εγγενής ανοσοανοχή ή εγγενής ανοσοπαράλυση) και να αυξηθούν, μαζί με τις προ-

φλεγμονώδεις κυτταροκίνες, οι συγκεντρώσεις μίας ισχυρής αντιφλεγμονώδους κυτταροκίνης, της ιντερλευκίνης-10 [11].

Μελέτες κατέδειξαν ωστόσο, πως οι καταστάσεις αυτές μπορούν να συνυπάρχουν ταυτόχρονα στη σήψη. Για παράδειγμα, η μελέτη των Shalova et al., [12] έδειξε πως τα φαγοκύτταρα των ασθενών με σήψη, που επιβίωσαν από την λοίμωξη, παρουσίαζαν ταυτόχρονα μειωμένη φλεγμονή και αυξημένη έκφραση των γονιδίων που κωδικοποιούσαν προϊόντα που αναμειγνύονταν στην φαγοκυττάρωση, στην καταστροφή των μικροβίων και στην ιστική επιδιόρθωση. Το μονοπάτι που διευκόλυνε αυτό το φαινόμενο, ήταν εξαρτώμενο από τον μεταγραφικό παράγοντα HIF-1$^{\alpha}$ (hypoxia-inducible factor 1-alpha) [12]. Σε άλλη έρευνα, των Vachharajani et al., [13] φάνηκε πως τα εκ σεσημασμένα ανασταλτικά φαινόμενα που συμβαίνουν στα λευκοκύτταρα κατά την όψιμη φάση της σήψης οδηγεί στην ανοσοπαράλυση η οποία σχετίζεται με την αυξημένη ευπάθεια σε δευτεροπαθείς λοιμώξεις και σε κακή πρόγνωση. Καθίσταται προφανές, λοιπόν, πως η κατανόηση των μηχανισμών που ρυθμίζουν τις φλεγμονώδεις αποκρίσεις του ξενιστή στην σήψη είναι εξέχουσας σημασίας για την αναγνώριση νέων θεραπευτικών στρατηγικών οι οποίες θα μπορέσουν να αναστρέψουν την απορρύθμιση του ανοσιακού συστήματος στους βαρέως πάσχοντες ασθενείς με σήψη. Ωστόσο, διάφορες μελέτες που έγιναν τα τελευταία τριάντα χρόνια, που στόχευσαν στην εφαρμογή ανοσιακής παρέμβασης στην σήψη, δεν είχαν τα αναμενόμενα αποτελέσματα, ενδεχομένως γιατί δεν υπήρξε προσπάθεια κατηγοριοποίησης των ασθενών ανάλογα με την κατάσταση της ανοσιακής τους ενεργοποίησης.

2.1. Σύνδρομο ομοιάζον με σύνδρομο ενεργοποίησης μακροφάγων (ΣΟΕΜ) ή Macrophage Activation-Like Syndrome (MALS)

Η Ελληνική Ομάδα Μελέτης της Σήψης με την διενέργεια μελετών έχει επισημάνει την παρουσία του MALS ως μία ανεξάρτητη ανοσολογική οντότητα η οποία σχετίζεται με δυσμενή εξέλιξη στην σήψη. Από τα δεδομένα που έχουν συλλεχθεί, ανευρέθη πως η συχνότητα εμφάνισης του, είναι μεταξύ 3.7% και 4.3% στις ελληνικές μελέτες κοόρτης για την σήψη. Επιπλέον, αποτελεί ανεξάρτητο παράγοντα κινδύνου για θάνατο, εντός 10 ημερών, από την εμφάνιση του σηπτικού συνδρόμου. Η οντότητα που είναι γνωστή ως σύνδρομο ενεργοποίησης των μακροφάγων ή αλλιώς αιμοφαγοκυτταρική λεμφοιστιοκύττωση(HSH), είναι μια απειλητική, για την ζωή, κατάσταση που διέπεται από παγκυτταροπενία, ιστική αιμοφαγοκυττάρωση και

πρώιμη εξέλιξη σε πολυοργανική ανεπάρκεια και θάνατο εντός 10 ημερών [14]. Ταξινομείται σε δύο κατηγορίες: οικογενής (familial/fHLH) και στο δευτεροπαθές (sHLH). Το δευτεροπαθές είναι γνωστό επίσης και ως σύνδρομο ενεργοποίησης μακροφάγων (MAS –macrophage activation syndrome). Το οικογενές προκαλείται από μεταλλάξεις που επηρεάζουν τα μονοπάτια της κυτταρόλυσης των κυττάρων natural-killers και των CD8+ Τ λεμφοκυττάρων. Αυτά είναι τα κύτταρα που αναγνωρίζουν και καταστρέφουν τα προσβεβλημένα κύτταρα. Το οικογενές αποδίδεται σε μεταλλάξεις του PRF1 , που κωδικοποιεί την περφορίνη, ή σε γονίδια που κωδικοποιούν πρωτεΐνες που απαιτούνται για την πρόσδεση και την διήθηση των κοκκίων, και την STXBP2 (πρωτεΐνη 2 που κωδικοποιεί την σύνδεση με την συνταξίνη). Οι μεταλλάξεις αυτές μετατρέπουν τα «natural killers» κύτταρα να υπερενεργοποιηιούν και να δημιουργήσουν το ερέθισμα για την καταιγίδα των κυτταροκινών και κατ'επέκταση στην οργανική ανεπάρκεια[15].

Η έντονη ενεργοποίηση και επέκταση των Τ-λεμφοκυττάρων και των μακροφάγων οδηγεί σε δυνητικά θανατηφόρες επιπλοκές των ρευματολογικών νοσημάτων, όπως στη συστηματική ιδιοπαθής νεανικής αρθρίτιδα και την αντίστοιχη νόσο των ενηλίκων, την νόσο Still των ενηλίκων. Ο κύριος δείκτης της παθογένειας του συνδρόμου αυτού βασίζεται στην υπερβολική ενεργοποίηση των ιστικών μακροφάγων, γεγονός που οδηγεί σε καταρρακτώδη παραγωγή των κυτταροκινών IL-1β, IL-18 και της φερριτίνης. Η οντότητα αυτή μπορεί να παρουσιαστεί δευτερευόντως σε έδαφος κακοηθειών και ποικίλων αυτοάνοσων παθήσεων, γι' αυτό τον λόγο έχουν θεσπιστεί κριτήρια αναγνώρισης τέτοιων καταστάσεων [16]. Χρειάζεται είτε η μοριακή επιβεβαίωση είτε να πληρούνται πέντε από τα οκτώ ακόλουθα κριτήρια σύμφωνα με την Διεθνή Ομάδα της Ιστιοκυττάρωσης (2004 – κριτήρια HLH):

- Πυρετός
- Σπληνομεγαλία
- Κυτταροπενία σε τουλάχιστον 2 κυτταρικές σειρές : Αιμοσφαιρίνη < 9 g/dL, Αιμοπετάλια <100 x 109/L , Ουδετερόφιλα <1.0 x 10 9 /L .
- Υπετριγλυκεριδαιμία και/ή υποινωδογοναιμία (τριγλυκερίδια ≥ 265 mg/dL , ινωδογόνο ≤150 mg/dL)
- Αιμοφαγοκυττάρωση στον μυελό των οστών, σπλήνα, ή λεμφαδένες
- Χαμηλή ή απούσα δραστηριότητα των κυττάρων natural killers (NK cells)

- Φερριτίνη ≥ 500 μg/L
- sCD25 (π.χ sIL2R) ≥ 2400 U/mL

Η οξεία φάση του συνδρόμου ενεργοποίησης μακροφάγων σχετίζεται συχνά με τις σημαντικά αυξημένες τιμές των προφλεγμονωδών κυτταροκινών. Η καταγίδα των κυτταροκινών διεγείρει μία αλληλουχία των μονοπατιών που οδηγεί στην ιστική καταστροφή και στον θάνατο [16].

Προκειμένου να διερευνηθεί το αν μία κατάσταση, όπως το σύνδρομο ενεργοποίησης των μακροφάγων υπάρχει στη σήψη, η ελληνική Ομάδα Μελέτης της Σήψης πραγματοποίησε μία ανάλυση 5121 ασθενών από τα μητρώα προοπτικής κοορτής. Χρησιμοποιώντας συγκεκριμένα κριτήρια ταξινόμησης, το σύνδρομο χαρακτηρίσθηκε «σύνδρομο ομοιάζον με σύνδρομο ενεργοποίησης μακροφάγων» ή Macrophage Activation-Like Syndrome (MALS), καθώς η οστεομυελική βιοψία (που απαιτείται ως κριτήριο για το MAS) δεν ήταν διαθέσιμη ως στοιχείο για όλους τους ασθενείς [17]. Σύμφωνα με τα εν λόγω κριτήρια , οι ασθενείς με σήψη (με βάση τους ορισμούς κατα Sepsis-3) και με HS score άνω του 151 ή που παρουσίαζαν συγχρόνως διαταραχή της ηπατικής βιοχημείας και στοιχεία συμβατά με διάχυτη ενδοαγγειακή πήξη, ταξινομήθηκαν ως ασθενείς με MALS. Αποδείχτηκε πως το σύνδρομο ήταν μία ανεξάρτητη μεταβλητή σχετιζόμενη με κακή έκβαση τις πρώτες 10 ημέρες. Η μέτρηση της τιμής της φερριτίνης στο πρώτο 24ωρο ορίστηκε ως ο διαγνωστικός δείκτης για το MALS. Η φερριτίνη είχε προταθεί ξανά ως δείκτης για την διάγνωση του συνδρόμου ενεργοποίησης μακροφάγων. Η τιμή φερριτίνης άνω του 4420 ng/mL σχετίστηκε με 97.1% ειδικότητα και 98% αρνητική προγνωστική αξία για την διάγνωση [18]. Η αιτία επιλογής της συγκεκριμένης τιμής ήταν η υψηλή διαγνωστική ειδικότητα που απαιτείτο για τον βιοδείκτη που χρησιμοποιήθηκε ως θεραπευτικός οδηγός. Επιπροσθέτως, οι αυξημένες τιμές φερριτίνης συσχετίσθηκαν με αυξημένες τιμές κυτταροκινών όπως IL-6, IL-18, IFNγ και sCD163, καθώς και με μειωμένη αναλογία IL-10/TNF-α. Επισημαίνεται ότι η ιντερλευκίνη 6(IL-6) οδηγεί μέσω χημειοταξίας στην προσέλκυση μεγάλου αριθμού ουδετεροφίλων κατά την αρχική φάση της φλεγμονής και συμμετέχει με την δράση της στον μηχανισμό της αιμόστασης μέσω διέγερσης των μεγακαρυοκυττάρων και στη συνέχεια ενεργοποίησης των αιμοπεταλίων [10].

Η ιντερλευκίνη-1 (IL-1) είναι παρούσα κυρίως εντός των κυττάρων, ιδίως στον ενδοθηλιακό φραγμό των ιστών, και έχει δύο μορφές: την ιντερλευκίνη-1α και την ιντερλευκίνη-1β. Όταν τα κύτταρα καταστρέφονται, η IL-1α ,λειτουργώντας ως ένα

«μόριο κινδύνου», απελευθερώνεται από τα κύτταρα και επάγει την παραγωγή της IL-1β καθώς και άλλων κυτταροκινών και χυμοκινών από τα γειτονικά κύτταρα. Με αυτόν τον τρόπο, συμβάλλει στην προσέλκυση των ουδετεροφίλων [19]. Η παραγωγή της ιντερλευκίνης-1β εξαρτάται κυρίως από την δράση της πρωτεάσης κυστείνης καση-1, η οποία αποκόπτει τμήμα λίγων αμινοξέων από το πρόδρομο μόριο της IL-1β. Η εν λόγω ιντερλευκίνη, μαζί με τον TNF-α, δρουν συνεργικά κατά τα πρώτα στάδια της σήψης [20]. Η δράση της ιντερλευκίης-1β επάγει την σύνθεση μορίων προσκόλλησης και κυτταροκινών από τα κύταρα του επιθηλίου με αποτέλεσμα την ενεργοποίηση των λευκοκυττάρων, την πρόσδεσή τους στο ενδοθήλιο και την μετατόπιση τους προς τον μεσοκυττάριο χώρο. Διαδραματίζει επίσης, ρόλο στην παραγωγή των μορίων μονοξειδίου του αζώτου(NOS), με αγγειοδιασταλτικό ρόλο, και κυκλοοξυγενάσης-2 (COX2). Με αυτόν τον τρόπο, η ιντερλευκίνη-1β συμβάλλει στην εμφάνιση του εμπυρέτου, καθώς δρα στον υποθάλαμο. Επιπροσθέτως, επηρεάζοντας τον άξονα υποθαλάμου-υπόφυσης-επινεφριδίων, παίζει ρόλο και στην έκκριση των κορτικοστεροειδών [6].

Την τελευταία δεκαετία, μία υποανάλυση που δημοσιεύθηκε από τον Shakoory [21], που επανεξέταζε στοιχεία από μία τυχαιοποιημένη, πολυκεντρική μελέτη φάσης III, στόχευε στο να αναδείξει την αποτελεσματικότητα του ανακινρα (anakinra), ενός ανασυνδυασμένου ανταγωνιστή του υποδοχέα της ιντερλευκίνης-1 σε ασθενείς με σήψη που παρουσίαζαν στοιχεία του συνδρόμου ενεργοποίησης μακροφάγων. Κύριος στόχος ήταν η παρατήρηση του κινδύνου θνητότητας σε διάστημα 28 ημερών και η χρήση ενός ανταγωνιστή του υποδοχέα της ιντερλευκίνης 1, που συσχετίσθηκε με σημαντική βελτίωση των ασθενών με σήψη και τη συνύπαρξη διαταραχής ηπατικής βιοχημείας και διάχυτης ενδοαγγειακής πήξης. Ως δείκτης για την επικράτηση των προφλεγμονωδών φαινομένων χρησιμοποιήθηκε η συνύπαρξη της διάχυτης ενδοαγγειακής πήξης και της διαταραχής της ηπατικής βιοχημείας κάτι που διαπιστώθηκε στο ποσοστό του 5.6%, επί του συνόλου των ασθενών.

2.2. Ανοσοπαράλυση σχετιζόμενη με την σήψη (Sepsis-induced immunoparalysis)

Η έτερη ακραία έκφανση του σηπτικού συνδρόμου χαρακτηρίζεται από ποικίλες διαταραχές του ανοσοποιητικού συστήματος. Η ανοσοπαράλυση εκφράζεται με την δυσλειτουργία των λεμφοκυττάρων, την αυξημένη απόπτωση τους, την διαταραγμένη παραγωγή των κυτταροκινών, την διαταραγμένη διαδικασία της φαγοκυττάρωσης,

την μειωμένη έκφραση των HLA-DR (human leukocyte antigen subclass-DR isotype/ Ανθρώπινα Λευκοκυτταρικά αντιγόνα) και την μειωμένη λειτουργικότητα τους[6]. Η απόκριση του εγγενούς ανοσοποιητικού συστήματος κατόπιν επαφής με τα PAMPs ή DAMPs και η ενεργοποίηση του προσαρμοσμένου ανοσοποιητικού συστήματος που ακολουθεί, χαρακτηρίζεται από την ενεργοποίηση των ενδοκυττάριων ρυθμιστικών και μεταγραφικών οδών με αποτέλεσμα την έκφραση γονιδίων, την παραγωγή και έκκριση των κυτταροκινών [22].

Η πολυπλοκότητα του σηπτικού συνδρόμου αποκαλύφθηκε όταν έγινε αντιληπτό πως θεραπευτικές προσεγγίσεις που είχαν στόχο την ανάσχεση της «καταιγίδας των κυτταροκινών» δεν στέφθηκαν με επιτυχία [6]. Το 1997 αναφέρθηκε ο όρος CARS (compensatory anti-inflammatory response) από τον Bone [23], με σκοπό την περιγραφή ενός ανοσολογικού φαινομένου που παρατηρήθηκε κατά την εκδήλωση σήψης στον ανθρώπινο οργανισμό. Όπως αντίστοιχα είχε περιγραφθεί ο πρόδρομος του φαινομένου αυτού, το SIRS (systematic inflammatory response), ο όρος CARS είναι ένα σύνθετο και κάπως αόριστο σύνολο από ανοσολογικές αντιδράσεις στην σοβαρή λοίμωξη. Θα μπορούσε κανείς να το περιγράψει αδρά ως μία απενεργοποίηση του ανοσοποιητικού συστήματος με σκοπό την αποκατάσταση της ομοιόστασης από μία φλεγμονώδη κατάσταση. Έγινε όμως αντιληπτό ότι, ως φαινόμενο, υπήρχε ανεξάρτητα και αυτόνομα σε σχέση με το SIRS, με διαφορετική πρόγνωση και ξεχωριστές αντιδράσεις σε κυτταρικό επίπεδο και σε επίπεδο παραγωγής κυτταροκινών. Οι κυτταροκίνες που αναδείχθησαν ως μεσολαβητές της εν λόγω αντι-φλεγμονώδους απόκρισης ήταν ο διαλυτός υποδοχέας του παράγοντα νέκρωσης όγκων (sTNFR)[24] , η ιντερλευκίνη-10 [25], ο ανταγωνιστής του υποδοχέα της ιντερευκίνης-1 (IL-1Ra) [26], και ο μεταμορφωτικός αυξητικός παράγοντας-β. (TGF-β) [27]. Παρά το γεγονός ότι η ομάδα του Bone υπέθεσε πως σε κάθε ασθενή με σήψη μπορεί να επικρατήσει είτε η εικόνα του SIRS είτε του CARS, και παρά το γεγονός πως υπήρχαν απόψεις για το ότι το CARS έπεται του SIRS στη σήψη, η επικρατέστερη άποψη ήταν πως τα φαινόμενα της υπερφλεγμονής και της αντιφλεγμονώδους διαδικασίας συνυπήρχαν ταυτόχρονα στην διαδρομή του συνδρόμου της σήψης σε έναν ασθενή. Έτσι, θεωρείται πως το CARS είναι η ομαλή απόκριση στην προσπάθεια του ξενιστή να περιορίσει την υπερφλεγμονώδη απάντηση του οργανισμού [28]. Ωστόσο, το CARS δεν είναι ένα γενικευμένο φαινόμενο που καταργεί τις ανοσιακές λειτουργίες, αλλά είναι μία προσαρμοστική διαδικασία που εξαρτάται από τα τμήματα του οργανισμού (π.χ αίμα, ιστοί), τον τύπο

της πρωτοπαθούς και της δευτεροπαθούς εισβολής, καθώς και την φύση των λευκοκυττάρων. Παραδείγματος χάριν, η απόπτωση μπορεί να ενισχυθεί (λεμφοκύτταρα, δενδριτικά κύτταρα), να παραμείνει αναλλοίωτη (μέσω των μονοκυττάρων), ή να μειωθεί (πολυμορφοπύρηνα)[29].

Η απόπτωση είναι ένα φαινόμενο που μπορεί να επηρεάσει τα λεμφοκύτταρα του αίματος [30], του σπληνός [31], και των επιθηλιακών κυττάρων του γαστρεντερικού σωλήνα [32] στη σήψη. Η ομάδα των Kuckleburg ανέδειξε πως οι αλληλεπιδράσεις ανάμεσα στα αιμοπετάλια που έχουν ενεργοποιηθεί από τα βακτήρια και το ενδοθήλιο μπορεί να διαδραματίζουν σημαντικό ρόλο στην αγγειακή παθολογία της σήψης. Τα ευρήματα τους έδειξαν πως η απόπτωση, και των ενδοθηλιακών κυττάρων που προκλήθηκε από τα ενεργοποιημένα αιμοπετάλια, απαιτεί την ενεργοποίηση της καση-8 και της καση-9, καθώς και την παραγωγή παραγώγων του οξυγόνου [33]. Επισημαίνεται ότι η απόπτωση μπορεί να προκαλέσει ανοσοκαταστολή με δύο μηχανισμούς: α) με την εξάλειψη των κυττάρων του ανοσοποιητικού συστήματος που οδηγεί στην απώλεια των αντιμικροβιακών μηχανισμών που παίζουν σημαντικό ρόλο, και β) μέσω των ανοσοκατασταλτικών επιδράσεων στα επιζώντα κύτταρα [33].

Η ομάδα πρωτεινών -1 υψηλής κινητικότητας (HMGB-1) εμφανίζεται ως το στοιχείο κλειδί που συνδέει την απόπτωση με την θνητότητα την σχετιζόμενη με την σήψη[34]. Η ομάδα πρωτεινών HMGB-1 είναι ένας παράγοντας του πυρήνα του κυττάρου που απελευθερώνεται από τα κύτταρα που αποπίπτουν και νεκρώνονται και δρά ως ο όψιμος μεσολαβητής της σήψης [35]. Επιπλέον, η ανίχνευση των πρωτεϊνών στο πλάσμα των ασθενών, σε κρίσιμη κατάσταση, στις μονάδες εντατικής θεραπείας συνδέθηκε με τη διάχυτη ενδοαγγειακή πήξη και την πολυοργανική ανεπάρκεια τη σχετιζόμενη με τη σήψη [36].

Η απόπτωση ενοχοποιείται και για τη μείωση άλλων πληθυσμών κυττάρων του ανοσοποιητικού συστήματος, όπως για παράδειγμα των μακροφάγων και των δενδριτικών κυττάρων. Με την μείωση του αριθμού τους, προσβάλλεται η λειτουργία της φαγοκυττάρωσης, ως στοιχείο άμυνας, ωστόσο ενεργοποιείται συγχρόνως και ένας πιο σύνθετος μηχανισμός που επηρεάζει τα επιζώντα φαγοκύτταρα. Με την φαγοκυττάρωση των υπολειμμάτων των αποπτωτικών κυττάρων επάγεται η παραγωγή από τα φαγοκύτταρα αντιφλεγμονωδών κυτταροκινών (π.χ IL-10) και μειώνεται η ανταπόκριση των σε PAMPs και κυτταροκίνες [37,38].

Αν και ο συνολικός αριθμός των λεμφοκυττάρων στους ασθενείς με σήψη μειώνεται, εντούτοις ένας συγκεκριμένος υποπληθυσμός λεμφοκυττάρων αυξάνεται σε αριθμό. Η ομάδα αυτή είναι τα CD4+ CD25+ λεμφοκύτταρα, τα λεγόμενα και Τ-ρυθμιστικά κύτταρα [5,38]. Τα εν λόγω κύτταρα παίζουν ρόλο στον περιορισμό της παραγωγής αυτοαντισωμάτων με το να επάγουν ανοσολογική ανοχή σε αυτοαντιγόνα που ενεργοποιούν τά Τ-λεμφοκύτταρα (με κύρια εντόπιση στον θύμο αδένα). Περιορίζουν όμως και την παραγωγή των αντισωμάτων έναντι των ξένων αντιγόνων [6]. Αλληλοεπιδρούν με τα κύτταρα του εγγενούς, όσο και του προσαρμοστικού ανοσοποιητικού συστήματος (ιδίως τα Β και Τ λεμφοκύτταρα) με φυσιολογικό ρόλο την αποφυγή εκδήλωσης αυτοάνοσης απόκρισης και την διατήρηση σταθερού αριθμού των περιφερικών CD4+ Τ-λεμφοκυττάρων [6]. Η παραγωγή από τα κύτταρα αυτά των αντιφλεγμονωδών κυτταροκινών, IL-10 και TGF-β, παίζει σημαντικό ρόλο στην εγκατάσταση της ανοσοπαράλυσης. Επιπλέον, μειώνουν την παραγωγή των προφλεγμονωδών κυτταροκινών και περιορίζουν την κυτταροτοξική δράση των CD8 Τ –λεμφοκυττάρων, επηρεάζουν την λειτουργία των μονοκυττάρων, καθώς επάγουν σε αυτά περιορισμένη απόκριση στις προφλεγμονώδεις κυτταροκίνες και μειώνουν την επιβίωση τους [37].

Η λοίμωξη συσχετίζεται με την έκρηξη της διαδικασίας της αιμοποίησης. Συνεπεία αυτής, οι ασθενείς με βακτηριακές λοιμώξεις επιδεικνύουν υψηλότερους αριθμούς από κυκλοφορούντα προγονικά μυελοειδή κύτταρα της κοκκιωματώδους σειράς [39]. Η διαταραχή των ουδετεροφίλων αποτελεί ένας σημαντικό στοιχείο της οντότητας της ανοσοπαράλυσης [6]. Στους σηπτικούς ασθενείς παρατηρείται αυξημένος αριθμός ουδετεροφίλων στο περιφερικό αίμα , που εμφανίζουν ποικίλους βαθμούς ωρίμανσης λόγω της μειωμένης απόπτωσης και της απελευθέρωσης από τον μυελό των άωρων μορφών (αριστερή στροφή). Η διαταραχή της λειτουργικότητας συνίσταται σε ελαττωματική φαγοκυττάρωση και στην αδρανοποίηση των βακτηρίων, στη μειωμένη παραγωγή των δραστικών ριζών οξυγόνου και την μείωση της χημειοτακτικής ικανότητας [6,38]. Παράλληλα, και τα μονοκύτταρα εκδηλώνουν διαταραχή της λειτουργικότητας τους, καθώς μειώνεται η ικανότητα τους της παραγωγής των προ-φλεγμονωδών κυτταροκινών (κυρίως του TNF-a) μετά από την επίδραση ενδοτοξινών (κυρίως της λιποπολυσακχαρίδης –LPS των gram αρνητικών βακτηρίων) ή άλλων PAMPs, φαινόμενο γνωστό ως «ανοχή στις ενδοτοξίνες». [38,39]. Η παραγωγή των αντιφλεγμονωδών κυτταροκινών (ιδίως της ιντερλευκίνης -10 και της IPAR-1) διατηρείται στα ίδια επίπεδα ή ενισχύεται. Το φαινόμενο αυτό

ονομάζεται επαναπρογραμματισμός των μονοκυττάρων (monocyte reprogramming) λόγω της αλλαγής που διενεργείται στην απόκριση τους[38,39,40].

Πέραν της αλλαγής της απόκρισης των μονοκυττάρων, σημαντική είναι και η αλλαγή στην δραστικότητα τους. Αυτό εκφράζεται ως η μείωση της έκφρασης των υποδοχέων των ανθρώπινων λευκοκυτταρικών αντιγόνων (HLD-DR) στην κυτταρική μεμβράνη των μονοκυττάρων των ασθενών με σήψη. Δεν μειώνεται μόνο ο αριθμός των μονοκυττάρων που εκφράζουν τα HLA-DR, αλλά και ο απόλυτος αριθμός μορίων HLA-DR ανά κύτταρο [40]. Αυτό το φαινόμενο δεν παρατηρείται σε άλλα είδη καταπληξίας, όπως την καρδιογενή και την υποογκαιμική [41]. Αυτή η διαδικασία της αντιγονοπαρουσίασης, καθίσταται έτσι λιγότερο αποτελεσματική αυξάνοντας την προδιάθεση του ξενιστή για προσβολή από δευτερογενή παθογόνα και αυξημένη θνητότητα [40]. Συγκεκριμένα, η αδυναμία αποκατάστασης της έκφρασης των HLA-DR υποδοχέων σε ποσοστό > 40% συγκριτικά με μονοκύτταρα από υγιείς μάρτυρες, πέραν της 7ης ημέρας εγκατάστασης της σήψης και η εμφάνιση δεύτερης μείωσης έκφρασης των HLA-DR -μετά από την παρατηρηθείσα ανάκαμψη- έχουν σχετιστεί με αυξημένη θνητότητα [42].

Συμπερασματικά, οι δύο καταστάσεις της υπερφλεγμονής και της ανοσοπαράλυσης μπορούν να λάβουν χώρα ταυτόχρονα στον οργανισμό του ξενιστή και αποτελούν αντίρροπες δυνάμεις, εξισορροπώντας την άμυνα του οργανισμού και παράλληλα περιορίζοντας την βλάβη που προκλήθηκε στα όργανα και στους ιστούς. Η Σηπτική καταπληξία μπορεί να είχε άρρηκτα συνδεθεί με την «καταρρακτώδη» συστηματική φλεγμονώδη αντίδραση του ξενιστή στην εισβολή των μικροβιακών παθογόνων -και στο παρελθόν αρκετές μελέτες επικεντρώθηκαν στο να καταστείλουν την ανοσιακή αντίδραση του οργανισμού- ωστόσο, το αποτέλεσμα δεν αποδείχτηκε επιτυχημένο. Η ανοσοπαράλυση σχετιζόμενη με την σήψη, είναι αυτή που ενοχοποιείται για την κατάληξη των ασθενών που επιβιώνουν από το αρχικό υπερφλεγμονώδες «χτύπημα» της λοίμωξης.

3. ΜΕΤΑΒΟΛΟΜΙΚΗ – ΜΕΤΑΒΟΛΙΚΟ ΠΡΟΦΙΛ –METABOLOMICS

Στη σημερινή εποχή , υπάρχει ένα προοδευτικά αυξανόμενο ενδιαφέρον για την βαθιά κατανόηση των βιολογικών μηχανισμών, όχι μόνο σε μοριακό επίπεδο, αλλά και στο πώς αυτοί επιδρούν σε μία δυναμική βιολογική δραστηριότητα του οργανισμού σε συνολικό επίπεδο. Τις τελευταίες δύο δεκαετίες, οι ερευνητές έστρεψαν το ενδιαφέρον του στην εξερεύνηση των αλληλεπιδράσεων μεταξύ των

βιολογικών συστατικών που απαρτίζουν έναν οργανισμό και το πως επιδρουν στην λειτουργικότητα του [43]. Οι μεταβολίτες, ως χαμηλού μοριακού βάρους μόρια, είναι το αποτέλεσμα, τόσο των βιολογικών, όσο και των περιβαλλοντικών παραγόντων και ως εκ τούτου παρέχουν μεγάλη δυνατότητα για την γεφύρωση της γνώσης του γονότυπου και του φαινότυπου. Η πρόκληση της επισήμανσης των μεταβολιτών είναι μεγαλύτερη σε σχέση με τις πρωτείνες και τα πεπτίδια. Πρόκειται για μικρού μεγέθους μόρια(<1500 Da), τα οποία παρά το γεγονός ότι έχουν κοινά στοιχεία, όπως για παράδειγμα άνθρακα (C), υδρογόνο (H), άζωτο (N), θείο (S), φώσφορο (P), εντούτοις δεν έχουν μία κοινή κατασκευαστική δομή. Παλαιότερα, οι επιστήμες της μοριακής βιολογίας και της φυσιολογίας επιτάσσονταν στο να αποκτηθεί περισσότερη γνώση και πληροφορία σε επίπεδο βιολογικών μορίων και λειτουργικών μηχανισμών αντίστοιχα. Ωστόσο, ακολουθώντας αυτές τις δύο στρατηγικές, το εύρος των δεδομένων που αποκτήθηκε ήταν περιορισμένο και δεν είχε καταστεί εφικτό να χαρακτηρισθεί ένα βιολογικό σύστημα με έναν τρόπο ολοκληρωμένο και πλήρη. Για τον λόγο αυτόν, η ανάπτυξη των στρατηγικών “omics” οδήγησαν σε μία αληθινή επανάσταση στον τομέα της επιστήμης και πλέον είναι ευρέως χρησιμοποιούμενες στην μελέτη των βιολογικών συστημάτων. Ο στόχος των “omics” είναι να αναγνωρίσουν και να ταυτοποιήσουν όλες τις κατηγορίες των βιομορίων (γονίδια, πρωτείνες, μεταβολίτες, μεταγράφωμα) που είναι ενσωματωμένες στους ιστούς, στα κύτταρα, στα βιολογικά υγρά ή στον οργανισμό, ώστε να παράγουν έναν ευμεγέθη όγκο δεδομένων που μπορούν να αξιοποιηθούν από τους τομείς της βιοστατιστικης και της βιοπληροφορικής [43].

Η τεχνολογία των metabolomics διαφέρει σε σύγκριση με τα υπόλοιπα “-omics”, όπως των proteomics (πρωτεωμική), genomics (γονιδιωματική) και transcriptomics (μεταγράφωμα), καθώς το μεταβολικό προφίλ/metabolomics είναι ουσιαστικά ένας αντικατοπτρισμός και έκφραση των proteomics, genomics και transcriptomics. Ωστόσο, η μέτρηση των συγκεντρώσεων των μεταβολιτών με την προαναφερόμενη μέθοδο, είναι μόνο το ένα μέρος του τι μπορεί να προσφέρει η τεχνολογία αυτή. Εξίσου σημαντική είναι η κατανόηση που μας προσφέρει στην δραστηριότητα των βιοχημικών μονοπατιών.

Ο όρος «μεταβόλωμα» ή metabolome έκανε πρώτη φορά την εμφάνιση του στην βιβλιογραφία το 1998 , από την ομάδα του Oliver [44] οι οποίοι μέτρησαν την αλλαγή στις σχετικές συγκεντρώσεις των μεταβολιτών ως απόρροια της απάλειψης ή της υπερέκφρασης ενός γονιδίου. Συνεπώς, ο όρος mteabolome εξέφραζε ένα ολόκληρο

σύνολο μεταβολιτών που εκφράζονται από έναν οργανισμό. Το 1999, η ομάδα Nicholson [45], χρησιμοποίησε τον όρο «μεταβονομική» ή “metabonomics” , ο οποίος αναφερόταν στην «ποσοτική μέτρηση της δυναμικής πολυπαραμετρικής μεταβολικής απόκρισης των ζωντανών συστημάτων στο παθοφυσιολογικό ερέθισμα ή στις γενετικές τροποιήσεις» και που μπορεί να προσδιορίσει το μεταβολικό προφίλ από την ταυτόχρονη ανάλυση πολλαπλών μεταβολιτών, ώστε να προσδώσει μία ακριβή εικόνα των ενεργών και μη-, μεταβολικών μονοπατιών. Οι μεταβολές στα επίπεδα των ενδογενών μεταβολιτών, ως αποτέλεσμα διεργασιών των ασθενειών, της τοξικότητας των φαρμάκων ή της λειτουργίας των γονιδίων έχουν αξιολογηθεί στα κύτταρα, στους ιστούς ή στα βιολογικά υγρά από την «μεταβονομική» [46,47,48].

Το 2001 , η «μεταβολομική» ορίστηκε από τον Fiehn ως η περιεκτική και ποσοτική ανάλυση όλων των μεταβολιτών του βιολογικού συστήματος υπό μελέτη [49]. Ο ίδιος συγγραφέας είχε θέσει την πιθανότητα να συνδέονται, οι παρατηρούμενες, αλλαγές στα μεταβολικά μονοπάτια με τις υποκείμενες γενετικές και γονιδιακές αλλαγές, μέσω των ενζύμων που εμπλέκονται σε αυτά τα μονοπάτια. Ωστόσο μέχρι το 2001, δεν υπήρχαν δημοσιευμένα αποτελέσματα για το πώς μπορούν να παραχθούν υποθέσεις σχετικές με τις γονιδιακές λειτουργίες μέσω της ανάλυσης του μεταβολώματος. Η ουσία του μεταβολικού αποτυπώματος (metabolic fingerprinting) είναι να αποκτηθεί αρκετή πληροφορία για να αποκαλυφθούν, οι κατά τα άλλα συγκεκαλυμμένες μεταβολικές διαφορποιήσεις, χωρίς να στοχεύουν στην απόκτηση ποσοτικών δεδομένων για όλα τα βιοχημικά μονοπάτια. Η λανθάνουσα βιοχημική πληροφορία που αποκτάται από την μεταβονομική μπορεί να χρησιμοποιηθεί για διαγνωστικό λόγο ή για την πρόγνωση μίας κατάστασης. Τέτοιου τύπου πληροφορία αντανακλά πραγματικά βιολογικά συμβάματα παρά την τάση για εκδήλωση ασθένειας κάτι που προσφέρεται από την πληροφορία που εξάγεται από την έκφραση γονιδίων [50].

Τις τελευταίες δύο δεκαετίες, μία άλλη ορολογία έχει κάνει την εμφάνιση της στην βιβλιογραφία, προκειμένου να ορίσει και να ταξινομήσει την μελέτη του μεταβολισμού. Ο όρος «μεταβολικό προφίλ» περιγράφηκε αρχικά ως η ανάλυση ενός μικρού αριθμού προκαθορισμένων μεταβολιτών για την διερεύνηση επιλεγμένων βιοχημικών μονοπατιών και η προέλευση του είναι από τις πρώιμες μελέτες πάνω στον μεταβολισμό από τους Horning και Horning το 1971 [51]. Το λεγόμενο «μεταβολικό αποτύπωμα» ή “metabolic fingerprinting” ορίστηκε από τον Fiehn [49] ως «μία ταχεία ταξινόμηση των δειγμάτων σύμφωνα με την προέλευση τους ή την

βιολογική τους σχετικότητα». Εν τέλει, το 2005, η ομάδα του Kell [52] πρότεινε τον όρο “metabolic footprinting” που αναφέρεται σε μία ολιστική προσέγγιση συλλογής πληροφορίας του μεταβολώματος από ένα συγκεκριμένο βιολογικό σύστημα (για παράδειγμα στο εξωμεταβόλωμα) και τι εκκρίνει ένα κύτταρο, ή ένα σύστημα, κάτω από ελεγχόμενες συνθήκες. Η συγκεκριμένη διαδικασία βασίζεται όχι μόνο στην μέτρηση των ενδοκυττάριων μεταβολιτών (γνωστό και ως “metabolic fingerprinting”) αλλά και στη συνεχή καταγραφή και παρατήρηση των μεταβολιτών που καταναλώνονται και εκκρίνονται. Η μεταβολομική, λοιπόν, άρχισε να θεωρείται, από πολλές απόψεις, πιο χρήσιμη και καλύτερη τεχνολογική μέθοδος, από την μελέτη των μεταγραφικών παραγόντων (transcriptomics) και την πρωτεωμική (proteomics). Άλλωστε, τα δεδομένα των ερευνητών [52] δείχνουν ότι οι αλλαγές του μεταβολικού προφίλ είναι πιο ενισχυμένες σε σχέση με τις αλλαγές στους μεταγραφικούς παράγοντες και στο πρωτεινικό προφίλ και είναι από αριθμητικής άποψης, σημαντικά πιο ανιχνεύσιμα. Με την τεχνολογία των metabolomics δίδεται η δυνατότητα με πιο οικονομικό τρόπο σχετικά με την τεχνολογία των transcriptomics και των proteomics να εξετασθεί μεγαλύτερος αριθμός δειγμάτων από οργανισμούς που έχουν αναπτυχθεί υπό ένα μεγάλο εύρος συνθηκών. Η ομάδα του Kell επισήμανε επιπλέον, πως η τεχνολογία που εμπλέκεται στα metabolomics είναι γενικευμένη και καθολική, καθώς ένας συγκεκριμένος μεταβολίτης είναι όμοιος σε κάθε οργανισμό που τον εμπεριέχει [52].

Πρόσφατα, το 2015, ο όρος “real-time metabolome profiling” προτάθηκε από την ομάδα του Link [53] και περιλαμβάνει την άμεση έγχυση βακτηρίων και κυττάρων σε ένα υψηλής ανάλυσης φασματόμετρου μάζας και στην μέτρηση εκατοντάδων μεταβολιτών σε κύκλους των λίγων δευτερολέπτων για αρκετές ώρες. Σε πραγματικό χρόνο, περιγράφηκε η δημιουργία του μεταβολικού προφίλ από την άμεση έγχυση ζωντανών βακτηρίων, από μονοκύτταρους μύκητες ή κύτταρα θηλαστικών, σε ένα υψηλής –ανάλυσης φασματόμετρο μάζας που επιτρέπει την αυτόματη καταμέτρηση περίπου 300 συστατικών στοιχείων σε κύκλους των 15 έως 30 δευτερολέπτων για αρκετές ώρες. Παρατηρήθηκε, η συσσώρευση μεταβολιτών ενεργειακά υψηλού κόστους βιομάζας σε στελέχη Escherichia Coli σε φάση εξάλειψης άνθρακα όπως επίσης και η ταχεία χρήση αυτών των μεταβολιτών σε επανάληψη της ανάπτυξης. Με τον συνδυασμό του μεταβολικού προφίλ ,σε πραγματικό χρόνο, με τα πειράματα ευπλαστότητας και αναστολέων, αποκτήθηκαν δεδομένα για να ακολουθηθούν οι δυναμικές των μεταβολικών διαδικασιών κατά μήκος ενός πλήρους μαζικού εύρους

σε μία ανάλυση διαφορετικών οργανισμών. Ωστόσο, προτού καταλήξουμε στην εδραίωση και διαμόρφωση των προαναφερθέντων όρων, μελέτες από την δεκαετία του 1940 που προέκυψαν από τουλάχιστον 200000 χρωματογράμματα, τα οποία αποκτήθηκαν κυρίως από βιολογικά υγρά διαφόρων ασθενών, ιδίως ανθρώπων που έπασχαν από σχιζοφρένεια και αιθυλικών ατόμων, παρήγαγαν στοιχεία που προσανατόλιζαν την επιστημονική κοινότητα προς την ύπαρξη συγκεκριμένων μεταβολικών μοτίβων σχετιζόμενων με κάθε μία από αυτές τις ομάδες ανθρώπων, δημιουργώντας την υπόθεση για «βιοχημική ατομικότητα» [54].

Αξίζει να σημειωθεί ότι από τα τέλη της δεκαετίας του 1990, πολλά ακρωνύμια έκαναν την εμφάνιση τους, σχετιζόμενα με τις στρατηγικές των “omics” και ήδη σε εκείνη την χρονική περίοδο, προτάθηκε η ορολογία “metabolome”, “metabolomics” και “metabonomics”. Οι Van der Greef και Smilde στην ανασκόπηση τους, ανέλυσαν την συμβίωση της μεταβολομικής και των χημειομετρικών παραμέτρων και παρουσίασαν την ενδιαφέρουσα διαδρομή της εξέλιξης των metabolomics [55]. Στο πλαίσιο αυτό, ο όρος lipidomics που προτάθηκε από τους Han και Gross το 2003 [56], αφορά στον καθορισμό του ερευνητικού πεδίου που επικεντρώνεται στην αναγνώριση μεταβολών στον λιπιδιακό μεταβολισμό και στις διαδικασίες στις οποίες μεσολαβούν λιπίδια, που ρυθμίζουν την κυτταρική ομοιόσταση στην υγιή κατάσταση και στην φάση της ασθένειας. Πρόκειται ουσιαστικά για μία υποκατηγορία των metabolomics, που ορίζεται από «τον πλήρη χαρακτηρισμό των ειδών των λιπιδιακών μορίων και των βιολογικών ρόλων αυτών, όσον αφορά στην έκφραση των πρωτεινών που αναμειγνύονται στον μεταβολισμό των λιπιδίων και την λειτουργικότητα τους , συμπεριλαμβανομένης και της γονιδιακής ρύθμισης». Ο τομέας των lipidomics δίνει έμφαση στην αναγνώριση των μεταβολών που συντελούνται σε κυτταρικό επίπεδο και στα βιολογικά υγρά, αποκαλύπτοντας τις περιβαλλοντικές διαταραχές, τις παθολογικές διεργασίες, ή την απόκριση στην φαρμακευτική θεραπευτική αγωγή [57].

Συγκεκριμένα, για την τεχνολογία των metabolomics (που στοχεύει ειδικά στα λιπίδια) παρατηρήθηκε προοδευτική αύξηση στην ανάπτυξη και χρήση της στην μελέτη των νευροψυχιατρικών παθήσεων, όπως η διπολική διαταραχή, η μείζονα καταθλιπτική διαταραχή και η σχιζοφρένεια, καθώς ο εγκέφαλος απαρτίζεται από κύτταρα (νευρώνες, αστροκύτταρα, νευρογλοιακά κύτταρα, ολιγοδενδροκύτταρα κ.ά) τα οποία κατόπιν ερεθίσματος επικοινωνούν μέσω χημικών ή ηλεκτρικών σημάτων ως απόκριση σε ερεθίσματα. Τα κύτταρα αυτά είναι προστατευμένα προκειμένου να

αποτραπούν οι διακυμάνσεις στις συγκεντρώσεις των ιόντων ή των χημικών ουσιών και διαχωρίζονται από τον υπόλοιπο οργανισμό μέσω αιματο-εγκεφαλικού φραγμού. Μία ανώμαλη κατανομή ή σύσταση των λιπιδίων εντός της κυτταρικής διπλοστιβάδας μπορεί να επηρεάσει σημαντικές διεργασίες της φυσιολογίας, σχετιζόμενες με τα κανάλια των ιόντων ή της λειτουργίας των υποδοχέων. Συνεπώς, οι μεταβολές που πραγματοποιούνται σε επίπεδο λιπιδιακής σύστασης μπορεί να έχουν σημαντικές παθολογικές επιπτώσεις[58,59].

Σε γενικές γραμμές τα πεδία των υπολοίπων –omics (genomics, transcriptomics, proteomics) βοηθούν την επιστημονική κοινότητα να κατανοήσει τι έχει ήδη συμβεί ή να προβλέψει τι μπορεί να γίνει. Ωστόσο ο τομέας της μεταβολομικής και της λιπιδομικής, προσφέρουν μία συνεχή και εκσυγχρονισμένη εικόνα της κατάστασης ενός βιολογικού συστήματος. Από τις απαρχές των metabolomics μέχρι και σήμερα, οι περισσότερες εφαρμογές είναι επικεντρωμένες στους φυτικούς οργανισμούς. Ωστόσο, με την πρόσφατη άφιξη της ακριβολογίας στην ιατρική, η εφαρμογή των metabolomics στην κλινική πράξη είναι στο επίκεντρο, καθώς υπάρχει μεγαλύτερη ανάγκη για την διάγνωση ασθενειών, την κατανόηση του μηχανισμού τους, την τροποποίηση της φαρμακευτικής αγωγής, της αναγνώρισης νέων θεραπευτικών στόχων καθώς και την παρακολούθηση (monitoring) του θεραπευτικού αποτελέσματος [60,61].

Συνοπτικά, η μεταβολομική είναι η μελέτη των παραγώγων του μεταβολισμού (metabolome), δηλαδή μίας συλλογής από σχετικά μικρού μεγέθους μορίων που παράγονται απο τα κύτταρα και είναι υπεύθυνα για τις μεταβολικές διεργασίες του οργανισμού[62]. Η παρουσία ή η ποσότητα αυτών των μορίων αντικατοπτρίζουν την κατάσταση των κυττάρων, των ιστών και των οργανισμών από τους οποίους προέρχονται. Η μεταβολομική ή metabolomics είναι σχετικά καινούρια για την επιστημονική κοινότητα, καθώς έκανε την εμφάνιση της την τελευταία δεκαετία και υπάρχουν στοχευμένοι και μή, τρόποι για να μελετήσει κανείς τους μεταβολίτες. Μία στοχευμένη προσέγγιση της μελέτης των μεταβολιτών είναι η μέτρηση συγκεκριμένου αριθμού των μεταβολιτών στο μεταβολικό μονοπάτι που αποτελεί αντικείμενο ενδιαφέροντος.

Το μεταβολικό προφίλ , γνωστό ως «μεταβολομική» (metabolomics) ή μεταβολικός φαινότυπος έχει χρησιμοποιηθεί ευρέως με στόχο την σφαιρική μέτρηση των μεταβολιτών που εμπεριέχονται και ανιχνεύονται σε βιολογικά υγρά και σε ιστούς με σκοπό να γίνει κατανοητό το πώς αυτοί οι μεταβολίτες -ως αποτέλεσμα

πολλαπλών παραγόντων (όπως για παράδειγμα ο τρόπος ζωής, το περιβαλλοντικό στρες, η ασθένεια και η χορηγηθείσα φαρμακευτική αγωγή) - τροποποιούνται. Το να κατασκευάζει κανείς μεταβολικό προφίλ είναι μια μη εκλεκτική διαδικασία και οδηγεί στην παραγωγή διεθνών μετρήσεων των μεταβολιτών, καθιστώντας τους ως μια αποτελεσματική μέθοδος προκειμένου να διερευνηθεί μία πληθώρα από βιολογικές διαδικασίες που εξελίσσονται ταυτόχρονα, αλλά και να ανακαλυφθούν νέοι βιοδείκτες που μπορούν να χρησιμοποιηθούν στην κλινική πράξη. Παρά το γεγονός ότι η θνητότητα της σήψης παραμένει υψηλή, υπάρχει σαφής μείωση συγκριτικά με τις προηγούμενες δεκαετίες, κυρίως λόγω της έγκαιρης αναγνώρισης και παρέμβασης από την ιατρική κοινότητα. Η χρήση του μεταβολικού φαινότυπου των ασθενών αποτελεί αντικείμενο ενδιαφέροντος και μελέτης προκειμένου να γίνει έγκαιρη διάγνωση και αντιμετώπιση του σηπτικού συνδρόμου. Η ποσοτική μέτρηση της δυναμικής μεταβολής των μεταβολιτών ως απόκριση στις παθοφυσιολογικές επικρατούσες συνθήκες, γνωστή και με τον όρο “metabolomics” (μεταβολομική) μπορεί να διοχετεύσει τα μεταβολικά προφίλ από την ταυτόχρονη ανάλυση πολλαπλών μεταβολιτών και να παρέχει μια πιο ακριβή εικόνα των μεταβολικών οδών [63]. Μάλιστα, τις τελευταίες τρεις δεκαετίες, έχουν διεξαχθεί μελέτες που στόχευαν στο να διαχωρίσουν τους ασθενείς με σήψη από τους υγιείς οργανισμούς ή από εκείνους που παρουσιάζουν το συστηματικό σύνδρομο φλεγμονώδους απόκρισης στη σήψη (SIRS) χρησιμοποιώντας τεχνικές σχετικές με την μεταβολομική [64].

3.1. Μεθοδολογία Metabolomics - Πλατφόρμες επεξεργασίας μεταβολιτών

Το πρώτο βήμα στον σχεδιασμό και στην εφαρμογή πειραμάτων και μελετών σχετιζόμενων με τα metabolomics είναι να αποφασιστεί ο αριθμός των μεταβολιτών που πρόκειται να μετρηθεί. Οι μεταβολίτες θεωρούνται ως η άμεση «υπογραφή» της βιοχημικής δραστηριότητας. Υπάρχουν στοχευμένες και μή – προσεγγίσεις για την μελέτη του μεταβολώματος. Η στοχευμένη μελέτη(targeted metabolomics) επικεντρώνεται στην μέτρηση συγκεκριμένου αριθμού μεταβολιτών στο μονοπάτι που αποτελεί αντικείμενο ενδιαφέροντος την δεδομένη στιγμή [65]. Θέτει και βρίσκει απάντηση στο ερώτημα Ποια είναι τα επίπεδα συγκεκριμένων μεταβολιτών σε ένα δείγμα; Η προσέγγιση αυτή αναφέρεται σε μία μέθοδο στην οποία καταμετρείται μία συγκεκριμένη λίστα από μεταβολίτες. Τυπικά όμως, επικεντρώνεται σε ένα ή περισσότερα μονοπάτια που αποτελούν αντικείμενο ενδιαφέροντος. Η στοχευμένη

προσέγγιση κατά κανόνα, καθοδηγείται από ένα συγκεκριμένο βιοχημικό ερώτημα, ή υπόθεση που δημιουργεί το κίνητρο για την διερεύνηση ενός συγκεκριμένου μονοπατιού. Με την εν λόγω προσέγγιση, οι ερευνητές ουσιαστικά θέτουν ένα συγκεκριμένο ερώτημα από βιοχημικής άποψης, βασισμένο σε μία υπόθεση, όμως η επιτυχία αυτής της διαδικασίας έγκειται κυρίως σε προϋπάρχοντα δεδομένα και στην εδραιωμένη γνώση [66]. Η μέθοδος αυτή μπορεί να είναι αποτελεσματική σε μελέτες φαρμακοκινητικής που μελετούν τον μεταβολισμό ενός φαρμάκου, όπως επίσης και για την μέτρηση της επίδρασης στην εφαρμογή θεραπειών ή τις γενετικές τροποιήσεις ενός συγκεκριμένου ενζύμου.

Η ανάπτυξη εργαλείων όπως η φασματομετρία μάζας και ο μαγνητικός πυρηνικός συντονισμό (NMR-Nuclear Magnetic Resonance) μας προσφέρουν σημαντικά πλεονεκτήματα εξ αιτίας της ειδικότητας και της ποιοτικής αναπαραγωγιμότητας τους. Στην στοχευμένη προσέγγιση(targeted metabolomics) , χρησιμοποιείται η τριπλή τετραπολική φασματομετρία μάζας (triple quadrupole mass spectrometry) για να στοχεύσει στη διαλογή μίας λίστας μεταβολιτών για μία ασθένεια ή ένα βιοχημικό μονοπάτι [65]. Ο συγκεκριμένος αναλυτής επιλέγει και αναλύει τα ιόντα που αποτελούν αντικείμενο ενδιαφέροντος, διαθέτει ένα τετραπολικό θραύστη κυττάρων ο οποίος τμηματοποιεί και τέλος αναλύει τα τμήματα αυτά. Η εν λόγω μέθοδος χρησιμοποιείται για την στοχευμένη προσέγγιση της μελέτης των μεταβολιτών και έχει υψηλή ευαισθησία για την απόλυτη μέτρηση των μεταβολιτών χαμηλής συγκέντρωσης, χρησιμοποιείται δε για την διενέργεια επιλεγμένων πειραμάτων καταγραφής των αντιδράσεων (selected reaction monitoring methods). Στη συνέχεια, η ιδανική τάση αποφασίζεται και οι καμπύλες ανταπόκρισης παράγονται για την απόλυτη ποσοτικοποίηση. Αφού έχει εδραιωθεί η στοχευμένη μέθοδος για τους βασικούς μεταβολίτες, εν συνεχεία, εξάγονται από τους ιστούς οι μεταβολίτες, τα βιολογικά υγρά ή οι καλλιέργειες των κυττάρων και αναλύονται. Η εξαγωγή των δεδομένων από αυτή την διαδικασία παρέχει ποσοτικοποίηση μόνο των μεταβολιτών για τους οποίους έχουν κατασκευαστεί οι συγκεκριμένες μέθοδοι [65].

Στην φαρέτρα των εργαλείων για τα metabolomics υπάρχουν επίσης η φασματοσκοπία υπεριώδους ορατότητας (ultraviolet-visible spectroscopy) και ο ιονισμός φλόγας. Ο πυρηνικός μαγνητικός συντονισμός είναι μία αναλυτική τεχνική που εκμεταλλευόμενη τις διαφορετικές αντιδράσεις σε ερεθίσματα ραδιοσυχνοτήτων από χημικά διακεκριμένους πυρήνες ατόμων σε ένα εξωτερικό μαγνητικό πεδίο προκειμένου να παρέχουν πληροφορίες σχετικά με την δομή και την δυναμική των

μορίων. Συνοπτικά, η διαδικασία που ακολουθείται είναι η ακόλουθη. Ένας αριθμός συγκεκριμένων μεταβολιτών υποβάλλονται στην διαδικασία της υγρής χρωματογραφίας ακολουθούμενης από την φασματομετρία μάζας. Διενεργείται η επιτήρηση επιλεγμένης αντίδρασης και πραγματοποιείται ο εντοπισμός της αιχμής. Εν συνεχεία, βελτιστοποιείται και δημιουργείται μία συγκεκριμένη καμπύλη για την ποσοτικοποίηση. Λαμβάνονται δείγματα τα οποία είναι προϊόντα λύσης ιστών, κύτταρα, αίμα και άλλα βιολογικά υγρά και υποβάλλονται στην μεθοδολογία της υγρής χρωματογραφίας ακολουθούμενης από την φασματομετρία μάζας. Εν τέλει, πραγματοποιείται η ανάλυση δεδομένων και η σύγκριση των ομάδων δειγμάτων, ώστε να γίνει εφικτή η ποσοτικοποίηση συγκεκριμένων μεταβολιτών σε βιολογικά δείγματα τα οποία αναλύθηκαν [66].

Η μή στοχευμένη προσέγγιση, ή όπως αλλιώς είναι γνωστή ως “global metabolomics” (σφαιρικη διερεύνηση μεταβολομικής), χρησιμοποιεί μία αμερόληπτη και αντικειμενική μέθοδο διαλογής για να επιτύχει την ταυτοποίηση/αναγνώριση χιλιάδων μεταβολιτών σε ένα μονήρες πείραμα που διεξάγεται , επιτρέποντας την εξερεύνηση άγνωστων μεταβολιτών [67]. Το ερώτημα που τίθεται προς απάντηση εδώ είναι: ποιο είναι το πλήρες/καθολικό προφίλ μεταβολιτών σε ένα δείγμα; Στη ροή εργασίας της μη –στοχευμένης προσέγγισης, το πρώτο βήμα είναι η απομόνωση των μεταβολιτών από τα βιολογικά δείγματα. Αρκετές μέθοδοι έχουν χρησιμοποιηθεί, όπως η ομογενοποίηση των δειγμάτων και η καθίζηση των πρωτεινών. Οι μεταβολίτες, αφού απομονώνονται από τα δείγματα βιολογικού υλικού, αναλύονται από την υγρή χρωματογραφία και εν συνεχεία από την φασματομετρία μάζας (Liquid chromatography/Mass spectrometry). Το φυσιοχημικό πεδίο του μεταβολόματος είναι αρκετά ετερογενές, συνεπώς για να αυξηθεί ο αριθμός των ανιχνεύσιμων συστατικών, χρησιμοποιούνται πολύπλοκες μέθοδοι για την εξαγωγή και τον διαχωρισμό των μεταβολιτών που διακρίνονται σε υδρόφοβοι και υδρόφιλοι [68]. Συχνά, τα δεδομένα συλλέγονται με ένα τετραπολικό φασματόμετρο μάζας time-of-flight (QTOF) και ενίοτε χρησιμοποιούνται άλλα όργανα, όπως οι παγίδες ιόντων (ion trap instruments).

Μετά την απόκτηση δεδομένων, τα αποτελέσματα υποβάλλονται σε επεξεργασία με την χρήση λογισμικού βιοπληροφορικής, όπως το XCMS (eXtensible Computational Mass Spectrometry) για την διενέργεια μη-γραμμικής ευθυγράμμισης χρόνου διατήρησης (non-linear retention time alignment) και την αναγνώριση αιχμών που μεταβάλλονται ανάμεσα στις ομάδες των δειγμάτων που μετρούνται. Κατόπιν,

αυτές επιβεβαιώνονται από την σύγκριση δεδομένων που αποκτήθηκαν από την φασματοσκοπία μάζας και τα δεδομένα του χρόνου παραμονής με αυτά των κυρίως τμημάτων. Η μη-στοχευμένη ροή εργασιών είναι καθολικής οπτικής και εξάγει δεδομένα σχετιζόμενα διεξοδικά με τον κυτταρικό μεταβολισμό. Επισημαίνεται ότι η μη-στοχευμένη προσέγγιση μπορεί να διεξαχθεί είτε με την μέθοδο του πυρηνικού μαγνητικού συντονισμού, είτε με την τεχνολογία της φασματοσκοπίας μάζας. Ωστόσο η τεχνολογία της υγρής χρωματογραφίας, ακολουθούμενης από την φασματομετρία μάζας, παρέχει την δυνατότητα της ανίχνευσης των περισσότερων μεταβολιτών και παραμένει η τεχνική εκλογής για τον καθορισμό του συνολικού μεταβολικού προφίλ. Με την χρήση των μεθόδων που βασίζονται στην υγρή χρωματογραφία ακολοθούμενη από την φασματομετρία μάζας, χιλιάδες αιχμές μπορούν να ανιχνευθούν ως ρουτίνα από δείγματα βιολογικού υλικού. Κάθε αιχμή εξ αυτών αναφέρεται σε ένα χαρακτηριστικό στοιχείο ενός μεταβολίτη και αντιστοιχεί σε ένα ιόν που έχει ανιχνευθεί με μία μοναδική αναλογία μάζας/ενεργοποίησης και έναν μοναδικό χρόνο κατακράτησης. Εν αντιθέσει με την στοχευμένη προσέγγιση των metabolomics, η μη στοχευμενη προσέγγιση των δεδομένων είναι αρκετά πολύπλοκη, με μέγεθος φακέλων πολλών γιγabytes -ανά δείγμα- για μερικά υψηλής ανάλυσης όργανα φασματομετρίας μάζας [67,68].

Με δεδομένη την ευαισθησία της μεθόδου, την υψηλή διεκπεραιωτικότητα της, και τις μικρές απαιτήσεις σε δείγματα, η μη στοχευμένη προσέγγιση έχει ευρεία εφαρμογή σε μεγάλο εύρος βιολογικών ερωτήσεων. Παρά την σχετικά πρόσφατη ανάδειξη της ως μέθοδο σφαιρικής τεχνολογίας δημιουργίας προφίλ, έχει ήδη καταφέρει να αυξήσει την κατανόηση του ενδοκυττάριου μεταβολισμού και έχει χρησιμοποιηθεί για να διεκπεραιώσει βιοιατρικά θέματα. Συγκεκριμένα, έχει αναδειχθεί σε πολύ χρήσιμο εργαλείο για να ταυτοποιήσει αλλαγές σε μεταβολικά μονοπάτια σε νοσήματα, ώστε να αποτελέσουν καινούριους στόχους φαρμάκων. Η εν λόγω βιοιατρική εφαρμογή αυτής της μεθόδου καλείται «θεραπευτική μεταβολομική» (therapeutic metabolomics) [69].

Ένα παράδειγμα της συνεισφοράς της, είναι η ανακάλυψη των αυξημένων επιπέδων του μεταβολίτη 2-υδροξυγλουταρικού σε καρκινικά κύτταρα με μεταλλάξεις της ισοκιτρικής δευδρογενάσης, που αποτελεί κοινό χαρακτηριστικό μίας σημαντικής υπο-ομάδος των ανθρώπινων καρκίνων εγκεφάλου [70]. Τα ευρήματα αυτά υποδεικνύουν ότι η αναστολή της παραγωγής του 2-υδροξυγλουταρικού θα μπορούσε να αποτελεί μία αποτελεσματική θεραπευτική προσέγγιση για να

επιβραδύννει ή να σταματήσει την μετατροπή ενός γλοιώματος χαμηλού βαθμού δυσπλασίας σε θανατηφόρο δευτεροπαθές γλοιοβλάστωμα. Επιπρόσθετο παράδειγμα, αποτελεί η ανεύρεση υψηλών επιπέδων του σφιγγολιπιδίου διμεθυλσφιγγοσίνη στον νωτιαίο μυελό αρουραίων που έπασχαν από νευροπαθητικό άλγος [71]. Τα αυξημένα επίπεδα της διμεθυλσφιγγοσίνης συσχετίσθηκαν με πρόκληση συμπεριφοράς σχετιζόμενης με άλγος in vivo και υποδεικνύουν την αναστολή της μεθυλτρανσφεράσης ή της κεραμιδάσης ως μία ενδεχόμενη θεραπευτική προσέγγιση για την θεραπεία του χρόνιου άλγους με το να αποκλειστεί η παραγωγή της διμεθυλσφιγγοσίνης.

Η μη-στοχευμένη προσέγγιση της μεταβολομικής, όπως επισημαίνεται από τα ανωτέρω παραδείγματα, έχει σαφείς εφαρμογές όχι μόνο στην στοχευμένη θεραπεία αλλά και στην παροχή της γνώσης σε βιοχημικό επίπεδο σε μία μεγάλου εύρους μηχανιστικής βιολογίας του κυττάρου. Στην εν λόγω προσέγγιση (untargeted metabolomics), πλατφόρμες όπως ο πυρηνικός μαγνητικός συντονισμός (Nuclear Magnetic Resonance –NMR), η φασματομετρία μάζας-αέρια χρωματογραφία(Gas Chromatography-Mass Spectrometry /GC-MS) και η φασματομετρία μάζας –υγρή χρωματογραφία έχουν χρησιμοποιηθεί σε μία πληθώρα από συνδυασμούς πειραμάτων. Στόχος της NMR είναι η μέτρηση των σημάτων που προέρχονται από τους πυρήνες των ισότοπων σε επίπεδο ατόμου. Η GC-MS μετράει την αναλογία μάζας /ενεργοποίησης των μεταβολιτών στους οποίους έχει παρατηρηθεί αλλαγή. Σε αυτή την περίπτωση, οι μεταβολίτες διαχωρίζονται από την αέρια φασματογραφία. Πρόκειται για μία μέθοδο που έχει μεγάλο εύρος αναγνώρισης μεταβολιτών, ιδίως για αυτούς που είναι σε αέρια ή πτητική μορφή. Ωστόχο, έχει και το μειονέκτημα ότι είναι καταστροφική, χρονοβόρος ως προς την σωστή προετοιμασία των δειγμάτων και περιορίζεται στους πτητικούς μεταβολίτες [71].

Από την πλευρά της, η LC-MS μετράει την αναλογία μάζας/ενεργοποίησης των μορίων. Οι μεταβολίτες εδώ διαχωρίζονται από την υγρή χρωματογραφία. Πρόκειται για την μέθοδο με την υψηλότερη ευαισθησία και δεν είναι τόσο χρονοβόρα, όσον αφορά στην προετοιμασία των δειγμάτων προς μελέτη. Ωστόσο, είναι επίσης καταστροφική μέθοδος και περιορίζεται σε οργανικά στοιχεία που συνθέτουν μοριακά ιόντα. Συνοπτικά , η διαδικασία που ακολουθείται είναι η εξής:
Από τα δείγματα που έχουν συλλεχθεί , τα οποία είναι προϊόντα λύσης ιστών, κύτταρα, αίμα και άλλα βιολογικά υγρά, πραγματοποιείται η επεξεργασία των εκχυλισμάτων των μεταβολιτών με υγρή χρωματογραφία ακολουθούμενη από την

φασματομετρία μάζας. Εν συνεχεία, διενεργείται η επικάλυψη εξαγωγής των χρωματογραφημάτων ιόντων και η ευθυγράμμιση των δεδομένων τα οποία αναλύονται. Ακολούθως, γίνεται επικύρωση με την διαδοχική φασματομετρία μάζας (MS/MS) και η διαδικασία της μη στοχευμένης προσέγγισης καταλήγει στον προσδιορισμό του σφαιρικού προφίλ των βιολογικών δειγμάτων. Το μεταβολικό προφίλ συγκρίνεται με δύο συνθήκες ή σε έναν πληθυσμό προκειμένου να ανακαλυφθεί ένας καινούριος μεταβολίτης [68]. Με την μέθοδο αυτή, της μη-στοχευμένης προσέγγισης (untargeted metabolomics), ανοίγει ο δρόμος για την ευρεία και συλλογική επισκόπηση του συνόλου των μεταβολιτών στον βιολογικό οργανισμό, καθώς πραγματοποιείται η ταυτόχρονη αμερόληπτη μέτρηση του κατά δύναμιν μέγιστου αριθμού μεταβολιτών από βιολογικά δείγματα. Η εν λόγω προσέγγιση χρησιμοποιείται με αποτελεσματικό τρόπο για φαρμακοκινητικές μελέτες του μεταβολισμού των φαρμάκων όπως επίσης και για την μέτρηση της επίδρασης των θεραπευτικών ή των γενετικών τροποποιήσεων ενός συγκεριμένου ενζύμου. Αναφορικά με την ενζυμική δραστηριότητα, ένα παράδειγμα που μπορεί να μας διαφωτίσει είναι για το μυκοβακτηρίδιο της φυματίωσης (Mycobacterium tuberculosis) μέσω της επώασης ενός κεκαθαρμένου ανασυνδυασμένου ενζύμου μαζί με ένα μικρού μεγέθους μόριο που αποτελεί μυκοβακτηριδιακό παράγωγο. Το μικρού μεγέθους μόριο υπέστη ανάλυση με την μέθοδο της υγρής χρωματογραφίας ακολουθούμενης από την φασματομετρία μάζας (LC/MS) για αλλοιωμένο υπόστρωμα και προϊόν, με αποτέλεσμα η ατελώς χαρακτηριζόμενη πρωτεΐνη Rv1248c να οριστεί ως η 2-υδροξυ-3-οξυαδιπική συνθετάση [72].

Τα στοιχεία δείχνουν ότι υπάρχει μία προοδευτικά αυξανόμενη χρήση της μεταβολομικής σε μία ποικιλία από τομείς του ερευνητικού πεδίου, όπως την αναγνώριση βιοδεικτών, της δραστηριότητας των φαρμάκων ή της τοξικότητας της σχετιζόμενης με χορηγούμενο φάρμακο και την μελέτη του μεταβολισμού σε σχέση με τα προαναφερθέντα [73]. Ιδίως η πρώιμη αναγνώριση των υπεύθυνων μικροοργανισμών για τους ασθενείς με σοβαρή λοίμωξη, είναι μείζονος σημασίας για την τροποποίηση της αντιμικροβιακής θεραπείας και της επιβίωσης των ασθενών. Στον ανθρώπινο οργανισμό, ο ορός, το πλάσμα και τα δείγματα ούρων μπορούν να χρησιμοποιηθούν για την μελέτη του μεταβολώματος. Παρά το γεγονός ότι η μελέτη της μεταβολομικής αυξάνει το βάθος της κατανόησης μας για την απόκριση του ξενιστή στην ασθένεια, η βαθιά αντίληψη της σχέσης με περιβαλλοντικούς παράγοντες, όπως το μικροβίωμα (το οποίο μεταβάλλεται αναλόγως της βαρύτητας

της ασθένειας), είναι εξίσου εξέχοντος σημασίας στην ανάπτυξη υποψήφιων στοχευμένων θεραπειών [74].

ΕΙΔΙΚΟ ΜΕΡΟΣ

4. ΕΙΣΑΓΩΓΙΚΑ ΣΤΟΙΧΕΙΑ

Ως σήψη ορίζεται η απειλητική, για τη ζωή, οργανική ανεπάρκεια η οποία προκαλείται από την διαταραγμένη απόκριση του ξενιστή σε μία λοίμωξη [1]. Ο νέος αυτός ορισμός του 2016, όπως έχει καθοριστεί από την Τρίτη Διεθνή Ομοφωνία Ορισμών της Σήψης (Sepsis-3), δίνει έμφαση στην πρωτεύουσα σημασία της διαταραχής της ομοιόστασης του ξενιστή/οργανισμού ως απόκριση αυτού στη λοίμωξη, την θνητότητα -η οποία είναι σημαντικά υψηλότερη συγκρινόμενη με μία ανεπίπλεκτη λοίμωξη- και την ανάγκη για την επείγουσα αναγνώριση της νόσου προκειμένου να γίνει έγκαιρη έναρξη της θεραπευτικής παρέμβασης. Επιπλέον, ο ορισμός αυτός υπογραμμίζει τον ρόλο της διαταραχής της ανοσιακής απόκρισης του ξενιστή, ως την κινητήριο δύναμη για την οργανική δυσλειτουργία και οδηγεί το πεδίο της έρευνας, για την σήψη, προς νέες κατευθύνσεις και νέες θεραπευτικές επιλογές, επισημαίνοντας παράλληλα την ανάγκη να καταστεί εφικτή η αναστροφή της ανοσιακής δυσλειτουργίας [1].

Σχηματικά, η ετερογένεια της ανοσιακής απόκρισης των ασθενών σε μία λοίμωξη θα μπορούσε να αναπαρασταθεί με ένα φάσμα, στο ένα άκρο του οποίου βρίσκονται οι ασθενείς με υπερφλεγμονώδη αντίδραση, στο έτερο άκρο οι ασθενείς σε ανοσοπαράλυση και στα ενδιάμεσα σημεία βρίσκονται εκείνοι οι ασθενείς τα χαρακτηριστικά των οποίων ανήκουν τόσο στις υπερφλεγμονώδεις όσο και στις υποφλεγμονώδεις αποκρίσεις. Από τα υπάρχοντα δεδομένα φαίνεται πως οι ασθενείς με σήψη παρουσιάζουν σημαντική ετερογένεια, ως προς το είδος της ανοσιακής τους απόκρισης, γεγονός που πιθανόν να υποδεικνύει πως δεν είναι σωστό να λαμβάνουν όλοι την ίδια φαρμακευτική αγωγή. Είναι σημαντικό λοιπόν, ο θεράπων ιατρός να αντιληφθεί εγκαίρως την πρώιμη φάση του σηπτικού συνδρόμου

και την ανοσιακή κατάσταση απόκρισης στην οποία βρίσκεται ο ασθενής με σήψη, ώστε να είναι εφικτός ο σχεδιασμός μιας προσωποποιημένης και στοχευμένης επικουρικής ανοσοτροποποιητικής θεραπευτικής αγωγής, που να αποδειχτεί καταλληλότερη από την κλασσική ανοσοθεραπεία [39].

Τις τελευταίες δύο δεκαετίες οι περισσότερες από τις τυχαιοποιημένες μελέτες που διενεργήθηκαν απέτυχαν στο να αναδείξουν το κλινικό όφελος των ασθενών μετά την εφαρμογή θεραπευτικών στρατηγικών ανοσοπαρέμβασης. Η πιθανότερη εξήγηση για αυτήν την αποτυχία είναι πως οι ασθενείς με σηπτικό σύνδρομο εντάχθηκαν στις μελέτες αυτές χωρίς να υπάρχει κατηγοριοποίηση και διαφοροποίηση τους ανάλογα με την ένταση της ανοσιακής τους απόκρισης. Σε μία πολυκεντρική, προοπτικής και τυχαιοποιημένη διπλή-τυφλή μελέτη που διεξήχθη 30 χρόνια πριν στη Βόρεια Αμερική και στην Ευρώπη -και στην οποία εντάχθηκαν συνολικά 906 ασθενείς- έγινε σύγκριση του παράγοντα anakinra με εικονικό φάρμακο (placebo) ως προς την τελική έκβαση των ασθενών με σοβαρή σήψη [75]. Στο πλαίσιο αυτό, οι ασθενείς με σοβαρή σήψη ή σηπτική καταπληξία έλαβαν την ενδεδειγμένη υποστηρικτική αγωγή και την αντιμικροβιακή θεραπεία και στη συνέχεια τυχαιοποιήθηκαν ώστε να λάβουν το anakinra ή το εικονικό φάρμακο. Επισημαίνεται ότι το anakinra αποτελεί τον ανθρώπινο ανασυνδυασμένο ανταγωνιστή του υποδοχεά της ιντερλευκίνης-1 (IL-1). Από τα αποτελέσματα της μελέτης κατέστη σαφές πως πρόκειται για ένα ασφαλές φαρμακευτικό σκεύασμα για ενδοφλέβια χρήση, καθώς δεν αναφέρθηκε αυξημένη θνητότητα στους βαρέως πάσχοντες ασθενείς, ούτε αυξημένη ευπάθεια σε δευτερογενείς λοιμώξεις. Ωστόσο, τα αποτελέσματα της μελέτης ήταν αρνητικά όταν ακολούθησε μία προγραμματισμένη ενδιάμεση ανάλυση [75]. Το 2016 όμως, δημοσιεύτηκε μία υπο-ανάλυση της προαναφερόμενης μελέτης, εκ της οποίας ανεδείχθη ότι μία υποομάδα 34 ασθενών παρουσίαζε κλινική εικόνα συμβατή με το σύνδρομο της ενεργοποίησης των μακροφάγων. Καθώς δεν είχε διενεργηθεί οστεομυελική βιοψία στους ασθενείς που είχαν λάβει μέρος στην μελέτη, το σύνδρομο ονομάστηκε, και αποκαλείται εφεξής, «Σύνδρομο ομοιάζον με το Σύνδρομο Ενεργοποίησης των Μακροφάγων (ΣΟΕΜ)», το οποίο, ως ακραία έκφανση του σηπτικού συνδρόμου, είναι μία επιπλοκή απειλητική για τη ζωή, με θνητότητα της τάξεως του 70% [21]. Από την υπο-ανάλυση όμως φάνηκε πως οι ασθενείς που έλαβαν το anakinra είχαν 30% μεγαλύτερη πιθανότητα επιβίωσης, σε σχέση με αυτούς που έλαβαν το εικονικό φάρμακο (placebo).

Αξίζει να αναφερθεί πως η Ελληνική Ομάδα Μελέτης της Σήψης (Hellenic Sepsis Study Group) αξιοποιώντας δεδομένα από μελέτες κοόρτης που είχαν συλλεχθεί επί 5.121 ασθενών, ανέδειξε πως ένα ποσοστό που κυμαίνεται μεταξύ 5-10% των ασθενών με σηπτική καταπληξία παρουσιάζουν επίσης το Σύνδρομο Ομοίαζον με Συνδρόμο Ενεργοποίησης των Μακροφάγων (ΣΟΕΜ) γνωστή και ως MALS (Macrophage Activation-Like Syndrome). Ο δείκτης που προτάθηκε για την διάγνωση του συνδρόμου με αξιοπιστία είναι η φερριτίνη. Συγκεκριμένα, οι συγκεντρώσεις της φερριτίνης στο αίμα των ασθενών με σηπτική καταπληξία ανώτερες του 4.420 ng/ ml έχουν διαγνωστική ειδικότητα της τάξης του 98% και αρνητική προγνωστική αξία ίση με 97.2%. Οι ασθενείς που βρίσκονται σε αυτή την υπερφλεγμονώδη κατάσταση έχουν υψηλό κίνδυνο θανάτου στις πρώτες δέκα ημέρες [17].

Η έτερη ακραία έκφανση του σηπτικού συνδρόμου είναι η κατάσταση της ανοσοπαράλυσης. Στην διάρκεια του σημαντικού αυτού κλινικού φαινομένου, τα κύτταρα του ανοσοποιητικού συστήματος ευρίσκονται σε μία κατάσταση εξουθένωσης , δεν εκκρίνουν πλέον προφλεγμονώδεις κυτταροκίνες, αλλά μεταβάλλουν την παραγωγή τους σε αντιφλεγμονώδεις κυτταροκίνες όπως είναι η ιντερλευκίνη-10 (IL-10) και έχουν πλέον απωλέσει σημαντικούς λειτουργικούς δείκτες όπως ο HLA-DR. Επισημαίνεται ότι, η αδυναμία αποκατάστασης της έκφρασης των HLA-DR υποδοχέων σε ποσοστό > 40%, συγκριτικά με μονοκύτταρα από υγιείς μάρτυρες, πέραν της έβδομης ημέρας εγκατάστασης της σήψης και η εμφάνιση δεύτερης μείωσης έκφρασης των HLA-DR μετά από την παρατηρηθείσα ανάκαμψη έχουν σχετιστεί με αυξημένη θνητότητα [44]. Σε άλλες έρευνες έχει φανεί ότι οι ασθενείς που έχουν σχετιζόμενη με την σήψη ανοσοπαράλυση, παρουσιάζουν 50% θνητότητα κατά τις επόμενες 28 ημέρες από την εκδήλωση της σήψης. Δεδομένα από προκλινικές μελέτες και από το μοντέλο ενδοτοξιναιμίας σε υγιείς εθελοντές, δείχνουν ότι η ανοσοπαράλυση που σχετίζεται με την σήψη δύναται να αναστραφεί με την χρήση της ανασυνδυασμένης ανθρώπινης ιντερφερόνης-γ (rhIFNγ) [76] . Αυτό επιβεβαιώθηκε και σε άλλη μελέτη με κλινικές δοκιμές, όπου η ανασυνδυασμένη ανθρώπινη ιντερφερόνη-γ που χορηγήθηκε σε εννέα ασθενείς με σηπτική καταπληξία πέτυχε την αναστροφή της ανοσοπαράλυσης [77]. Από τα παραπάνω φαίνεται ότι, ο πρώιμος θάνατος του ασθενούς με σηπτικό σύνδρομο μπορεί να είναι απότοκος της υπέρμετρης φλεγμονώδους απάντησης του οργανισμού, όμως ο όψιμος θάνατος μπορεί να σχετίζεται με μία καθυστερημένη αντι-φλεγμονώδη απόκριση. Οι δύο αυτές οντότητες , όπως αναδεικνύεται από τα μέχρι τώρα δεδομένα, πραγματοποιούνται

ταυτόχρονα στον οργανισμό του ξενιστή ως απόκριση στην εισβολή του παθογόνου παράγοντα.

Με την μελέτη PROVIDE [78], έγινε εφικτή η ταξινόμηση των ασθενών με σήψη σε τρείς μεγάλες κατηγορίες ανάλογα με την ανοσιακή τους απόκριση. Λαμβάνοντας υπόψη ότι, η ανάδειξη συγκεκριμένων τροποιήσεων στα μεταβολικά χαρακτηριστικά των ασθενών με σήψη θα μπορούσε να ανοίξει περαιτέρω τον δρόμο για την δημιουργία καλύτερων διαγνωστικών, προγνωστικών και θεραπευτικών στρατηγικών για το σηπτικό σύνδρομο, σκοπός της παρούσας υπομελέτης, ήταν η ανάδειξη της τροποίησης των μεταβολικών οδών στον σηπτικό ασθενή με βάση την ανοσιακή του κατάσταση. Για τον σκοπό αυτό χρησιμοποιήθηκαν δεδομένα από τους ασθενείς που ήδη είχαν ενταχθεί στην προαναφερόμενη μελέτη.

5. ΜΕΘΟΔΟΛΟΓΙΑ

5.1. Σχεδιασμός της μελέτης

Η μελέτη PROVIDE (Personalized Randomized trial Of Validation and restoration of Immune Dysfunction in severE infenctions and sepsis) ήταν μία προοπτική, διπλά τυφλή, τυχαιοποιημένη κλινική μελέτη που πραγματοποιήθηκε σε 14 κλινικά κέντρα της Ελλάδας (Εννέα Μονάδες Εντατικής Θεραπείας και πέντε τμήματα Παθολογικών Κλινικών) από τον Νοέμβριο του 2017 έως και τον Δεκέμβριο του 2019 [78]. Έλαβε κωδικό αναγνώρισης NCT03332225 κατά Clinicaltrials.gov και εγκρίθηκε από τον Εθνικό Οργανισμό Φαρμάκων (ΕΟΦ) της χώρας (IS 75-17/έγκριση με βάση τις διεθνείς συνθήκες). Επίσης, εγκρίθηκε από τα Επιστημονικά και Διοικητικά Συμβούλια των συμμετεχόντων νοσοκομείων (Πίνακας 1 του παραρτήματος που βρίσκεται στο τέλος της παρούσας διατριβής).

Η μελέτη διεξήχθη σύμφωνα με τις αρχές της Διακήρυξης του Ελσίνκι και της Ορθής Κλινικής Πράξης(Good Clinical Practice). Η τυχαιοποιημένη αυτή κλινική μελέτη αποσκοπούσε στην αξιολόγηση της στοχευμένης , προσωποποιημένης ανοσοθεραπείας, σε ασθενείς με σοβαρή σήψη και σηπτική καταπληξία, που ευρίσκονται είτε στο υπερφλεγμονώδες άκρο είτε στο υποφλεγμονώδες άκρο του φάσματος της ανοσιακής απόκρισης. Κατά την διάρκεια της διεξαγωγής της μελέτης, από μία υπο-ομάδα ασθενών ελήφθησαν δείγματα αίματος με σκοπό τον προσδιορισμό του μεταβολικού τους προφίλ ανάλογα με την κατάσταση της ανοσιακής τους απόκρισης.

Κριτήρια ένταξης στην μελέτη ήταν τα κάτωθι :

- Ηλικία μεγαλύτερη ή ίση των 18 ετών
- Συμμετοχή και των δύο φύλων. Όσον αφορά στις γυναίκες αναπαραγωγικής ηλικίας, κατά την διάρκεια της μελέτης θα έπρεπε να είναι πρόθυμες να χρησιμοποιήσουν διπλή αντισυλληπτική μέθοδο. Επιπλέον, προ της εισαγωγής στη μελέτη, υποχρεωτικά διενεργείτο τεστ κυήσεως ούρων προς αποκλεισμό κυήσεως.
- Έγγραφη συγκατάθεση από τον ασθενή ή από τον νόμιμο εκπρόσωπο του σε περίπτωση που ο ασθενής δεν ήταν δυνατό να συναινέσει .
- Πνευμονία της κοινότητας ή ενδονοσοκομειακή πνεμονία ή πνευμονία σχετιζόμενη με μηχανικό αερισμό ή πρωτοπαθής βακτηριαιμία ή οξεία χολαγγειίτιδα.
- Σήψη η οποία καθορίστηκε ως η συνολική αξιολόγηση της κατάστασης του ασθενούς με βαθμολογία 2 ή μεγαλύτερης του 2 σύμφωνα με την κλίμακα SOFA (πίνακας 1), ή μεταβολή κατά 2 ή περισσότερο από την συνολική βαθμολογία SOFA των ήδη νοσηλευόμενων ασθενών. Η σηπτική καταπληξία ορίστηκε ως η εμμένουσα υπόταση (με μέση αρτηριακή πίεση κάτω των 65 mm Hg) παρά την επαρκή χορήγηση ενδοφλεβίων υγρών , με τιμή γαλακτικού οξεός στο πλάσμα του ασθενούς μεγαλύτερη απο 2 mmol/L που καθιστά την ανάγκη , που καθιστά απαραίτητη την ανάγκη της χορήγησης αγγειοσυσπαστικών.

Αντίστοιχα, τα κριτήρια αποκλεισμού από την μελέτη ήταν τα εξής :

- Ηλικία μικρότερη των 18 ετών
- Μη παροχή έγγραφης συγκατάθεσης
- Άλλου τύπου λοιμώξεις πλην των προαναφερθέντων (οξεία πυελονεφρίτιδα ή ενδοκοιλιακή λοίμωξη διαφορετική από οξεία χολαγγειίτιδα, μηνιγγίτιδα ή λοίμωξη δέρματος και μαλακών μορίων. Σε περίπτωση που ο ασθενής έπασχε ταυτόχρονα από οξεία χολαγγειίτιδα και από οποιαδήποτε άλλη μορφή ενδοκοιλιακής λοίμωξης δεν μπορούσε να ενταχθεί στη μελέτη
- Κακοήθεια σταδίου IV
- Οποιαδήποτε περίπτωση ασθενούς , όπου έχει ληφθεί απόφαση να μην γίνει αναζωογόνηση
- Στην περίπτωση των βακτηριαιμιών, ασθενείς με καλλιέργειες αίματος όπου καλλιεργούνται στελέχη Staphylococcus κατα κοαγκουλάση αρνητικοί ή

μικρόβια συμβιωτικά του δέρματος ή ασθενείς με λοίμωξη σχετιζόμενη με κεντρικό καθετήρα.

- Ενεργός φυματίωση όπως ορίζεται από την συγχορήγηση φαρμάκων για την θεραπεία της
- Λοίμωξη από τον ιό της ανθρώπινης ανοσοανεπάρκειας (HIV)
- Λήψη από του στόματος ή ενδοφλεβίως , κορτικοειδών σε καθημερινή δόση ίση ή μεγαλύτερη από 0.4 mg/kg ισοδύναμου πρδενιζόνης για χρονικό διάστημα μεγαλύτερο των τελευταίων 15 ημερών
- Χορήγηση βιολογικής θεραπείας που στοχεύει έναντι των κυτταροκινών τον τελευταίο μήνα
- Ιατρικό ιστορικο Συστηματικού Ερυθηματώδους Λύκου (ΣΕΛ).
- Ιατρικό ιστορικό Πολλαπλής Σκλήρυνσης ή οποιασδήποτε άλλης απομυελινωτικής διαταραχής
- Εγκυμοσύνη ή γαλουχία.

Η πνευμονία της κοινότητας ορίστηκε ως η ύπαρξη νέου ή εξελισσόμενου διηθήματος στην απλή ακτινογραφία θώρακος και τουλάχιστον 2 κριτηρίων από τα παρακάτω [79]:

- Πρωτοεμφανιζόμενος ή επιδεινούμενος βήχας
- Δύσπνοια
- Ακροαστικά ευρήματα συμβατά με πνευμονική πύκνωση

Η ενδονοσοκομειακή πνευμονία ορίστηκε ως η έναρξη της >48 ώρες από την εισαγωγή του ασθενούς στο νοσοκομείο ΚΑΙ η ύπαρξη νέου ή εξελισσόμενου διηθήματος στην απλή ακτινογραφία θώρακος ΚΑΙ τουλάχιστον 2 κριτηρίων από τα παρακάτω[80] :

- Πρωτοεμφανιζόμενος ή επιδεινούμενος βήχας ή δύσπνοια
- Πυώδεις τραχειοβρογχικές εκκρίσεις
- Ακροαστικά ευρήματα συμβατά με πνευμονική πύκνωση

Η πνευμονία σχετιζόμενη με τον μηχανικό αερισμό ορίστηκε η έναρξη >48 ώρες από την έναρξη του μηχανικού αερισμού ΚΑΙ η ύπαρξη νέου ή εξελισσόμενου διηθήματος στην απλή ακτινογραφία θώρακος ΚΑΙ δύο τουλάχιστον από τα παρακάτω[81] :

- Πυώδεις τραχειοβρογχικές εκκρίσεις
- Ακροαστικά ευρήματα συμβατά με πνευμονική πύκνωση

Η οξεία χολαγγειίτιδα ορίστηκε ως η παρουσία άλγους στο δεξιό άνω τεταρτημόριο ΚΑΙ πυρετός (θερμοκρασία τυμπάνου ωτός ή στόματος ≥380 , ορθού ≥ 38.30) [82]

Η πρωτοπαθής βακτηριαιμία ορίστηκε ως η παρουσία μιας τουλάχιστον θετικής καλλιέργειας αίματος ΚΑΙ η αδυναμία εντοπισμού της εστίας πρωτοπαθούς λοίμωξης παρά την διεξοδική κλινική και ακτινολογική εξέταση [82].

Η σηπτική καταπληξία με βάση τα κριτήρια κατά Sepsis-3 [1], ορίζεται ως η συνολική βαθμολογία SOFA ίση ή μεγαλύτερη με 2 για ασθενείς που εισάγονται με λοίμωξη από το τμήμα των επειγόντων περιστατικών Ή η αύξηση της συνολικής βαθμολογίας κατά 2 ή περισσότερες μονάδες σε σχέση με την εισαγωγή , για τους νοσηλευόμενους ασθενείς ΚΑΙ όλα τα παρακάτω :

- Μέση Αρτηριακή Πίεση χαμηλότερη από τα 65 mm Hg
- Θεραπεία με νοραδρεναλίνη ή άλλο αγγειοσυσπαστικό
- Γαλακτικό πλάσματος μεγαλύτερο του 2 mmol/l

Η μελέτη PROVIDE περιλάμβανε δύο στάδια: το στάδιο της διαλογής/παρακολούθησης (screening/observation) και το στάδιο της παρέμβασης (intervention). Κατά το στάδιο της διαλογής/παρακολούθησης υπήρχε μία καθημερινή καταγραφή των ακολούθων μεταβλητών: τύπος λοίμωξης, συν-νοσηρότητες, ολική μέτρηση κυττάρων αίματος, εξετάσεις πηκτικότητας, νεφρική και ηπατική λειτουργία, αρτηριακά αέρια αίματος, μικροβιολογικές εξετάσεις (αποτελέσματα καλλιεργειών αίματος, ούρων και τραχειοβρογχικών εκκρίσεων), απεικονιστικές εξετάσεις και συνολική επιβίωση. Κατά το πρώτο 24ωρο της ένταξης στην μελέτη, από τον ασθενή που πληροί τα κριτήρια, συλλέγονταν 10 ml αίματος από περιφερική φλέβα υπό άσηπτες συνθήκες. Αυτή χαρακτηρίσθηκε ως ημέρα 1. Το αίμα διαμοιράστηκε σε 3 φιαλίδια, σε ένα σωληνάριο PAXgene ή RNAlater το οποίο χρησιμοποιήθηκε για μεταγραφική ανάλυση, σε ένα σωληνάριο το οποίο δεν περιείχε πυρετογόνα και αντιπηκτικά υλικά και σε ένα φιαλίδιο επικαλυμμένο με EDTA, το οποίο περιείχε συντηρητικό κατάλληλο για την διενέργεια κυτταρομετρίας ροής. Το πρώτο σωληνάριο φυγοκεντρήθηκε στα 800 g σε θερμοκρασία δωματίου και ο υπερκείμενος ορός συλλέχθηκε και αποθηκεύτηκε στους 4-8° C. Η ίδια διαδικασία επαναλαμβανόταν μετά από 24 ώρες (ημέρα 2), ωστόσο δεν λαμβανόταν δείγμα αίματος προορισμένο για μεταγραφική ανάλυση. Κατόπιν, τα δείγματα ορού και τα σωληνάρια που περιείχαν ολικό αίμα για κυτταρομετρία ροής μεταφέρονταν μέσω ταχυδρομείου αυθημερόν στο κεντρικό εργαστήριο, το οποίο ήταν το Ερευνητικό

Εργαστήριο Ανοσολογίας των Λοιμώξεων της Δ'Παθολογικής Κλινικής του Πανεπιστημιακού Νοσοκομείου «Αττικόν».

Κατά την άφιξη των δειγμάτων στο εργαστήριο, πραγματοποιούνταν μέτρηση της τιμής της φερριτίνης στον ορό μέσω ανοσοενζυμικής μεθόδου (ORGENTEC Diagnostika GmbH, Mainz, Γερμανία) με χαμηλότερο όριο ανίχνευσης τα 75 ng/mL. Χρησιμοποιώντας το ολικό αίμα από το φιαλίδιο που περιείχε EDTA, τα λευκά αιμοσφαίρια επωάζονταν για 15 λεπτά στο σκοτάδι με τα ακόλουθα μονοκλωνικά αντισώματα: anti-CD14 FITC(fluorescein isothiocyanate- ισοθειακυνική φλουορεσκε'ί'νη), anti-HLA-DR-PE , anti-CD45 PC5 (Immunotech, Marseille , Γαλλία) και Quantibrite HLA-DR /έναντι-μονοκυττάρων PerCP-Cy5 (Becton Dickinson , Cockeysville Md). Μετά από την επώαση αυτή, τα κύτταρα αναλύονταν με το κυτταρόμετρο ροής FC500 έναντι κυττάρων χρωματισμένων με αντι-CD45 PC5 και αντι-ιδιοτυπικό IgG1. Τα HLA-DR μόρια στα CD14/CD15 μονοκύτταρα εκφράζονταν ως ποσοστό των θετικά χρωματισμένων κυττάρων και ως ο αριθμός των μορίων ανά κύτταρο.

Το Σύνδρομο ομοιάζον-με Σύνδρομο Ενεργοποίησης Μακροφάγων (MALS-Macrophage Activation Like Syndrome) καθορίστηκε ως η τιμή φερριτίνης μεγαλύτερη από 4420 ng/mL στα δείγματα αίματος και των δύο ημερών ή στο δείγμα της ημέρας 2, ανεξαρτήτως των αποτελεσμάτων της κυτταρομετρία ροής [17]. Η σχετιζόμενη με την σήψη ανοσοπαράλυση διαγνώσθηκε ως η μικρότερη από 30% έκφραση των HLA-DR/CD14/CD45 στα δείγματα και των δύο ημερών ή στο δείγμα της ημέρας 2 με δεδομένο όμως ότι η τιμή της συγκέντρωσης της φερριτίνης ήταν μικρότερη ή ίση του 4420 ng/ml. [83] . Οι ασθενείς που δεν πληρούσαν τα κριτήρια για την κατάταξη τους στο MALS ή στην σχετιζόμενη με την σήψη ανοσοπαράλυση, χαρακτηρίσθηκαν ως αταξινόμητοι ή ασθενείς που ανήκουν σε μία ενδιάμεση κατάσταση του φάσματος αυτού (unclassified/intermediate state).

Τα δείγματα πλάσματος που συλλέχθηκαν παρέμειναν σε ψυγείο στους -80^0 C χωρίς να υποβληθούν σε κανέναν κύκλο κατάψυξης-απόψυξης και σε κατάλληλο δίσκο προκειμένου να αποφευχθεί η απώλεια. Τα δείγματα μεταφέρθηκαν σε ξηρό πάγο για τις αναλύσεις των μεταβολιτών χρησιμοποιώντας μια ποιοτική μη στοχευμένη προσέγγιση μεταβολομικής.

Επιπροσθέτως, τα μονοπύρηνα κύτταρα του ληφθέντος περιφερικού αίματος απομονώθηκαν από κάθε φιαλίδιο που περιείχε EDTA, υπέστησαν διαχωρισμό κατόπιν φυγοκέντρησης του αίματος ύπερθεν φικόλης (Ficoll-Hypaque). Στη συνέχεια

ακολούθησαν 3 εκπλύσεις με παγωμένο διάλυμα PBS pH 7.2 (αλατούχο διάλυμα ρυθμισμένο με φωσφορικά, με pH 7.2). Τα μονοπύρηνα του περιφερικού αίματος μετρήθηκαν χρησιμοποιώντας πλάκα τύπου Neubauer με αποκλεισμό των νεκρών κυττάρων με χρήση διαλύματος trypan blue και κατανεμήθηκαν σε πλάκα 96 κυψελών σε τελικό όγκο 200 μL και πυκνότητα 2.5 x 106/mL. Εν συνεχεία, τα μονοκύτταρα περιφερικού αίματος, επωάστηκαν σε RPMI 1640 (SigmaAldrich, Berlin, Γερμανία) εμπλουτισμένο με 2 mM L-γλουταμίνης , 100 U/mL πενικιλλίνης G, 0.1 mg/ml στρεπτομυκίνης παρουσία/απουσία 10ng/mL λιπολυσακχαρίδης(LPS) του Escherichia Coli O55:B5 ή 5 ng/mL φυτοαιμαγλουτινίνης (PHA). Αφού ακολουθούσε επώαση για 48 ώρες στους 370 και σε 5% CO2 , τα υπερκείμενα τμήματα συλλέγονταν προκειμένου να μετρηθεί η συγκέντρωση του παράγοντα νέκρωσης όγκου άλφα, ο TNF-α. Ο συγκεκριμένος παράγοντας μετρήθηκε εις διπλούν χρησιμοποιώντας μία ανοσοενζυμική μέθοδο (Invitrogen Waltham, Massachussetts) με χαμηλότερο όριο ανίχνευσης τα 20 pg/mL.

Οι ασθενείς που έπασχαν από σηπτική καταπληξία και σύνδρομο ομοιάζον με Σύνδρομο Ενεργοποίησης των Μακροφάγων (MALS) ή ανοσοπαράλυση σχετιζόμενη με τη σήψη, επιτρεπόταν να συμμετέχουν στο δεύτερο στάδιο της μελέτης, δηλαδή στο στάδιο της παρέμβασης. Ακολούθησε τυχαιοποίηση σε επικουρική θεραπεία, είτε με στοχευμένη ανοσοθεραπεία, είτε με εικονικό φάρμακο (placebo). Οι ασθενείς που ταξινομήθηκαν στο MALS, τυχαιοποιούνταν στο να λάβουν anakinra (Kineret, Swedish Orphan Biovitrum, Αθήνα). Η δοσολογία του φαρμάκου ήταν 200 mg ενδοφλεβίως (IV) σε 20 mL φυσιολογικού ορού κάθε οκτώ ώρες για επτά ημέρες και εικονικό φάρμακο που αποτελούνταν από 0.5 mL φυσιολογικού ορού 0.9% υποδορίως κάθε 48 ώρες για 15 ημέρες. Σε περίπτωση ταξινόμησης του ασθενούς στην κατηγορία της ανοσοπαράλυσης, τότε χορηγούνταν 20 mL φυσιολογικού ορού 0.9% ενδοφλεβίως κάθε οκτώ ώρες για επτά ημέρες ή 100μg ανθρώπινης ανασυνδυασμένης ιντερφερόνης γ (rhIFNγ) (Immukine, Boehringer Ingelheim, Αθήνα) σε 0.5 mL υποδορίως κάθε 48 ώρες για 15 ημέρες.

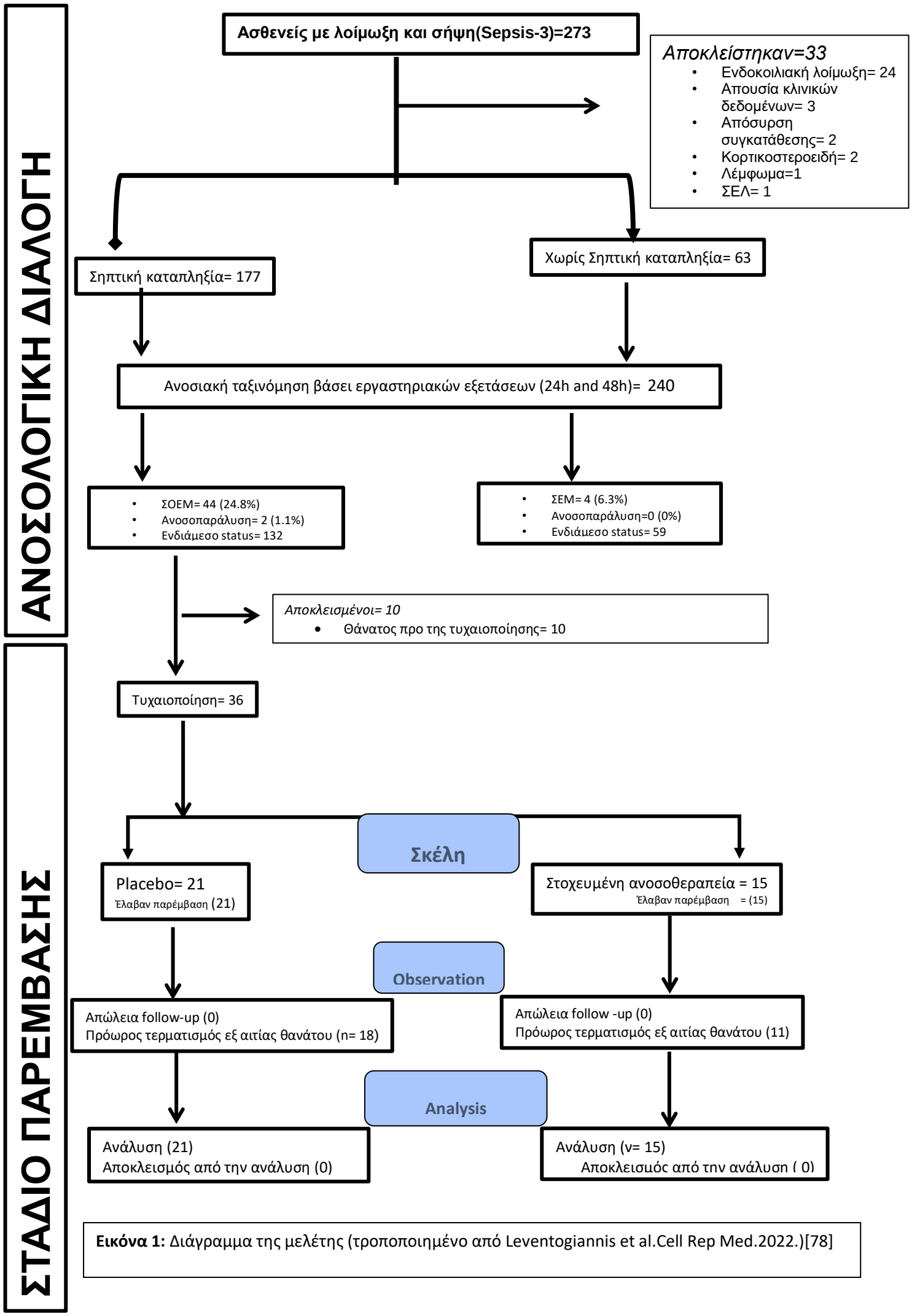
Όσοι ασθενείς τυχαιοποιούνταν στο σκέλος του εικονικού φαρμάκου, ελάμβαναν φυσιολογικό ορό 0.9% ενδοφλεβίως και υποδορίως όπως περιγράφηκε ήδη από τα ανωτέρω. Σε περίπτωση επηρεασμένης νεφρικής λειτουργίας (κάθαρση κρεατινίνης <30mL/min) η αναφερόμενη δόση του anakinra τροποποποιήθηκε σε 100mg κάθε 8 ώρες. Τα ανεπιθύμητα συμβάματα καταγράφονταν καθημερινά. Μία ξεχωριστή ακολουθία διαλογής υποβοηθούμενη από ηλεκτρονικό υπολογιστή,

προετοιμάστηκε για κάθε κλινικό κέντρο μελέτης και η προετοιμασία του φαρμάκου μελέτης γινόταν από μη-τυφλό παρασκευαστή φαρμάκων. Να σημειωθεί, επιπλέον, πως δείγματα αίματος πραγματοποιούνταν για την μέτρηση της τιμής της φερριτίνης και της έκφρασης των HLA-DR/CD14/CD45 πριν από την έναρξη του φαρμάκου μελέτης καθώς και τις ημέρες τέσσερα (4) και επτά (7).

Καταληκτικό σημείο του σταδίου διαλογής /παρατήρησης ήταν η συσχέτιση του ανοσολογικού ενδότυπου με την επιβίωση των 28 ημερών. Το πρωτογενές καταληκτικό σημείο του σταδίου παρέμβασης ήταν η επίδραση της στοχευμένης ανοσοθεραπείας στην θνητότητα των 28 ημερών. Δευτερογενή καταληκτικά σημεία ήταν: η θνητότητα στις 90 ημέρες, οι δευτερογενείς λοιμώξεις, και η καταλληλότητα της ανοσιακής ταξινόμησης χρησιμοποιώντας το σύνολο των ασθενών για τους οποίους έγινε διαλογή από το αρχικό στάδιο. Διερευνητικό καταληκτικό σημείο ήταν η επιβίωση με την μείωση της βαθμολογίας SOFA κατά την λήξη της θεραπείας. Χρησιμοποιώντας την υπόθεση ότι η ανοσοθεραπεία θα μπορούσε να μειώσει την θνητότητα στο MALS από 60% σε 35% και την θνητότητα της ανοσοπαράλυσης απο 50% σε 35% , υπολογίστηκε ότι 278 ασθενείς πρέπει να ενταχθούν προκειμένου να αποδειχτούν αυτές οι μεταβολές με 80% δύναμη στο επίπεδο σημασίας 10%.

Η μελέτη PROVIDE κατέδειξε πως κάθε κατηγορία ανοσολογικής ταξινόμησης συνδέθηκε με διαφορετικό αποτέλεσμα, όσον αφορά στην επιβίωση των ασθενών. Ειδικότερα, η θνητότητα των 28 ημερών ήταν σημαντικά υψηλότερη στην κατηγορία του MALS, σχεδόν 79.1%, ενώ στην κατηγορία της ανοσοπαράλυσης και της αταξινόμητης/ενδιάμεσης κατάστασης ήταν 66.9% και 41.6% αντίστοιχα. Στην εικόνα 1, παρουσιάζεται το διάγραμμα ροής της μελέτης.

Να σημειωθεί ότι σε μία υποομάδα των ασθενών της μελέτης, προβήκαμε σε σύγκριση των μεταβολικών χαρακτηριστικών των ασθενών με σήψη, με στόχο την ανεύρεση τυχόν διαφορών ανάμεσα στις τρείς κατηγορίες της ανοσιακής ταξινόμησης: Το Σύνδρομο ομοιάζον με Σύνδρομο Ενεργοποίησης των Μακροφάγων , την σχετιζόμενη με την σήψη ανοσοπαράλυση και την αταξινόμητη ομάδα. Επιπλέον, μέσα από την ανάλυση μας, διερευνούσαμε εάν κάποιοι από τους μεταβολίτες αυτούς θα μπορούσαν να αποτελέσουν βιοδείκτες της ανοσολογικής ταξινόμησης. Από τους 240 ασθενείς που εν τέλει εντάχθηκαν στη μελέτη PROVIDE , διαθέσιμα στοιχεία για το μεταβολικό προφίλ είχαμε για τους 210.



Εικόνα 1: Διάγραμμα της μελέτης (τροποποιημένο από Leventogiannis et al.Cell Rep Med.2022.)[78]

5.2. Μη στοχευμένη προσέγγιση μεταβολομικης (untargeted metabolomics)

Τα δείγματα πλάσματος αποψύχθηκαν και πραγματοποιήθηκε εξαγωγή των μεταβολιτών με 80% διάλυμα μεθανόλης σε θερμοκρασία δωματίου. Οι μετρήσεις των μεταβολιτών και ο σχολιασμός τους πραγματοποιήθηκε από την General Metabolomics (Βοστόνη, ΗΠΑ). Οι μεταβολίτες μετρήθηκαν όπως περιγράφεται από την ομάδα του Fuhrer [83], με την ανάλυση έγχυσης ροής (FIA-TOMS) της Σειράς Agilent 1100 υγρής χρωματογραφίας, συνδεδεμένο με όργανο αυτόματης δειγματοληψίας Gerstel MPS2 και ένα φασματόμετρο μάζας Agilent 6550 iFunnel LC-MS Q-TOF (Agilent, Santa Clara, California) παράλληλα με όργανο αυτόματης δειγματοληψίας MPS3 (Gerstel,Linthicum, MD, ΗΠΑ) και με τεταρτοταγή αντλία Agilent 1260 Infinity II εξοπλισμένη με πηγή ηλεκτροψεκασμού λειτουργική σε αρνητική φάση. Δύο αντίγραφα υπεβλήθησαν σε επεξεργασία για κάθε δείγμα, τα δείγματα τυχαιοποιήθηκαν, αναλύθηκαν και κατέστησαν τυφλά ως προς την κατάσταση της ανοσιακής ταξινόμησης του ασθενούς από τον οποίο προέρχονταν.

Τα φάσματα μάζας καταγράφηκαν με τον λόγο μάζα/φορτίο ιόντος (m/z) από 50 έως 1050 χρησιμοποιώντας την υψηλότερη αναλυτική δύναμη (4GHz HiRes) . Όλα τα βήματα για την επεξεργασία των δεδομένων από την φασματομετρία μάζας πραγματοποιήθηκαν με την πλατφόρμα υπολογιστικής επεξεργασίας δεδομένων MATLAB (The Mathworks, Natick) κατά τα πρότυπα της ομάδας του Furher[84] που περιέγραψε την εγκαθίδρυση μίας ταχείας, εύρωστης και ακριβής για την δημιουργία του σφαιρικού μεταβολικού προφίλ των βιολογικών παραγώγων και προιόντων εξαγωγής από την έγχυση ροής: την TOF-MS (time-of-flight mass spectrometry). Να σημειωθεί ότι η υψηλή ανάλυση και η μαζική ακρίβεια της μεθόδου μπορεί να αυξήσει τον διαχωρισμό των ιόντων και την ακρίβεια στην ταυτοποίηση των μεταβολιτών. Λαμβάνοντας αυτό υπόψη, γίνεται κατανοητό ότι μία τέτοια μεθοδολογία είναι η πλέον κατάλληλη για την αρχική μη-στοχευμένη προσέγγιση της διαλογής του μεταβολόματος όταν υπάρχει ανάγκη για ταχεία ανάλυση χιλιάδων δειγμάτων. Τυπικά, μπορεί να καλύπτει 200-300 μεταβολίτες (συμπεριλαμβανομένων και των τμημάτων ενώσεων και πάνω από 1000 άγνωστα ιόντα) σε αρνητική φάση, το οποίο αποδεικνύεται άριστο σε απόδοση, με δεδομένο ότι όλοι οι μεταβολίτες δεν αναμένεται να είναι σε αφθονία. Ωστόσο, λόγω της ευαισθησίας του οργάνου, η πλατφόρμα μπορεί να είναι μεροληπτική στο να ανιχνεύει αύξηση μεταβολιτών παρά την μείωση τους. Παρά τον έμφυτο περιορισμό της ανάλυσης της έγχυσης ροής, στο

να διακρίνει και να αναγνωρίζει τα ισομερή, το σύστημα υποδεικνύει ποιες μεταβολικές διαδικασίες ήταν επηρεασμένες από την διαταραχή και έτσι συμβάλλει στον λογικό σχεδιασμό της χαμηλής απόδοσης παρακολούθησης, ή της επικύρωσης της στοχευμένης προσέγγισης της μεταβολομικής.

Εν συντομία, το προφίλ των δεδομένων συλλέχθηκε σε ένα σύνολο. Ακολούθησε η κατανομή τους σε στήλες και η ενοποίηση τους σε μία μήτρα μονήρους χαρακτηριστικού. Τα σήματα πυκνότητας ομαλοποιήθηκαν χρησιμοποιώντας μία μέθοδο ομαλοποίησης/κανονικοποίησης, ολικής Καταμέτρησης ιόντων, κατά την οποία κάθε μεταβολίτης σε ένα δείγμα διαχωρίζεται από τον ολικό αριθμό ιόντων που παρατηρούνται σε αυτό [85]. Στη συνέχεια, έγινε ο υπολογισμός, με τον συσχετισμό Pearson, ανάμεσα στα τεχνικά αντίγραφα/επαναλήψεων. Διαπιστώθηκε ότι όλοι οι συντελεστές συσχέτισης ήταν πάνω απο 0.99. Οι τεχνικές επαναλήψεις υπολογίστηκαν κατά μέσο όρο και εφαρμόστηκε λογαριθμικός μετασχηματισμός. Η μη στοχευμένη μεταβολομική μεθοδολογία είναι ποιοτική και μόνο οι σχετικές ποσότητες των μεταβολιτών είναι διαθέσιμες.

Συνολικά, καταμετρήθηκαν 1394 ιόντα. Για την αρχική ανάλυση μεταβολιτών, οι φερόμενες ταυτότητες μεταβολιτών με απώλεια πρωτονίων αντιστοιχήθηκαν σε 1394 ιόντα, βασισμένα στις ακριβείς μάζες και στα μοτίβα ισότοπων υπολογισμένα στα τμήματα που περιλήφθηκαν στις βάσεις δεδομένων HMDB (Human Metabolome DataBase/Βάση Δεδομένων Ανθρώπινου Μεταβολόματος) και στην Εγκυκλοπαίδεια του Κιότο (KEGG Kyoto Encyclopedia of Genes and Genomes) για τα γονίδια και τα γονιδιώματα [86] (τα ευρήματα παρουσιάζονται αναλυτικά στον Πίνακα 2 του Παραρτήματος, στο τέλος της παρούσας διατριβής). Η συγκεκριμένη βάση χρησιμοποιείται ευρύτατα και αποτελεί μια από τις πιο ολοκληρωμένες βιβλιοθήκες μεταβολιτών (> 17000 μεταβολίτες διαφόρων ειδών) και περιλαμβάνει 495 μεταβολικές οδούς από μια ποικιλία οργανισμών (> 4700). Τα αποτελέσματα της παρούσας μελέτης από τα ομαλοποιημένα/κανονικοποιημένα δεδομένα παρουσιάζονται στον πίνακα 3 του Παραρτήματος, στο τέλος της παρούσας διατριβής.

5.3. Στατιστική ανάλυση

Διενεργήθηκε διαφορική ανάλυση αφθονίας/πληθωρικότητας (differential abundance analysis) χρησιμοποιώντας το λογισμικό επεξεργασίας δεδομένων R package limma [87] , εφαρμόζοντας ένα γραμμικό μοντέλο προς διόρθωση του

φύλου και της ηλικίας. Το limma είναι ουσιαστικά ένα πακέτο λογισμικού που παρέχει μία ολοκληρωμένη λύση για την ανάλυση δεδομένων που προέρχονται από τα πειράματα έκφρασης γονιδίων. Περιέχει άφθονα χαρακτηριστικά και εργαλεία για την διαχείριση σύνθετων πειραματικών σχεδιασμών και για την αποκόμιση πληροφορίας προκειμένου να ξεπεραστούν τα προβλήματα αναφορικά με τα μικρού μεγέθους δείγματα.

Κατά τη διάρκεια των τελευταίων δύο δεκαετιών, το λογισμικό limma έχει καταφέρει να γίνει πολύ δημοφιλές για την ανακάλυψη γονιδίων μέσω διαφορικών αναλύσεων έκφρασης μικροσυστοιχιών και δεδομένων που προέρχονται από υψηλής απόδοσης PCR. Αυτό το λογισμικό προσφέρει μια ευέλικτη πλατφόρμα για την ανάγνωση, την ομαλοποίηση και την εξερεύνηση των δεδομένων. Επιπλέον, παρέχει αξιοσημείωτα πλεονεκτήματα σε δύο κατευθύνσεις, καθώς μπορεί να χρησιμοποιηθεί, τόσο για την διαφορική έκφραση και ανάλυση της συναρμογής RNA (RNA-seq), όσο και για την παραδοσιακή ανάλυση γονιδιακής έκφρασης, εξετάζοντας προφίλ έκφρασης και υπογραφές έκφρασης [87].

Στην παρούσα, τα αποτελέσματα από την διαφορική ανάλυση αφθονίας/πληθωρικότητας διορθώθηκαν προς πολλαπλή εξέταση χρησιμοποιώντας την μέθοδο Benjamini-Hochberg. Η προσαρμοσμένη τιμή του P κατώτερη του 0.05 θεωρήθηκε στατιστικά σημαντική.

5.4. Ανάλυση εμπλουτισμού βιοχημικου μονοπατιου (pathway enrichment analysis)

Η ανάλυση εμπλουτισμού βιοχημικού μονοπατιού, δηλαδή τα μεταβολικά μονοπάτια που αναδείχθηκαν ως εμπλεκόμενα βάσει των σημαντικών μεταβολιτών που ανιχνεύθηκαν, πραγματοποιήθηκε με την διαδικτυακή πλατφόρμα Metaboanalyst (έκδοση 5.0) [88], χρησιμοποιώντας την μονάδα μέτρησης «Αιχμών σε Μονοπάτια της φασματομετρίας μάζας» (MS Peaks to Pathways έκδοση 1). Η πλατφόρμα Metaboanalyst στοχεύει στην μείωση του χάσματος που διαχωρίζει τα ακατέργαστα δεδομένα από τις λειτουργικές πληροφορίες για την καθολική μεταβολομική που βασίζεται στην φασματομετρία μάζας υψηλής ανάλυσης. Τα χαρακτηριστικά του λόγου μάζας/φορτίου ιόντων, η προσαρμοσμένη στατιστική σημαντικότητα (P-value), και τα t-scores που προέκυψαν από την διαφορική ανάλυση της πληθωρικότητας των μεταβολιτών. Οι αρχικές παράμετροι ορίστηκαν ως εξής: η αρνητική ιοντική κατάσταση, η ανοχή της μάζας που καθορίστηκε στην

περιοχή των 5 ppm, ο χρόνος κατακράτησης που ορίστηκε ως μη παρών, η βαθμονόμηση από την στατιστική σημαντικότητα, ενώ επιλέχθηκε η Επιβολή Πρωτογενών Ιόντων.

Η μονάδα μέτρησης MS Peaks to Pathways ενσωμάτωσε τους λογαρίθμους Mummichog (έκδοση 1) [89] και GSEA [90]. Ο αλγόριθμος Mummichog χρησιμοποιεί μεταβολικά δίκτυα προκειμένου να προλογήσει την λειτουργική δραστηριότητα και την επισημείωση των μεταβολιτών και κατόπιν πραγματοποιεί τον εμπλουτισμό των βιοχημικών μονοπατιών βασισμένα στην σημασία των αποτελεσμάτων (προσαρμοσμενη στατιστική σημαντικότητα/P-value). Ο λογάριθμος Mummichog αναπτύχθηκε προκειμένου να ερμηνεύσει την δραστηριότητα των βιοχημικών μονοπατιών απευθείας από τις κορυφές της μη στοχευμένης μεταβολομικής προσέγγισης που αναδεικνύονται από την υγρή χρωματογραφία- φασματομετρία μάζας (LC-MS). Οι διεθνείς οδηγίες για την χρήση της ανάλυσης Mummichog είναι η αξιοποίηση των κορυφαίων 10% από τις σημαντικότερες κορυφές. Αυτό χρησιμοποιήθηκε για την ανάλυση της σύγκρισης των ασθενών με MALS και εκείνων της ενδιάμεσης/αταξινόμητης ανοσιακής κατάστασης. Για τις άλλες δύο αναλύσεις, έγινε επιλογή όλων των σημαντικών αιχμών εξ αιτίας του μικρού αριθμού των σημαντικών μεταβολιτών.

Ο αλγόριθμος GSEA (Gene Set Enrichment Analysis) χρησιμοποιεί την διαφορά στις συγκεντρώσεις των μεταβολιτών ανάμεσα σε δύο ομάδες (t score) προκειμένου να αναγνωριστούν τα εμπλουτισμένα μονοπάτια. Προχωρήσαμε σε μία συνδυασμένη ανάλυση , η οποία αξιοποίησε και τους δύο αλγορίθμους και χρησιμοποίησε την βιβλιοθήκη Homo Sapiens (MFN) [89].

Η ανάλυση περιορίστηκε σε σειρές μονοπατιών/ μεταβολιτών περιλαμβάνοντας τουλάχιστον τρεις εισαγωγές. Για την ανάλυση που πραγματοποιήθηκε για την σύγκριση των ασθενών που ανήκουν στην ομάδα του Συνδρόμου ομοιάζοντος με Συνδρόμου Ενεργοποίησης των Μακροφάγων (MALS) και των ασθενών που ανήκουν στην ενδιάμεση /αταξινόμητη ομάδα (intermediate/unclassified), το όριο της στατιστικής σημαντικότητας για την επεξεργασία με τον αλγόριθμο Mummichog, ετέθη στο 10% των σημαντικών κορυφών. Παράλληλα, περιορίστηκε για τους σημαντικούς μεταβολίτες (προσαρμοσμένη στατιστική σημαντικότητα /P-value < 0.05) στην σύγκριση των ασθενών με MALS και εκείνων με ανοσπαράλυση σχετιζόμενη με την σήψη. Το Meta P-value προήλθε από την μετά-ανάλυση των

αποτελεσμάτων από τους δύο αλγόριθμους και των μονοπατιών που σημειώθηκαν ως στατιστικά σημαντικά, όταν το Meta P-value ήταν κατώτερο του 0.05.

Τέλος, για την ανάλυση των βιοχημικών μονοπατιών, συμπεριλήφθησαν όλοι οι μεταβολίτες, λαμβάνοντας υπόψιν αυτούς άνωθεν του καθορισμένου ως σημαντικού κατωφλιού για υπόβαθρο.

6. ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

Στην προοπτική κλινική μελέτη PROVIDE [78], εντάχθηκαν συνολικά 240 ασθενείς. Το διάγραμμα ροής της εν λόγω μελέτης παρουσιάστηκε παραπάνω στην Εικόνα 1. Στην παρούσα υπο-μελέτη, αξιοποιήθηκαν δεδομένα που προέρχονται από 210 ασθενείς (από τους συνολικά 240). Τα δεδομένα χρησιμοποιήθηκαν για την διενέργεια της μεταβολομικής ανάλυσης των τρίων κατηγοριών ανοσιακής ενεργοποίησης στη σήψη. Στον πίνακα 2 που ακολουθεί παρουσιάζονται τα δημογραφικά και τα κύρια χαρακτηριστικά των ασθενών αυτών.

Πίνακας 2: Δημογραφικά στοιχεία ασθενών που αναλύθηκαν στην παρούσα υπο-μελέτη

Δημογραφικά	Σύνδρομο ομοιάζον με Σύνδρομο ενεργοποίησης μακροφάγων (ΣΟΕΜ)	Ανοσοπαράλυση σχετιζόμενη με τη σήψη	Αταξινόμητοι	p-value*
Αριθμός ασθενών	45	95	70	0.783
Φύλο n	26 (57.8)	58 (61.1)	39 (55.7)	0.337
Ηλικία, τ.α	71.0 (14.5)	74.1 (12.9)	71.0 (17.3)	<0.0001
APACHE II, τ.α.	28.9 (9.2)#, ##	24.7 (8.2)###	19.8 (8.3)	<0.0001
SOFA, τ.α.	13.67 (3.51)#, **	10.92 (3.72)###	8.83 (3.81)	0.663
CCI, τ.α.	4.87 (2.21)	5.13 (2.36)	4.81 (2.37)	<0.0001
Σηπτική καταπληξία n	41 (91.1) #	73 (76.8) ###	39 (55.7)	0.783

Λοίμωξη				
Οξεία χολαγγειίτιδα	5 (7.1)	4 (4.5)	9 (11.6)	0.840
Πρωτοπαθής βακτηριαιμία	9 (20.0)	14 (14.7)	10 (14.3)	0.670
Πνευμονία της κοινότητας	17 (37.8)	43 (45.3)	33 (47.1)	0.594
Νοσοκομειακή πνευμονία	15 (33.3)	18 (18.9)	12 (17.1)	0.086
Πνευμονία που συνδέεται με τον μηχανικό αερισμό	5 (11.1)	13 (13.7)	6 (8.6)	0.593
Θνητότητα 28 ημερών	37 (82.2) #, $	61 (64.2)#	26 (37.1)	<0.0001

** Οι συγκρίσεις γίνονται με μονόδρομη ανάλυση της διακύμανσης για ποσοτικές μεταβλητές και με δοκιμή Chi-square για ποιοτικές μεταβλητές. Πολλαπλές συγκρίσεις μεταξύ των ομάδων έγιναν με δοκιμή Bonferroni όταν η συνολική τιμή p είναι μικρότερη από 0,05.*

**p<0.0001 έναντι μη ταξινομημένων. ##p: 0,021 έναντι ανοσοπαράλυσης που προκαλείται από σήψη. ###p: 0,002 έναντι μη ταξινομημένων;*

***p: 0,021 έναντι ανοσοπαράλυσης που προκαλείται από σήψη.*

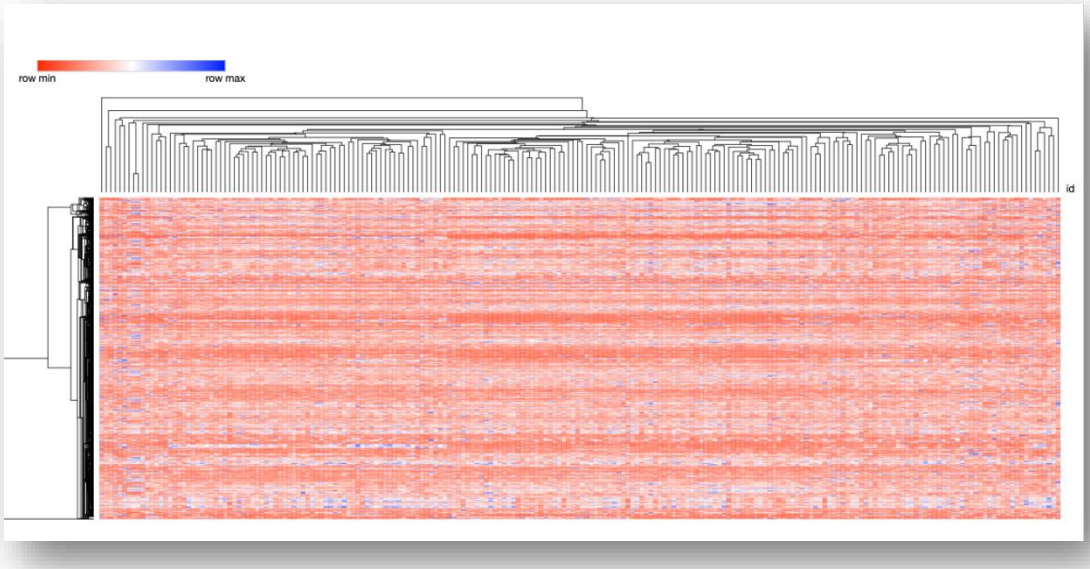
**p: 0,032 έναντι ανοσοπαράλυσης που προκαλείται από σήψη*

*Συντομογραφίες: **APACHE**: οξεία φυσιολογία και αξιολόγηση χρόνιας υγείας. **CCI**: Δείκτης συννοσηρότητας του Charlson. **n**: αριθμός ασθενών, **τ.α**: τυπική απόκλιση, **SOFA**: διαδοχική αξιολόγηση ανεπάρκειας οργάνων*

Από τους 210 συμμετέχοντες ασθενείς, οι 45 ταξινομήθηκαν στο Σύνδρομο ομοιάζον με Σύνδρομο Ενεργοποίησης των Μακροφάγων (MALS), 95 στην σχετιζόμενη με την σήψη ανοσοπαράλυση(sepsis-induced immunoparalysis) και 70 δεν πληρούσαν τα κριτήρια για τις προαναφερθείσες ομάδες, συνεπώς χαρακτηρίσθηκαν ως αταξινόμητοι ή ανήκοντες σε ενδιάμεση κατάσταση ανοσιακής ενεργοποίησης(unclassified or intermediate state). Είναι σημαντικό να αναφερθεί, πως η θνητότητα των 28 ημερών ήταν σημαντικά υψηλότερη στους ασθενείς του

MALS, καθώς υπολογίστηκε στο 82.2% και χαμηλότερη στις άλλες δύο κατηγορίες. Ειδικότερα, η θνητότητα των 28 ημερών ήταν 64.2% στους ασθενείς με την ανοσοπαράλυση και 37.1% στην ενδιάμεση κατάσταση.

Αρχικά, διενεργήθη μία μη-επιβλεπόμενη ιεραρχική συσταδοποίηση προκειμένου να αναγνωριστούν οι ενδότυποι της σήψης (Γράφημα 1), με βάση τα προφίλ των 1394 κυκλοφορούντων μεταβολιτών (Πίνακας 4 του Παραρτήματος). Ωστόσο , οι ασθενείς δεν μπορούσαν να διαχωρισθούν με βάση τα μεταβολομικά προφίλ τους.

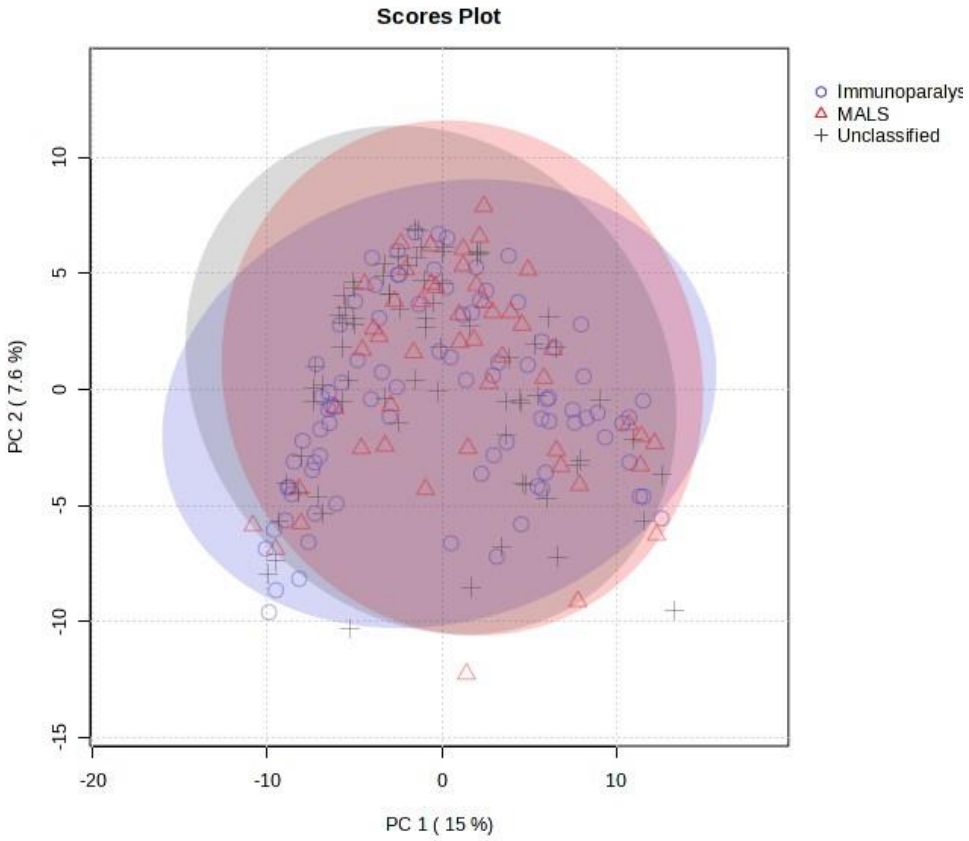


Γράφημα 1: Μη-εποπτευόμενη ιεραρχική σταδιοποίηση των ασθενών με σήψη χρησιμοποιώντας όλους τους μεταβολίτες ως εισαγωγή.

Μία διερευνητική ανάλυση κυρίων συνιστωσών (Principal Component Analysis-PCA), που συγκαταλέγεται στις μη-προκατειλημμένες τεχνικές (unsupervised), διενεργήθη χρησιμοποιώντας όλους τους μεταβολίτες ως εισαγωγή δεδομένων. Η τεχνική αυτή επισήμανε τις ανοσιακές κατηγορίες και δεν ανέδειξε καμία διακεκριμένη συσσωμάτωση, υποδεικνύοντας κοινό μεταβολικό προφίλ στις διαφορετικές καταστάσεις ανοσιακής ενεργοποίησης.

Να σημειωθεί ότι η ανάλυση κυρίων συνιστωσών (PCA) αποτελεί μία μαθηματική διαδικασία, που μετατρέπει ένα σύνολο παρατηρήσεων σχετιζόμενων μεταβλητών σε σύνολο μη σχετιζόμενων μεταβλητών. Με αυτόν τον τρόπο, το πλήθος των μεταβλητών ελαττώνεται καθιστώντας τα δεδομένα πιο διαχειρίσιμα. Τα αποτελέσματα της PCA, τα οποία παρουσιάζονται στο Γράφημα 2, δείχνουν ότι, οι

περισσότεροι ασθενείς της ομάδος της ανοσοπαράλυσης και της ενδιάμεσης ομάδος συσσωματώθηκαν, όμως οι ασθενείς με MALS παρεκλίνουν ελαφρώς από την κυρίαρχη συνιστώσα. Αυτό υποδεικνύει περισσότερες διαφορές στο μεταβολομικό προφίλ των ασθενών με MALS συγκριτικά με των άλλων δύο ομάδων.

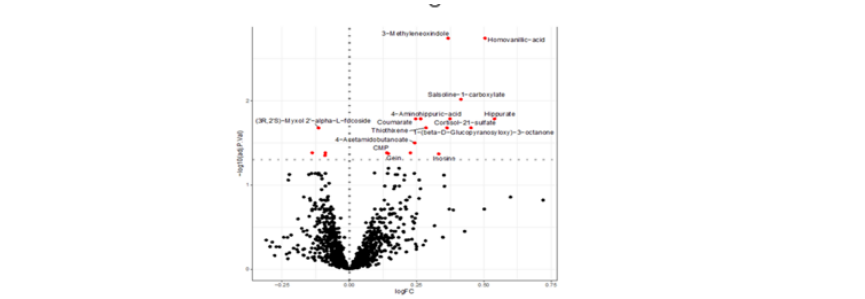


Γράφημα 2: Διερευνητική ανάλυση κυρίων συνιστωσών (Principal Component Analysis -PCA)

Για την περαιτέρω εξερεύνηση των μεταβολικών διαφορών των τριών καταστάσεων ανοσιακής ενεργοποίησης σε ατομικό επίπεδο μεταβολιτών, διενεργήθη μία διαφορική ανάλυση πληθωρικότητας διορθωμένη για την ηλικία και το φύλο. Αναγνωρίστηκαν 221 μεταβολίτες, οι οποίοι όμως είναι διαφορετικοί με στατιστικά σημαντικό τρόπο κατόπιν διόρθωσης για πολλαπλή εξέταση (Πίνακας 5 του Παραρτήματος). Τα αποτελέσματα έδειξαν ότι οι κυριότεροι στατιστικά σημαντικοί μεταβολίτες είναι οι εξής έξι: το ομοβανιλλικό οξύ (homovanillic acid), η θειοθιξένη(thiothixene), η 21-θειική κορτιζόλη (cortisol 21-sulfate), η καρβοξυλική σαλσολίνη 1 (salsoline-1-carboxylate), η θειική 3-μεθοξυ—4-

υδροξυφενυλεθυλενογλυκόλη (3-methoxy-4-hydroxyphenylethyleneglycol sulfate) και το φωσφατιδικό οξύ (8:0/16:0)(PA 8:0/16:0).

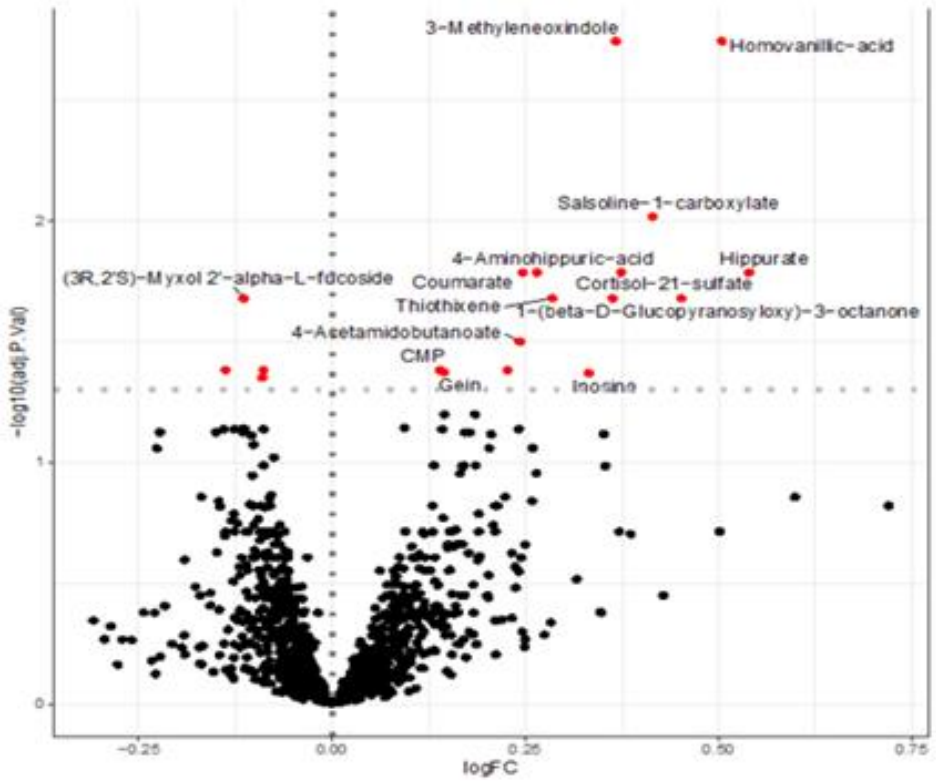
Κατά την αξιολόγηση των διαφορών στις αναλύσεις των συγκεντρώσεων των μεταβολιτών ανάμεσα στις τρείς ομάδες εντοπίστηκαν ενδιαφέροντα στοιχεία (Γράφημα 3).



Pathway	Total	All hits	Sig. hits	Mummichog P value	GSEA P	Meta P
Ubiquinone biosynthesis	10	6	2	0.01988	0.05	0.00787
Tyrosine metabolism	160	73	5	0.1458	0.01053	0.01053
Tryptophan metabolism	94	45	2	0.529	0.01124	0.03642

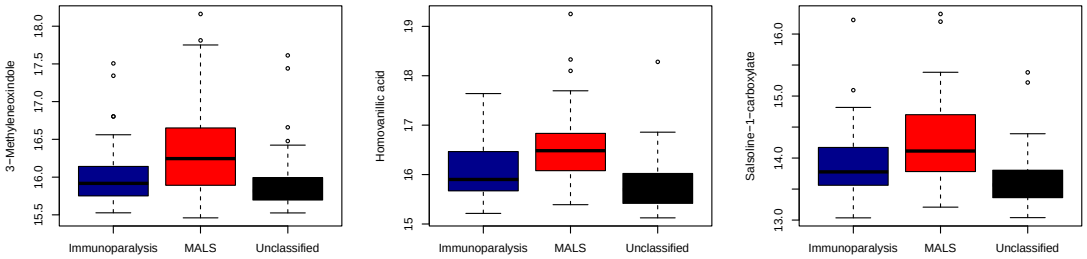
Γράφημα 3: Διαφορές στους μεταβολίτες ανάμεσα στους ασθενείς με Σύνδρομο ομοιάζον με Σύνδρομο Ενεργοποίσης των Μακροφάγων (MALS) και στους ασθενείς με ανοσοπαράλυση σχετιζόμενη με τη σήψη

Συγκεκριμένα, πραγματοποιώντας την σύγκριση ανάμεσα στους ασθενείς με MALS και σε εκείνους με την σχετιζόμενη με την σήψη ανοσοπαράλυση αναγνωρίστηκαν 19 μεταβολίτες (Πίνακα 6 του Παραρτήματος), εκ των οποίων διαπιστώθηκε υπερέκφραση των 15 (Γράφημα 3α).



Γράφημα 3α: Διάγραμμά δίκην «ηφαιστείου» (Volcano Plot) των μεταβολιτών που διαφέρουν μεταξύ του MALS και της ανοσοπαράλυσης. Οι κουκκίδες στα δεξιά αντιπροσωπεύουν μεταβολίτες που είναι αυξορρυθμισμένοι στο MALS. Ο άξονας χ αντιπροσωπεύει τον δυαδικό λογάριθμο του δείκτη αλλαγής , ενώ ο άξονας y αναπαριστά τον αρνητικό λογάριθμο της προσαρμοσμένης τιμής P μετά από πολλαπλές δοκιμές διόρθωσης. Οι κόκκινες κουκκίδες αντιπροσωπεύουν τους σημαντικούς μεταβολίτες με προσαρμοσμένη τιμή $P < 0.05$ (οι πιο έντονα αυξορρυθμισμένοι μεταβολίτες βρίσκονται προς τα δεξιά ενώ οι προς τα κάτω ρυθμισμένοι προς τα αριστερά. Οι στατιστικά σημαντικοί μεταβολίτες εδράζουν στο πάνω μέρος.

Οι τρείς μεταβολίτες που παρουσίαζαν την ισχυρότερη έκφραση ήταν οι εξής: 3-μεθυλνεοξινδόλη, το ομοβανιλλικό οξύ και η καρβοξυλική σαλσολίνη (Γραφήματα 3 β ,3 γ ,3 δ). Οι τέσσερις μεταβολίτες με την ισχυρότερη αρνητική ρύθμιση (καθοδική ρύθμιση) ήταν οι εξής: ηρικενόνη c (hericenone-C) , τα φωσφατιδικά PE(14:0/14:1(9Z)), PC(14:1 (9Z)/22:2(13Z,16Z)) και η (3R, 2'S)-μυξολική- 2-αλφα-L-φουκοσίδη.



3β

3γ 3δ

Γράφημα 3β-δ: Συγκριτικές αναλύσεις των συγκεντρώσεων της 3-μεθυλεοξινδόλης, του ομοβανιλλικού οξέος και της καρβοξυλικής-1-σαλσολίνης οι οποίες είναι διαφορετικές ανάμεσα στους ασθενείς με MALS και ανοσοπαράλυση.

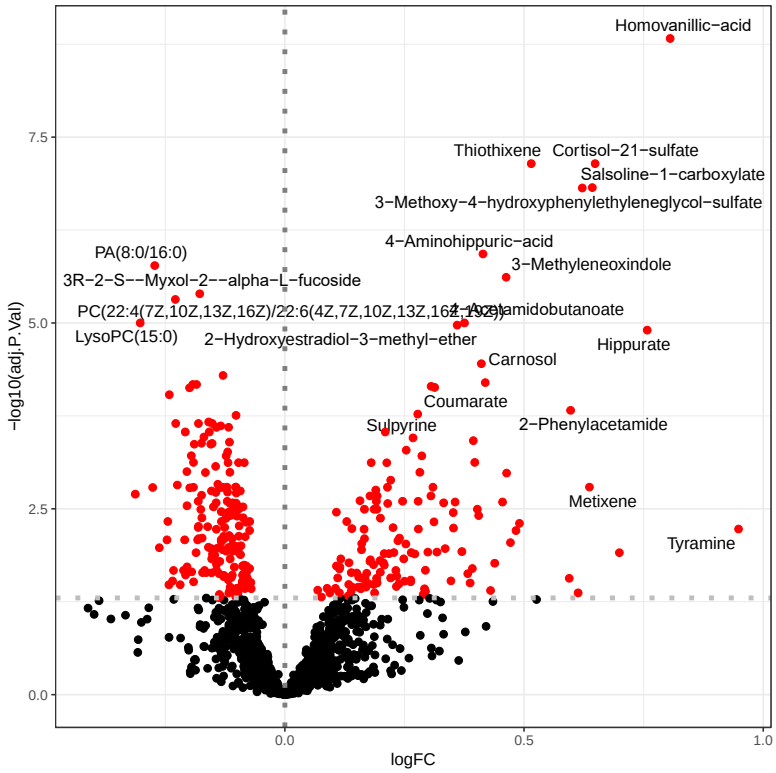
Επιπλέον, η ανάλυση του εμπλουτισμού των βιοχημικών μονοπατιών με την βοήθεια των αλγορίθμων Mummichog και GSEA αναγώρισε τρία μονοπάτια, μετά την διόρθωση για πολλαπλή εξέταση. Τα βιοχημικά μονοπάτια που αναγνωρίσθηκαν ήταν : η βιοσύνθεση της ουβικινόνης, το μεταβολικό μονοπάτι της τυροσίνης και το μεταβολικό μονοπάτι της τρυπτοφάνης (Γράφημα 3ε).

Pathway	Total	All hits	Sig. hits	Mummichog P value	GSEA P	Meta P
Ubiquinone biosynthesis	10	6	2	0.01988	0.05	0.00787
Tyrosine metabolism	160	73	5	0.1458	0.01053	0.01053
Tryptophan metabolism	94	45	2	0.529	0.01124	0.03642

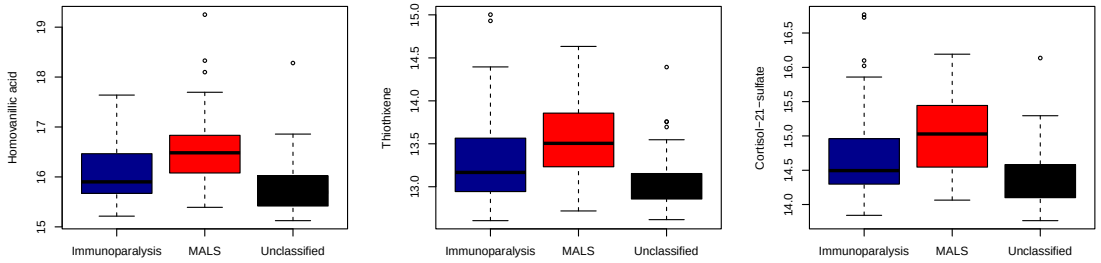
Γράφημα 3ε: Εμπλουτισμός βιοχημικών μονοπατιών κατά την σύγκριση των ασθενών με MALS και εκείνων με την ανοσοπαράλυση

Κατά την διαδικασία σύγκρισης των ασθενών με MALS, με τους ασθενείς της αταξινόμητης ή ενδιάμεσης ανοσιακής κατάστασης στην σήψη, παρατηρήθηκαν συνολικά 312 στατιστικά σημαντικά διαφορετικοί μεταβολίτες, αφού έγινε διόρθωση για πολλαπλή εξέταση (Πίνακας 7 του Παραρτήματος).

Από αυτούς, οι 174 ήταν ισχυρά υπερεκφρασμένοι (αυξορρυθμισμένοι) στους ασθενείς με MALS και οι 138 ήταν σε καθοδική ρύθμιση (Γραφήματα 4 α ,4 β, 4 γ, 4 δ). Οι κυριότεροι 3 μεταβολίτες σε υψηλές συγκεντρώσεις στους ασθενείς με MALS ήταν το ομοβανιλλικό οξύ, η θειοθιξένη και η θειική -21-κορτιζόλη.



Γράφημα 4α: Διάγραμμα δίκην «ηφαιστείου» των μεταβολιτών που είναι διαφορετικοί ανάμεσα σε ασθενείς με MALS και ενδιάμεση ανοσιακή κατάσταση. Οι κουκκίδες στα δεξιά αντιπροσωπεύουν τους μεταβολίτες που είναι αυξορρυθμισμένοι στο MALS. Οι κόκκινες κουκκίδες αντιπροσωπεύουν τους στατιστικά σημαντικούς μεταβολίτες με προσαρμοσμένο P-value < 0.05.



4β 4γ 4δ

Γράφημα 4β-δ: Οι τρείς κύριοι μεταβολίτες που είναι διαφορετικοί ανάμεσα στο MALS και στην ενδιάμεση ανοσιακή κατάσταση.

Οι τρείς μεταβολίτες που ανευρέθησαν να είναι σημαντικά μειωμένοι στο MALS ήταν το φωσφατιδικό οξύ (PA) (8:0/16:0), η (3R,2'S)-μυξολική 2'-άλφα-L-φουκοσίδη και η φωσφατιδυλοχολίνη PC (22: 4 (7Z, 10Z, 13Z, 16Z) / 22 : 6 (4Z, 7Z, 10Z, 13Z,

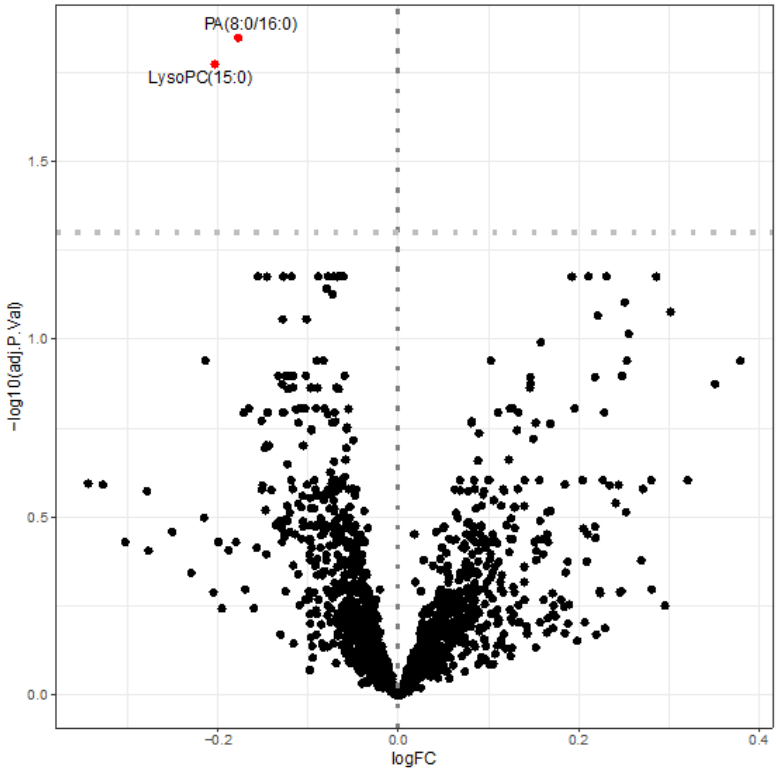
16Z, 19Z)). Η ανάλυση των βιοχημικών μονοπατιών ανέδειξε ότι οι μεταβολίτες ήταν στατιστικά σημαντικά εμπλουτισμένοι στα ίδια δύο, από τα τρία μονοπάτια, που αναγνωρίσθηκαν όταν πραγματοποιήθηκε η σύγκριση των ασθενών με MALS και αυτών με την ανοσοπαράλυση (Γράφημα 4 ε) κατόπιν διόρθωσης για πολλαπλή εξέταση.

Pathway	Total	All hits	Sig. hits	Mummichog P value	GSEA P	Meta P
Ubiquinone biosynthesis	10	6	3	0.07468	0.03774	0.01937
Tyrosine metabolism	160	73	14	0.438	0.01282	0.03472
Tryptophan metabolism	94	45	8	0.5751	0.01562	0.05132

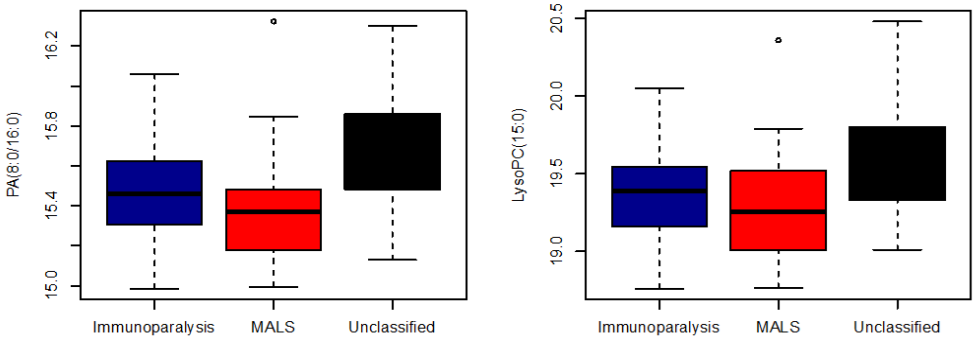
Γράφημα 4ε: Εμπλουτισμός των βιοχημικών μονοπατιών κατά την σύγκριση των ασθενών με MALS και των ασθενών με ενδιάμεση ανοσιακή κατάσταση.

Προχωρώντας στην σύγκριση των ασθενών με ανοσοπαράλυση σχετιζόμενη με τησήψη και των ασθενών σε αταξινόμητη ανοσιακή κατάσταση, μόνο δύο μεταβολίτες ανευρέθησαν διαφορετικά ρυθμισμένοι, το φωσφατιδικό οξύ PA (8:0/16:0) και η λυσο-φωσφατιδυλοχολίνη 15:0 (LysoPC 15:0) (Πίνακας 8 του Παραρτήματος και Γραφήματα 5α-γ)).

Η συγκέντρωση αμφότερων των μεταβολιτών ήταν χαμηλή στην ομάδα των ασθενών με σχετιζόμενη με σήψη ανοσοπαράλυση. Εξ αιτίας του περιορισμένου αριθμού των στατιστικά σημαντικών μεταβολιτών, δεν διενεργήθηκε περαιτέρω ανάλυση όσον αφορά τον εμπλουτισμό των βιοχημικών μονοπατιών κατά την σύγκριση των δύο αυτών ομάδων, όπως έγινε με τους ασθενείς με MALS συγκριτικά με τις άλλες δύο ομάδες.



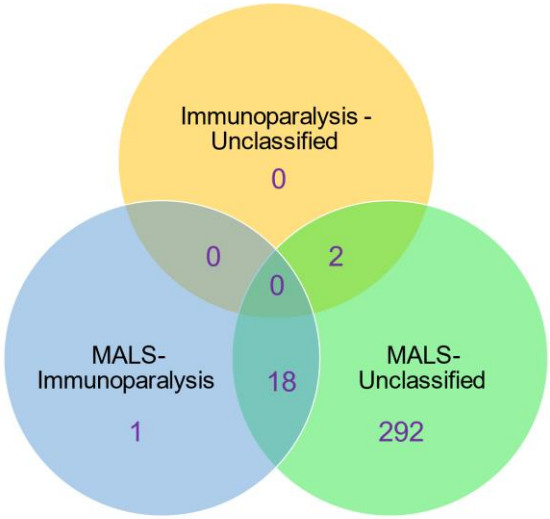
Γράφημα 5α: Διάγραμμα δίκην «ηφαιστείου» των μεταβολιτών που είναι διαφορετικοί ανάμεσα στην ανοσοπαράλυση την σχετιζόμενη με σήψη και της ενδιάμεσης ανοσιακής κατάστασης. Οι κουκκίδες στα δεξιά αντιπροσωπεύουν τους μεταβολίτες που είναι αυξορρυθμισμένοι στην ανοσοπαράλυση. Οι κόκκινες κουκκίδες αντιπροσωπεύουν τους στατιστικά σημαντικούς μεταβολίτες με προσαρμοσμένο P-value <0.05.



5β 5γ

Γράφημα 5β-γ: Συγκριτικές συγκεντρώσεις του παλμιτικού οξέος (PA 16:0) και της λυσοφωσφατιδυλοχολίνης (lysoPC) , των μεταβολιτών που ειναι διαφορετικοί ανάμεσα στους ασθενείς με ανοσοπαράλυση σχετιζόμενη με την σήψη και την ενδιάμεση ανοσιακή κατάσταση.

Μία επισκόπηση της σφαιρικής εικόνας των διαφορών των μεταβολιτών ανάμεσα στους ασθενείς με Σύνδρομο ομοιάζον με Σύνδρομο Ενεργοποίησης των Μακροφάγων (MALS), με την σχετιζόμενη με την σήψη ανοσοπαράλυση και την ομάδα των ασθενών με αταξινόμητη/ενδιάμεση ανοσιακή κατάσταση αντικατοπτρίζεται στο Γράφημα 6 με ένα διάγραμμα Venn.



Γράφημα 6: Συνολική σύγκριση των κυκλοφορούντων μεταβολιτών σε σχέση με την κατάσταση της ανοσιακής ενεργοποίησης. Το διάγραμμα Venn δείχνει την επικάλυψη των στατιστικά σημαντικών μεταβολιτών στις τρείς αναλύσεις

Όπως φάνηκε από το διάγραμμα 6, ο μεγαλύτερος καταμερισμός, δηλαδή 18 μεταβολίτες, παρατηρήθηκε κατά την σύγκριση των ασθενών με MALS με τους ασθενείς που ανήκουν στις άλλες δύο ομάδες. Αναγνωρίστηκαν δύο μεταβολίτες κατά την σύγκριση της ομάδας των ασθενών με MALS με την ομάδα των αταξινόμητων ασθενών, αλλά αυτό δεν ίσχυε όταν έγινε σύγκριση των ασθενών με MALS και των ασθενών με σχετιζόμενη με σήψη ανοσοπαράλυση. Επίσης, ταυτοποιήθηκαν 292 μεταβολίτες μόνο κατά την σύγκριση των ασθενών με MALS και των ασθενών με την αταξινόμητη ανοσιακή κατάσταση, ενώ από τη σύγκριση ανάμεσα στους ασθενείς με MALS και στους ασθενείς με ανοσοπαράλυση βρέθηκε μόνο ένας μεταβολίτης, η ινοσίνη.

Εν κατακλείδι, συνολικά, 312 μεταβολίτες ταυτοποιήθηκαν ως διαφορετικοί κατά την σύγκριση ασθενών με MALS και των ασθενών με αταξινόμητη ανοσιακή κατάσταση. Εν συνεχεία, διερευνήθηκε εάν κάποιοι από τους μεταβολίτες ήταν

επιπλέον στατιστικά σημαντικά διαφορετικοί, όταν διενεργήθη η σύγκριση ανάμεσα στην ομάδα του MALS και στην ομάδα της ανοσοπαράλυσης. Η διαδικασία αυτή, αναγνώρισε 18 μεταβολίτες που ήταν επίσης διαφορετικοί ΚΑΙ στις δύο συγκρίσεις (MALS με αταξινόμητους, MALS με ανοσοπαράλυση). Επιπροσθέτως, ανευρέυθησαν, απο την διαδικασία της ανάλυσης, 292 μεταβολίτες που ήταν διαφορετικοί ΕΙΔΙΚΑ ανάμεσα στους ασθενείς με MALS και στους αταξινόμητους. Αυτοί οι 292 προστιθέμενοι με τους 18 που μοιράζονται ανάμεσα σε MALS και ανοσοπαράλυση και τους δύο από την σύγκριση ανοσοπαράλυσης και των αταξινόμητων, επιβεβαιώνουν τον συνολικό αριθμό των 312 στατιστικά σημαντικών μεταβολιτών.

7. ΣΥΖΗΤΗΣΗ

Η ανάλυση που πραγματοποιήθηκε στην υπο-ομάδα των ασθενών από την μελέτη PROVIDE, κατέδειξε πως οι κυκλοφορούντες μεταβολίτες στη σήψη έχουν διακεκριμένα μοτίβα που εξαρτώνται από το επίπεδο της ανοσιακής ενεργοποίησης του οργανισμού του ξενιστή ως απόκριση στην σήψη. Ο κύριος στόχος, της παρούσας υπο- μελέτης ήταν να ανευρεθεί μία σύνδεση ανάμεσα στην ανοσιακή και στην μεταβολική απορρύθμιση, στους διαφορετικούς ενδότυπους της σήψης.

Καθώς οι αλλαγές που πραγματοποιούνται στο γονιδίωμα, στο μεταγράφωμα και στο προτέωμα αντικατοπτρίζονται στο μεταβόλομα, οι βίαιες αλλαγές που παρατηρούνται στο μεταβολικό προφίλ των σηπτικών ασθενών, χαίρουν ιδιαίτερου ενδιαφέροντος αναφορικά με τις διαγνωστικές μεθόδους και τις γνώσεις μας πάνω στην παθοφυσιολογία. Έτσι, η ενισχυμένη κατανόηση των επιπλοκών της σήψης στο μεταβολικό προφίλ του οργανισμού παρέχει την σημαντική δυνατότητα για βελτίωση της κλινικής κατηγοριοποίησης των ασθενών με σηπτικό σύνδρομο. Για το λόγο αυτό και έχει αναπτυχθεί ιδιαίτερο ενδιαφέρον στην ιατρική επιστημονική κοινότητα προκειμένου να γίνει κατανοητό πώς ο μεταβολικός φαινότυπος μπορεί να βελτιώσει την διαγνωστική ακρίβεια και να παρέχει την πρώιμη διάγνωση και αποτελεσματική θεραπεία της σήψης. Από τον εμπλουτισμό των προγνωστικών και διαγνωστικών εργαλείων, είναι πολύ πιθανό να προκύψει η έγκαιρη, πρώιμη αναγνώριση των υπο-ομάδων των ασθενών που βρίσκονται σε υψηλότερο κίνδυνο θανάτου, οδηγώντας σε πιο εκτεταμένη στενή παρακολούθηση ή πιο πρώιμη παρέμβαση.

Από τα αποτελέσματα που αναφέρθηκαν στο προηγούμενο κεφάλαιο, έγινε αντιληπτό πως οι ασθενείς με Σύνδρομο Ομοιάζον με Σύνδρομο Ενεργοποίησης των Μακροφάγων (Macrophage Activation-Like Syndrome /MALS) ανήκουν στον ανοσιακό ενδότυπο που συσχετίζεται με τις σημαντικότερες αλλαγές και διαταραχές των μεταβολιτών. Αν και προσφάτως, έχει αναδειχθεί ότι η σοβαρή σήψη συσχετίζεται επιπλέον με απορρύθμιση των μεταβολιτών [90], εντούτοις, η ακριβής κατάσταση της ανοσιακής ενεργοποίησης δεν ήταν εφικτό να καταγραφεί καθώς το Σύνδρομο ομοιάζον με Σύνδρομο Ενεργοποίησης των Μακροφάγων (MALS) δεν είχε ακόμα περιγραφεί στην βιβλιογραφία ως οντότητα. Στην σχετιζόμενη με την σήψη ανοσοπαράλυση, ο αριθμός των ανοσιακών μονοπατιών που διαφέρουν από τους ασθενείς χωρίς απορρύθμιση είναι περιορισμένος, γεγονός που υποδεικνύει ένα λειτουργικό ελάττωμα περιορισμένο στα μυελοειδή κύτταρα, όπως τα μονοκύτταρα και τα ουδετερόφιλα. Επίσης, προηγούμενες μελέτες από ασθενείς με σήψη που προήλθε από στελέχη Escherichia Coli, υπέδειξαν πως στην ανοσοπαράλυση, τα μονοκύτταρα επιδεικνύουν μία ελαττωματική δραστηριότητα στην γλυκόλυση και στην οξειδωτική φωσφορυλίωση. Τα γεγονότα αυτά θα μπορούσαν εν μέρει να αναστραφούν από την χορήγηση της ανθρώπινης ανασυνδυασμένης ανοσοσφαιρίνης γ (rhIFNγ) [92].

Μια ενδιαφέρουσα πληροφορία που προέκυψε ήταν πως στους ασθενείς με το σύνδρομο MALS, περισσότερα μεταβολικά μονοπάτια είναι απορρυθμισμένα συγκριτικά με την σχετιζόμενη με την σήψη ανοσοπαράλυση. Αυτό, θα μπορούσε να αποδοθεί στην εκσεσημασμένη παραγωγή της ιντερλευκίνης-1β (IL-1β) από τα ιστιικά μακροφάγα, οδηγώντας κατά αυτόν τον τρόπο στην παγκυτταροπενία, στην αιμοφαγοκυττάρωση του μυελού των οστών, την ηπατική δυσπραγία και την διάχυτη ενδοαγγειακή πήξη, τα οποία είναι τα χαρακτηριστικά στοιχεία που συνθέτουν το Σύνδρομο Ενεργοποίησης των Μακροφάγων(Macrophage Activation Syndrome /MAS). Η ανασκόπηση στην βιβλιογραφία[93,94,95], δείχνει πως αρκετές μελέτες έχουν αναφέρει παρόμοια μεταβολική απορρύθμιση, γεγονός που ενισχύει την κεντρική ιδέα πως τα μεταβολικά βιοχημικά μονοπάτια παίζουν πρωταγωνιστικό ρόλο στην σήψη.

Στην παρούσα μελέτη περιγραφονται αρκετοί μεταβολίτες που διαφοροποιούνται, είτε στο σύνδρομο MALS, είτε στην σχετιζόμενη με την σήψη ανοσοπαράλυση. Ουσιαστικά, στην παρούσα, ο μεγαλύτερος αριθμός των ανιχνεύσιμων μεταβολιτών, συγκριτικά με προγηθείσες μελέτες, είναι πολύ πιθανόν να οφείλεται στην εφαρμογή

της μηστοχευμένης προσέγγισης της μεταβολομικής (untargeted metabolomics). Η επιλογή της εν λόγω πλατφόρμας σε προηγηθείσα μελέτη [96] υπέδειξε πως η βιοσύνθεση και ο μεταβολισμός των αμινοξέων είναι ενεργοποιημένα σε περιπτώσεις ασθενών με Σύνδρομο Συστηματικής Φλεγμονώδους Απόκρισης (SIRS) και με σήψη. Αξιζει να σημειωθεί πως τέσσερις συγκεκριμένοι μεταβολίτες, συμπεριλαμβανομένου του ομοβανιλλικού οξέος, αναγνωρίσθηκαν ως διαφοροποιητικοί παράγοντες ανάμεσα στις δύο αυτές καταστάσεις. Το ομοβανιλλικό οξύ αποτελεί παράγωγο του μεταβολισμού της ντοπαμίνης και της τυροσίνης και μπορεί να αυξηθεί καθώς ο οργανισμός του ξενιστή καταβάλλει προσπάθεια για να παράγει ενδογενή ντοπαμίνη κατά την σηπτική καταπληξία.

Σε παλαιότερη μελέτη που διενεργήθη από την Ελληνική Ομάδα Μελέτη της Σήψης [97], συλλέχθηκαν δείγματα αίματος που ελήφθησαν από συνολικά 406 ασθενείς και αναλύθηκαν με την βοήθεια της μεταβολομικής προσέγγισης προκειμένου να διαφοροδιαγνωσθεί η λοίμωξη που δεν συνοδεύεται από οργανική δυσλειτουργία (γνωστή και ώς μη επιπλεγμένη σήψη παλαιότερα) από την σήψη συνοδευόμενη από οργανική δυσλειτουργία (γνωστή και ώς σοβαρή σήψη παλαιότερα). Επιπλέον εξετάστηκε και το πως σχετίζονται οι καταστάσεις αυτές με τον υποκείμενο τύπο λοίμωξης. Καταμετρήθηκαν τα εξής: η ακυλοκαρνιτίνη, τα αμινοξέα, οι βιογενείς αμίνες, τα γλυκεροφωσφολιπίδια και τα σφιγγολιπίδια. Επίσης, αναγνωρίστηκε το γλυκεροφωσφολιπίδιο λυσοπωσφατιδυλοχολίνη άλφα C26:1 ανάμεσα στους ασθενείς με πνευμονία της κοινότητας χωρίς προσβολή των οργάνων από εκείνους με οργανική δυσλειτουργία. Στην υπο-ομάδα των ασθενών με σοβαρή σήψη και σηπτική καταπληξία, οι ασθενείς με πρωτοπαθή βακτηριαιμία είχαν χαρακτηριστικά μία μείωση της ακετυλορνιθίνης. Επίσης, η πουτρεσκίνη, η λυσοφωσφατιδυλοχολίνη αλφα C18:0 και λυσοφωσφατιδυλοχολίνη C16:1 συσχετίσθηκαν με κακή πρόγνωση στους ασθενείς με πνευμονία της κοινότητας, ενδοκοιλιακές λοιμώξεις και πρωτοπαθή βακτηριαιμία αντίστοιχα. Για τα ευρήματα της συγκεκριμένης μελέτης χρησιμοποιήθηκε μία μεταβολομική προσέγγιση σύμφωνα με τον τύπο της υποκείμενης λοίμωξης. Η ανάλυση αυτή δεν είναι συγκρίσιμη με τα αποτελέσματα της μελέτης PROVIDE [78], καθώς η ταξινόμηση των ασθενών ανάλογα με την κατάσταση της ανοσιακής τους ενεργοποίησης δεν ήταν ακόμα διαθέσιμη και δεν είχε μελετηθεί όταν σχεδιάστηκε από την Ελληνική Ομάδα Μελέτης της Σήψης. Κανένας από τους τρεις μεταβολίτες της εν λόγω μελέτης δεν αναγνωρίσθηκε ως διαφορετικός ανάμεσα στο MALS και την σχετιζόμενη με την

σήψη ανοσοπαράλυση ή την ενδιάμεση ανοσιακή κατάσταση. Μία ερμηνεία των ευρημάτων αυτών είναι ότι οι μεταβολίτες που θα μπορούσαν να αποτελούν προγνωστικοί δείκτες για την πορεία των ασθενών δεν σχετίζονται με τον μηχανισμό της ανοσιακής ενεργοποίησης.

Λίγες μελέτες αναφέρονται στους μεταβολίτες που αναδείχθηκαν στην υπο-μελέτη της PROVIDE και περιγράφησαν να διαφέρουν ανάλογα με την κατάσταση της ανοσιακής ενεργοποίησης του ξενιστή. Η λυσο-φωσφατιδυλ-χολίνη (LysoPC) η οποία βρέθηκε να είναι μειωμένη στην σχετιζόμενη με την σήψη ανοσοπαράλυση , φάνηκε να έχει προστατευτικό ρόλο σε μοντέλα σήψης με ποντίκια με ενδοτοξιναιμία [97]. Επιπλέον, η λυσο-φωσφατιδυλ-χολίνη είναι ένα κύριο συστατικό των οξειδωμένων χαμηλής πυκνότητας λιποπρωτεινών και έχει καταδειχθεί πως μειώνεται στη σήψη [99, 100]. Σε μία μελέτη που διεξήχθη στην Κίνα, κατά την οποία χρησιμοποιήθηκε η πλατφόρμα της μη στοχευμένης μεταβολομικής προσέγγισης [101] , έγινε σύγκριση 63 ασθενών με σήψη, με 43 μάρτυρες. Τα αποτελέσματα της εν λόγω μελέτης κατέδειξαν σημαντική καταστολή του μεταβολισμού των αμινοξέων, ιδίως της τυροσίνης και της βιοσύνθεσης της τρυπτοφάνης που εμπλέκονται στην λειτουργία των μονοκυττάρων. Ο Meier και οι συνεργάτες , κατέδειξαν πως τα μειούμενα επίπεδα της τρυπτοφάνης μπορούν, ως ανεξάρτητος δείκτης, να προβλέψουν την σοβαρότητα της νόσου και τα βραχυπρόθεσμα ανεπιθύμητα συμβάματα σε νοσηλευόμενους ασθενείς με πνευμονία της κοινότητος.[102].

Στην υπο-μελέτη της PROVIDE αναδείχθηκε εμπλουτισμός στο μεταβολικό μονοπάτι της ουμπικινόνης κατά την σύγκριση ασθενών με MALS και των ασθενών με ανοσοπαράλυση και την αταξινόμητη ομάδα. Από την ανασκόπηση της ιατρικής βιβλιογραφίας, ανευρέθησαν μελέτες όπως εκείνη της ομάδος Donnino [103] που αφορούσαν το συνένζυμο Q10 , γνωστό και ως ουμπικινόνη και την συσχέτιση της με τη σηπτική καταπληξία. Ωστόσο, δεν πραγματοποιήθηκαν συγκρίσεις με τους ασθενείς δίχως σηπτική καταπληξία. Η ανεπάρκεια της ουμπικινόνης αποδείχτηκε σημαντική σε σοβαρά νευροεκφυλιστικά νοσήματα, όπως η νόσος του Parkinson, η αταξία του Friedreich και η χορεία του Huntington, καθώς η υποκατάσταση από του στόματος ως θεραπεία στους ασθενείς αυτούς αποδείχτηκε ωφέλιμη [104]. Επιπλέον, τα χαμηλά επίπεδα της ουμπικινόνης έχουν συσχετισθεί με χειρότερη κατάληξη στους ασθενείς με καρδιακή ανεπάρκεια [105].

Επισημαίνεται πως στην μελέτη της PROVIDE, ένας σημαντικός μεταβολίτης που ανευρέθη αυξορρυθμισμένος κατά την σύγκριση των ασθενών με MALS και τους

ασθενείς με αταξινόμητη ανοσιακή κατάσταση ήταν η θειική -21 κορτιζόλη. Ο εν λόγω μεταβολίτης ήταν εκ των πιο σημαντικών που ανευρέθησαν αφού διενεργήθη η διαφορική πληθωρική ανάλυση όταν έγινε η σύγκριση των μεταβολικών διαφοροποιήσεων στις τρείς ανοσιακές καταστάσεις της σήψης. Σε μία προοπτική μελέτη κοορτής που διενεργήθη στην Ισπανία, οι ερευνητές υπέδειξαν πως στους ασθενείς με σήψη, η ολική κορτιζόλη ορού μετρημένη μεταξύ των πρωινών ωρών οκτώ και εννέα προ μεσημβρίας, κατά το πρώτο 24ωρο της διάγνωσης του σηπτικού συνδρόμου, θα μπορούσε ενδεχομένως να χρησιμοποιηθεί ως ένας χρήσιμος μεταβολίτης για την πρόγνωση της ενδονοσοκομειακής θνητότητας και της θνητότητας των 28 ημερών, με μεγαλύτερη προγνωστική αξία από τις κλίμακες αξιολόγησης SOFA και APACHE II [106].

Άλλες, μελέτες που αφορούν παιδιατρικούς ασθενείς με σήψη, κατέδειξαν διαφοροποιήσεις σε αρκετά μεταβολικά μονοπάτια. Στο Πανεπιστημιακό Παιδιατρικό Νοσοκομείο του Chongqing οι ασθενείς διαχωρίστηκαν σε αυτούς με σήψη και οξεία νεφρική βλάβη και σε εκείνους με σήψη αλλά χωρίς νεφρική ανεπάρκεια. Η ανάλυση των μεταβολικών μονοπατιών ανέδειξε τις διαφοροποιήσεις που υπήρχαν κυρίως στον μεταβολισμό της γαλακτόζης, της φρουκτόζης, της μαννόζης, του γλυοξυλικού, του δικαρβοξυλικού, της β-β αλανίνης και των γλυκεροφωσφολιπιδίων στις 12 ώρες από την έναρξη της σήψης. Οι διαφοροποιήσεις που αναδείχθηκαν στις 24 ώρες αφορούσαν στον μεταβολισμό της τυροσίνης, του ασκορβικού και στον εναλλακτικό μεταβολισμό. Τα ευρήματα αυτά υπέδειξαν ότι οι μεταβολικές διαφοροποιήσεις στην οξεία νεφρική βλάβη που προκαλείται από την σήψη μπορούν να επηρεάσουν τα μεταβολικά μονοπάτια των λιπιδίων, των υδατανθράκων και των αμινοξέων. Συγκριτικά με εκείνους τους ασθενείς που δεν παρουσίασαν οξεία νεφρική βλάβη στη σήψη, εκείνοι με την οξεία νεφρική βλάβη που ήταν σχετιζόμενη με την σήψη, παρουσίαζαν αύξηση των επιπέδων της α-D-γλυκόζης, της D-μαννόζης και του DL-γαλακτικού, που αποτελούν τις πηγές της διατήρησης της γλυκόζης στο αίμα. Εντούτοις, παρατηρήθηκε μείωση των επιπέδων της L-γλουταμίνης, τμήμα του μονοπατιού υποκατάστασης του κύκλου του Krebs [107].

Σε άλλη μελέτη, που αφορά παιδιατρικούς ασθενείς της ομαδος του Mickiewicz [108] , πραγματοποιήθηκε σύγκριση των παιδιατρικών ασθενών με σηπτική καταπληξία και σύνδρομο οξείας αναπνευστικής δυσχέρειας και υγιών παιδιών. Η συγκέντρωση ποικίλων μεταβολιτών ανευρέθη σημαντικά διαφοροποιημένη σε ασθενείς με σηπτική καταπληξία συγκριτικά με τα υγιή παιδιά. Ειδικότερα, οι

μεταβολίτες 2-υδροξυβουτυρικό, 2-υδροξυισοβαλερικό και το γαλακτικό ανευρέθησαν αυξημένοι σε ασθενείς με σηπτική καταπληξία, υποδεικνύοντας αυξημένες απαιτήσεις σε ενέργεια κατά την εξέλιξη της λοίμωξης και της φλεγμονώδους απόκρισης. Αυτές οι υψηλές συγκεντρώσεις υπέδειξαν μία τάση προς την κετοξέωση και την γαλακτική οξέωση στους ασθενείς με κριτική νόσο. Επιπροσθέτως, τα επίπεδα γλυκόζης ήταν σημαντικά υψηλότερα σε βρέφη και νήπια με σηπτική καταπληξία, γεγονός που αναδεικνύει την ανεξέλεγκτη φλεγμονώδη απόκριση. Τα παιδιά προεφηβικής και εφηβικής ηλικίας με σηπτική καταπληξία, παρουσίαζαν αυξημένα επίπεδα αρκετών μεταβολιτών, συμπεριλαμβανομένων του 2-οξο-ισοκαπροικού, της κρεατίνης, της φωσφορικής κρεατίνης, της ιστιδίνης, της φαινυλαλανίνης και της αργινίνης. Αυτοί οι μεταβολίτες παρουσίαζαν συσχέτιση με την εναλλαγή των πρωτεινών του μυικού ιστού, την οξείδωση των αμινοξέων , το μειωμένο ενεργειακό απόθεμα και την οργανική ανεπάρκεια.

Επίσης, σε νεογνά με μυκητιασικές λοιμώξεις, το αμινοξύ σερίνη, ανευρέθη αυξημένο συγκριτικά με τους υγιείς μάρτυρες , και τα επίπεδα παρουσίασαν μείωση με την εφαρμογή της αντιμυκητιασικής θεραπείας , ουσιαστικά παρέχοντας θετική ανατροφοδότηση για την αποτελεσματικότητα της θεραπείας [109]. Στην παρούσα υπο-μελέτη της PROVIDE, η ινοσίνη, ένα νουκλεσίδιο πουρίνης , ήταν ο μοναδικός μεταβολίτης που ανευρέθη ως ο ειδικός για την σύγκριση των ασθενών με MALS και των ασθενών με την σχετιζόμενη με την σήψη. Έχει καταδειχθεί πως στα νεογνά, τα επίπεδα της ινοσίνης στο εγκεφαλονωτιαίο υγρό των ασθενών με σήψη, με εγκεφαλικούς σπασμούς και υδροκέφαλο, ανευρέθησαν σημαντικά υψηλότερα συγκριτικά με τους υγιείς μάρτυρες [110].

Στην σύγκριση του MALS και της αταξινόμητης /ενδιάμεσης κατάστασης, ανευρέθη ακόμη ένας σημαντικός μεταβολίτης που ήταν αυξορρυθμισμένος στο MALS. Πρόκειται για την θειοθιξένη, που ανήκει στις θειοξανθίνες. Από παρελθοντικές εργασίες, έχει ανευρεθεί πως μπορεί να χρησιμοποιηθεί ως θεραπεία για την σχιζοφρένεια και λοιπές ψυχωσικές διαταραχές, ως νευροληπτικό φάρμακο, με τρόπο δράσης τον αποκλεισμό των κεντρικών υποδοχέων ντοπαμίνης [111]. Επιπλέον, παλαιότερες μελέτες υπέδειξαν την χρήση της θειοθιξένης στην ψυχωσική συνδρομή και την άνοδο των επιπέδων της προλακτίνης τόσο στο πλάσμα όσο και στο εγκεφαλονωτιαίο υγρό των ψυχιατρικών ασθενών [112]. Προσφάτως, η εν λόγω ουσία, αποδείχτηκε ωφέλιμη ως θεραπευτική προσέγγιση στους ασθενείς με ντελίριο

και έχει αναφερθεί επιπλέον η αποτελεσματικότητα της εναντίον των κωρονοιών (Sars CoV-1, MERS-Cov, Sars Cov-2)[113].

7.1. Περιορισμοί της μελέτης

Σημεία που θα μπορούσαν να λειτουργήσουν ως ενδεχόμενοι περιορισμοί στην παρούσα μελέτη είναι το γεγονός πως για την υπο-μελέτη της PROVIDE χρησιμοποιήθηκαν δεδομένα μεταβολομικής από 210 ασθενείς, από τους συνολικά 240 που εντάχθηκαν στην μελέτη της PROVIDE. Αυτό συνέβη διότι συμπεριλήφθησαν μόνο οι ασθενείς με σηπτική καταπληξία.

Επίσης, το γεγονός ότι η μη στοχευμένη μεταβολομική ανάλυση (untargeted metabolomics) στοχεύει στην μέγιστη δυνατή ανίχνευση του αριθμού των μεταβολιτών, συχνά καθιστά αδύνατη την αναγνώριση των μεταβολιτών που υπερτονίζονται στην στατιστική ανάλυση, ως σημαντικές αλλαγές ανάμεσα στις βιολογικές τάξεις της μελέτης

Άλλο σημείο που ενδέχεται να λειτουργήσει περιοριστικά είναι η περιορισμένη δυνατότητα να διενεργηθεί ανάλυση του εμπλουτισμού των βιοχημικών μονοπατίων, κατά την σύγκριση των ασθενών με σχετιζόμενη με την σήψη ανοσοπαράλυση και εκείνων που εντάχθηκαν στην αταξινόμητη κατηγορία, καθώς ανευρέθη πολύ μικρός αριθμός μεταβολιτών που αποδείχτηκε στατιστικά σημαντικός (μόλις δύο).

Τέλος, ένας ακόμη περιορισμός ενδέχεται να είναι η έλλειψη της εξερεύνησης στην διασταύρωση και υπερπροσαρμογή των στοιχείων, καθώς ο σκοπός της παρούσας μεταβολομικής μελέτης δεν ήταν να δημιουργήσει ένα μοντέλο πρόγνωσης

7.2. Συμπεράσματα

Συνοψίζοντας, η παρούσα μελέτη επισημαίνει τις διαφοροποιήσεις στα μεταβολικά χαρακτηριστικά των τριών διακεκριμένων κατηγοριών της ανοσιακής ενεργοποίησης που παρατηρήθηκαν στους ασθενείς με σήψη, του Συνδρόμου ομοιάζοντος με Σύνδρομο Ενεργοποίησης των Μακροφάγων (MALS), της σχετιζόμενης με την σήψη ανοσοπαράλυση και της ενδιάμεσης/αταξινόμητης κατηγορίας.

Συγκριτικές αναλύσεις ανάμεσα σε MALS, ανοσοπαράλυση και ενδιάμεση κατηγορία, κατέδειξαν διαταραχή συγκεκριμένων βιοχημικών μονοπατιών, της

βιοσύνθεσης της ουμπικινόνης, του μεταβολισμού της τυροσίνης και του μεταβολισμού της τρυπτοφάνης.

Οι διαφοροποιήσεις και οι διαταραχές αυτές , ήταν πιο εκσεσημασμένες στο MALS. Αρκετές παλαιότερες μελέτες σε ασθενείς με σήψη απέτυχαν εξ αιτίας της ετερογένειας των ασθενών αυτών που βρίσκονται σε σοβαρή κατάσταση. Το να διευκρινίσει κανείς περισσότερο την σήψη και να ρίξει φως στο σηπτικό σύνδρομο ώς κατάσταση με αντίρροπες δυνάμεις, της φλεγμονώδους απόκρισης και της διαταραχής του μεταβολόματος είναι το κλειδί για την κατηγοριοποίηση, συνεπώς και την εφαρμογή πιο στοχευμένης και προσωποποιημένης θεραπευτικής αγωγής.

Τα ευρήματα της παρούσας μεταβολομικής υπο-μελέτης της PROVIDE θα μπορούσαν να διαφωτίσουν και να διερευνήσουν περαιτέρω το πως τα μεταβολικά χαρακτηριστικά συσχετίζονται με την διαφορετική ανοσιακή ενεργοποίηση των ασθενών με σήψη. Θα μπορούσε να δώσει το έναυσμα για την ανάπτυξη μεγαλύτερων διεθνών μελετών, των οποίων τα αποτελέσματα θα μπορούσαν να ενισχύσουν τα παρόντα ευρήματα και να ανοίξουν περαιτέρω το πεδίο της έρευνας για την εφαρμογή πιθανής στοχευμένης θεραπευτικής αγωγής.

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Στόχος: Η διερεύνηση των μεταβολομικών προφίλ που σχετίζονται με διαφορετικές καταστάσεις ανοσολογικής ενεργοποίησης σε ασθενείς με σήψη.

Σχεδιασμός: Προοπτική κλινική μελέτη

Παράμετροι: Τα αποτελέσματα της μελέτης PROVIDE έδειξαν ότι οι ασθενείς με σήψη μπορούν να ταξινομηθούν σε τρεις καταστάσεις ανοσολογικής ενεργοποίησης: (i) σύνδρομο ομοιάζον με σύνδρομο ενεργοποίησης μακροφάγων (MALS) που χαρακτηρίζεται από υπερφλεγμονή, (ii) ανοσοπαράλυση που προκαλείται από σήψη και (iii) μη ταξινομημένοι ή ενδιάμεσοι ασθενείς χωρίς σοβαρή ανοσολογική δυσλειτουργία.

Συμμετέχοντες: 210 ασθενείς από 14 κλινικές περιοχές στην Ελλάδα που πληρούν τους ορισμούς της σήψης-3 με λοίμωξη αναπνευστικού, οξεία χολαγγειίτιδα ή πρωτοπαθή βακτηριαιμία.

Μετρήσεις: Πραγματοποιήθηκε μη στοχευμένη μεταβολομική ανάλυση σε δείγματα πλάσματος από 210 ασθενείς (συνολικά 1394 προϊόντα). Η διαφορική ανάλυση αφθονίας εντόπισε 221 σημαντικά διαφορετικούς μεταβολίτες σε όλες τις ανοσολογικές καταστάσεις.

Αποτελέσματα: Οι μεταβολίτες εμπλουτίστηκαν σε οδούς που σχετίζονται με τη βιοσύνθεση της ουβικινόνης, τον μεταβολισμό της τυροσίνης και τον μεταβολισμό της τρυπτοφάνης κατά τη σύγκριση του MALS με ανοσοπαράλυση και μη ταξινομημένους ασθενείς. Κατά τη σύγκριση του MALS με μη ταξινομημένους ασθενείς, βρέθηκαν 312 σημαντικά διαφορετικοί μεταβολίτες και η ανάλυση οδού έδειξε εμπλουτισμό σε πολλαπλές οδούς. Η σύγκριση της ανοσοπαράλυσης με μη ταξινομημένους ασθενείς αποκάλυψε μόνο δύο διαφορικά ρυθμιζόμενους μεταβολίτες.

Συμπεράσματα: Τα ευρήματα υποδεικνύουν διακριτά μοτίβα μεταβολικής δυσλειτουργίας που σχετίζονται με διαφορετικές ανοσολογικές δυσλειτουργίες στη σήψη: η ισχυρότερη μεταβολική δυσλειτουργία σχετίζεται με το MALS.

Λέξεις κλειδιά: σήψη, σύνδρομο ομοιάζον με σύνδρομο ενεργοποίησης μακροφάγων, ανοσοπαράλυση, μεταβολομική, μεταβολίτες

ABSTRACT

Objectives: To investigate the metabolomic profiles associated with different immune activation states in sepsis patients.

Design: Prospective clinical study

Setting: Results of the PROVIDE study showed that patients with sepsis may be classified into three states of immune activation: (i) macrophage activation-like syndrome (MALS) characterized by hyperinflammation, (ii) sepsis-induced immunoparalysis, and (iii) unclassified or intermediate patients without severe immune dysregulation.

Subjects: 210 patients from 14 clinical sites in Greece meeting the Sepsis-3 definitions with lung infection, acute cholangitis or primary bacteremia.

Measurements: Untargeted metabolomics analysis was performed on plasma samples from 210 patients (a total of 1394 products). Differential abundance analysis identified 221 significantly different metabolites across the immune states.

Results: Metabolites were enriched in pathways related to ubiquinone biosynthesis, tyrosine metabolism, and tryptophan metabolism when comparing MALS to immunoparalysis and unclassified patients. When comparing MALS to unclassified patients, 312 significantly different metabolites were found, and pathway analysis indicated enrichment in multiple pathways. Comparing immunoparalysis to unclassified patients revealed only two differentially regulated metabolites.

Conclusions: Findings suggest distinct metabolic dysregulation patterns associated with different immune dysfunctions in sepsis: the strongest metabolic dysregulation is associated with MALS.

Keywords: sepsis, macrophage activation-like syndrome, immunoparalysis, metabolomics, metabolites

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

1. Singer M, Deutschman CS, Seymour CW. et al. The Third International Consensus Definitions for Sepsis and Septic Shock (Sepsis-3). JAMA 2016, 315:801-810
2. Rudd K, Johnson SC, Agesa K. et al. Global, regional, and national sepsis incidence and mortality, 1990-2017: analysis for the Global Burden of Disease Study. Lancet 2020, 395(10219):200-211
3. Bauer M, Gerlach H, Vogelmann T, et al. Mortality in sepsis and septic shock in Europe, North America and Australia between 2009 and 2019-results from a systematic review and meta-analysis. Crit Care 2020, 24(1):239
4. Iwashyna TJ, Ely Wesley E, Smith D, et al. Long-term cognitive impairment and funticonal disability among survivors of severe sepsis. JAMA 2010, 304(16): 1787-94
5. Giamarellos-Bourboulis EJ, Tsaganos T, Tsangaris I, et al. Validation of the new Sepsis-3 definitions: proposal for improvement in early risk identification. Clin Microbiol Infect 2017, 23(2):104-109
6. Lewis DH, Chan DL, Pinheiro D., et al. The Immunopathology of Sepsis: Pathogen recognition, Systemic Inflammation, the Compensatory Anti-Inflammatory Response, and Regulatory T Cells. J Vet Intern Med. 2012, 26:457-482
7. Giamarellos-Bourboulis EJ, Mouktaroudi M, Bodar E. et al. Crystals of monosodium urate monohydrate enhance lipopolysaccharide-induced release of interleukin-1β through a caspase-1 mediated process. Ann Rheum Dis 2009, 68:273-8
8. Frantz S, Ertl G, Bauersachs J. Toll-like receptor signaling in the ischemic heart. *Front Biosci* 2008, 13:5772-79
9. Rakoff-Nahoum S, Paglino J, Eslami-Varzaneh F, et al. Recognition of commensal microflora by toll-like receptors is required for intestinal homeostasis. Cell 2004, 118: 229-241
10. Giamarellos-Bourboulis EJ. What is the pathophysiology of the septic host upon admission? Int J Antimicrob Agents 2010, 36 Suppl 2: S2-5
11. Angus DC, Van der Poll, T. Severe sepsis and septic shock. N Engl J Med.2013, 369:840-851

12. Shalova, I.N, Lim JY, Chittezhath M, et al. Human monocytes undergo functional re-programming during sepsis mediated by hypoxia-inducible factor-1α. Immunity 2015, 42(3):484-98
13. Vachharajani V, Liu T, McCall CE. Epigenetic coordination of acute systemic inflammation: potential therapeutic targets. Expert Rev Clin Immunol 2014, 10:1141-50
14. Minoia F, Davi S, Horne AC, et al. Clinical features, treatment, and outcome of macrophage activation syndrome complicating systemic juvenile idiopathic arthritis: a multinational, multicenter staudy of 362 patients. Arthritis Rheumatol 2014, 66(11):3160-9
15. Grom AA, Horne A, De Benedetti F, et al. Macrophage activation syndrome in the era of biologic therapy, Nat Rev Rheumatol 2016, 12:259-68
16. Schram A, Berliner. How I treat hemophagocytic lymphohistiocytosis in the adult patient. Blood 2015, 125(19):2908-14
17. Kyriazopoulou E, Leventogiannis K, Norrby-Teglund A, et al. Macrophage-activation-like syndrome: an immunological entity associated with rapid progression to death in sepsis. BMC Med 2017, 15:172.
18. Karakike E, Giamarellos-Bourboulis EJ. Macrophage activation –like syndrome: a distinct entity leading to early death in sepsis. Front Immunol 2019, 31:10:55
19. Rider P, Carmi Y, Voronov E, et al. Interleukin-1α. Semin Immunol 2013, 25(6):430-8
20. Dinarello CA. A Clinical perspective of IL-1β as the gatekeeper of inflammation. Eur J Immunol 2011, 41:1203-1217
21. Shakoory B, Carcillo JA, Chatham WW, et al. Interleukin-1 receptor blockade is associated with reduced mortality in sepsis patients with features of macrophage activation syndrome: reanalysis of a prior phase III тrial. Crit Care Med 2016, 44(2):275-81
22. Antonopoulou A, Giamarellos-Bourboulis EJ. Immunomodulation in sepsis: state of the art and future perspective. Immunotherapy 2011, 3(1):117-128
23. Bone RC, Grodzin CJ, Balk RA. Sepsis: A new hypothesis for pathogenesis of the disease process. Chest1997, 121:235-243
24. Girardin E, Roux-Lombard P, Grau GE, et al. Imbalance between tumour necrosis factor-alpha and soluble TNF receptor concentrations in severe meningococcaemia. Immunology 1992, 76: 20-23

25. Marchant A, Deviere J, Byl B, et al. Interleukin-10 production during septicaemia. Lancet 1994, 343:707-708
26. Fischer E, Van Zee KJ, Marano MA, et al. Interleukin-1 receptor antagonist circulates in experimental inflammation and in human disease. Blood 1992, 79:2196-2200
27. Marie C, Cavaillon JM, Losser MR. Elevated levels of circulating transforming growth factor-b1 in patients with the sepsis syndrome. Ann Intern Med 1996, 125:520-521
28. Cavaillon JM, Adib-Conquy M, Cloez-Tayarami I, et al. Immunodepression in sepsis and SIRS assessed by ex vivo cytokine production is not a generalized phenomenon: a review. J Endotoxin Res 2001, 7:85-93
29. Hotchkiss RS, Karl IE. The pathophysiology and treatment of sepsis. N Engl J Med 2003, 348: 138-150
30. Le Tulzo Y, Pangault C, Gacouin A, et al. Early circulating lymphocyte apoptosis in human septic shock is associated with poor outcome. Shock 2002, 18:487-494
31. Hotchkiss RS, Tinsley KW, Swanson PE, et al. Sepsis-induced apoptosis causes progressive profound depletion of B and CD+ T lymphocytes in humans. J Immunol 2001, 166:6952-6963
32. Messaris E, Kekis P, Memos N, et al. Sepsis: prognostic role of apoptosis regulators in gastrointestinal cells. World J Surg 2007, 31:787-794
33. Kuckleburg CJ, Tiwari R, Czuprynski CJ. Endothelial cell apoptosis induced by bacteria-activated platelets requires caspase-8 and -9 and generation of reactive oxygen species. Thromb Haemost 2008, 99:363-372
34. Qin S, Wang H, Yuan R, et al. Role of HMGB-1 in apoptosis –mediated sepsis lethality. J Exp Med 2006, 203:1637-1642
35. Wang H, Bloom O, Zhang M, et al. HMGB-1 as a late mediator of endotoxin lethality in mice. Science 1999, 285:248-251
36. Hatada T, Wada H, Nobori T, et al. Plasma concentrations and importance of High Mobility Group Box protein in the prognosis of organ failure in patients with disseminated intravascular coagulation. Thromb Haemost 2005, 94: 975-979
37. Hamers L, Kox M, Pickkers P. Sepsis-induced immunoparalysis : mechanisms , markers , and treatment options. Minerva Anestesiol 2015, 81(4):426-39.

38. Hotchkiss RS, Monneret G, Payen D, et al. Sepsis-induced immunosuppression: from cellular dysfunctions to immunotherapy. Nat Rev Immunol 2013, 13 (12):862-874
39. Cavaillon JM, Adib-Conquy M. Bench-to-bedside review: endotoxin tolerance as a model of leukocyte reprogramming in sepsis. Crit Care 2006, 10(5):233
40. Adib-Conquy M, Cavaillon JM. Compensatory anti-inflammatory response syndrome. Thromb Haemost 2009, 101:36-47
41. Caille V, Chiche JD, Nciri N, et al. Histocompatibility leukocyte antigen-D related expression is specifically altered and predicts mortality in septic shock but not in other causes of shock. Shock 2004, 22(6):521-6
42. Tschaikowsky K, Hedwig-Geissing M, Schiele A, et al. Coincidence of pro- and anti-inflammatory responses in the early phase of severe sepsis: Longitudinal study of mononuclear histocompatibility leykocyte antigen-DR expression, procalcitonin, C-reactive protein, and changes in T-cell subsets in septic and postoperative patients. Crit Care Med 2002, 30(5):1015-23
43. Klassen A, Faccio AT, Canuto GA, da Cruz PL, Ribeiro HC, Tavares MF, Sussulini A. Metabolomics: Definitions and Significance in Systems Biology. Adv Exp Med Biol. 2017;965:3-17. doi: 10.1007/978-3-319-47656-8_1. Erratum in: Adv Exp Med Biol. 2017;965:E1-E2. doi: 10.1007/978-3-319-47656-8_14. PMID: 28132174.
44. Oliver SG, Winson MK, Kell DB et al. Systematic functional analysis of the yeast genome. Trends Biotechnol 1998, 16(9):373-8
45. Nicholson JK, Lindon JC, Holmes E. 'Metabonomics': understanding the metabolic responses of living systems to pathophysiological stimuli via multivariate statistical analysis of biological NMR spectroscopic data. Xenobiotica 1999, 29(11):1181-9
46. Dunn WB, Ellis DI. Metabolomics: Current analytical platforms and methodologies. TrAC Trends in Analytical Chemistry 24(4): 285-294.
47. Lenz EM, Wilson ID. Analytical strategies in metabonomics. J Proteome Res.2007, 6(2):443-58
48. Kaddurah-Daouk R, Krishnan K. Metabolomics: a global biochemical approach to the study of central nervous system diseases. Neuropsychopharmacology.2009, 34(1):173-86

49. Fiehn O. Combining genomics, metabolome analysis, and biochemical modeling to understand metabolic networks. Comp Funct Genomics.2001, 2(3):155-68
50. Nicholson JK, Connelly J, Lindon JC, et al. Metabonomics: a platform for studying drug toxicity and gene function. Nat Rev Drug Discov. 2002, 1(2):153-61
51. Horning EC, Horning MG. Human Metabolic Profiles Obtained by GC and GC/MS.Journal of Chromatographic Science.1971, vol9, issue 3, p129-140
52. Kell DB, Brown M, Davey H, et al. Metabolic footprinting and systems biology: the medium is the message. Nat Rev Microbiol. 2005, 3(7):557-65
53. Link H, Fuhrer T, Gerosa L, et al. Real-time metabolome profiling of the metabolic switch between starvation and growth. Nat Methods. 2015, 12(11):1091-7
54. Williams RJ, Kirby H. Paper Chromatography Using Capillary Ascent. Science. 1948, vol7: 481-3
55. Van der Greef J, Smilde AK. Symbiosis of chemometrics and metabolomics: past, present, future. J Chemometr. 2005, 19: 376-386
56. Han X, Gross RW. Global analyses of cellular lipidomes directly from crude extracts of biological samples by ESI mass spectrometry: a bridge to lipidomics. J Lipid Res 2003, 44:1071-1079
57. Sethi S, Hayashi M, Sussulini A, et al. Analytical approaches for lipidomics and its potential applications in neuropsychiatric disorders. World J Biol Psychiatry. 2017, (7):506-520
58. Fonteh AN, Harrington RJ, Harrington MG. Use of liquid chromatography and tandem mass spectrometry to measure metabolites in human cerebrospinal fluids. Neuroscience.2004, 695.7
59. Fonteh AN, Harrington RJ, Huhmer AF, et al. Identification of disease markers in human cerebrospinal fluid using lipidomic and proteomic methods. Dis Markers. 2006, 22:39-64
60. Mastrangelo A, Armotage EG, Garcia A, et al. Metabolomics as a tool for drug discovery and personalized medicine. A review. Curr Top Med Med Chem. 2014, 14(23):2627-36
61. Wishart DS. Emerging applications of metabolomics in drug discovery and precision medicine. Nat Rev Drug Discov. 2016, 15(7):473-84
62. Ludwig KR, Hummon AB. Mass Spectrometry of Biomarkers of Sepsis. Mol Biosyst. 2017, 13(4):648-664

63. Lewis DH, Chan DL, Pinheiro D, et al. The immunopathology of sepsis: pathogen recognition systemic inflammation, the compensatory anti-inflammatory response, and regulatory T cells. J Vet Intern Med. 2012, 26(3):457-82
64. Thooft A, Conotte R., Colet J-M, et al. Serum Metabolomic Profiles in Critically Ill Patients with Shock on Admission to the Intensive Care Unit. Metabolites. 2023, 13(4):523
65. Patti GJ, Yanes O, Siuzdak G. Innovation: Metabolomics: the apogee of the omics trilogy.Nat Rev Mol Cell Biol. 2012, 13 (4) :263-9
66. Liu X, Locasale JW. Metabolomics : A Primer. Trends Biochem Sci.2017, 42(4):274-284
67. Everett JR. Pharmacometabonomics in humans: a new tool for personalized medicine. Pharmacogenomics. 2015, 16(7):737-54
68. Patti GJ. Separation strategies for untargeted metabolomics. J Sep Sci. 2011, 34(24):3460-9
69. Rabinowitz JD, Purdy JG, Vastag L, et al. metabolomics in drug target discovery. Cold Spring Harb Symp Quant Biol. 2011, 76:235-46
70. Dang L, White DW, Gross S, et al. Cancer-associated IDH1 mytations produce 2-hydroxyglutarate. Nature. 2010, 17, 465(7300):966
71. Patti G, Yanes O, Shriver LP, et al. Metabolomics implicates altered sphingolipids in chronic pain of neuropathic origin. Nat Chem Biol. 2012, 22, 8(3): 232-4
72. De Carvalho LPS, Zhao H, Dickinson CE, et al. Activity-based metabolomics profiling of enzymatic function: identification of Rv1248c as a mycobacterial 2-hydroxy-3-oxoadipate synthase. Chem Biol. 2010, 17(4) :323-32
73. Vincent J-L, Brealey D, Libert N, et al. Rapid Diagnosis of Infection in the Critically Ill, a Multicenter Study of Molecular Detection in Bloodstream Infections, Pneumonia, and Sterile Site Infections. Crit Care Med. 2015, 43(11): 2283-91
74. Dickson RP. The microbiome and critical illness. Lancet Resp Med. 2016, 4(1):59-72
75. Opal SM, Fisher CJ Jr, Dhainaut JF, et al. Confirmatory inteleukin-1 receptor antagonist trial in severe sepsis: a phase III, randomized,double-blind,placebo-controlled, multicenter trial. The Interleukin-1 Receptor Antagonist Sepsis Investigator Group. Crit Care Med.1997, 25:1115-1124

76. Leentjens J, Kox M, Koch RM, et al. Reversal of immunoparalysis in humans in vivo: a double-blind, placebo-controlled, randomized pilot study. Am J Respir Crit Care Med. 2012, 186:838-845
77. Docke WD, Randow F, Syrbe U, et al. Monocyte deactivation in septic patients: restoration by IFN-γ treatment. Nat Med. 1997, 3: 678-81
78. Leventogiannis K, Kyriazopoulou E, Antonakos N et al. Toward personalized immunotherapy in sepsis: The PROVIDE randomized clinical trial. Cell Rep Med. 2022, 3: 100817.
79. Christ-Crain M, Jaccard-Stolz D, Bingisser R, et al. Effect of procalcitonin-guided treatment on antibiotic use and outcome in lower respiratory tract infenctions: cluster-randomized, single-blinded intervention trial. Lancet. 2004, 363: 600-607
80. Kalil A, Metersky M, Klompas M. Managementof Adults with Hospital-acquired and Ventilator-associated Pneumonia: 2016 Clinical Practice Guidelines by the Infenctious Diseases Society of America and the American Thoracic Society. Clin Infect Dis. 2016, 63: 1-51
81. Zilberberg M, Shorr A. Ventilator-Associated Pneumonia: the Clinical Pulmonary Infenction Score as a surrogate for diagnostics and outcome. Clin Infect Dis. 2010, 51: 131-135
82. Calandra T, Cohen J. The international sepsis forum consensus conference on definitions of infenction in the intensive care unit. Crit Care Med. 2005, 33: 1538-1548
83. Monneret G, Lepape A, Voirin N, et al. Persisting low monocyte human leukocyte antigen-DR expression predicts mortality in septic shock. Intensive Care Med. 2006, 32:1175-1183
84. Fuhrer T, Heer D, Begemann B, et al. High-throughput, accurate mass metabolome profiling of cellular extracts by flow-injection-time-of-flight mass spectrometry. Anal Chem. 2011, 83:7074-80
85. Deininger SO, Cornett DS, Paape R, et al. Normalization in MALDI-TOF imaging datasets of proteins: practical considerations. Anal Bioanal Chem. 2011, 401:167-81
86. Kanehisa, M. Goto S. KEGG: Kyoto Encyclopedia of Genes and Genomes. Nucleic Acids Res. 2000, 28(1),27-30

87. Ritchie ME, Phipson B, Wu D, et al. limma powers differential expression analyses for RNA-sequencing and microarray studies. Nucleic Acids Res. 2015, 43: e47
88. Pang Z, Chong J, Zhou G, et al. MetaboAnalyst 5.0: narrowing the gap between raw spectra and functional insights. Nucleic Acids Res. 2021, 49: W388-96
89. Li S, Park Y, Duraisingham S, et al. Predicting network activity from high throughput metabolomics. PLoS Comput Biol. 2013, 9: e1003123
90. Subramanian A, Tamayo P, Mootha VK, et al. Gene set enrichment analysis: a knowledge-based approach for interpreting genome-wide expression profiles. Proc Natl Acad Sci U S A .2005, 102: 15545-50
91. Cheng SC, Scicluna BP, Arts RJ, et al.: Broad defects in the energy metabolism of leukocytes underlie immunoparalysis in sepsis. Nat Immunol 2016, 17: 406-413.
92. Cheng SC, Quintin J, Cramer RA, et al.: mTOR- and HIF-1α-mediated aerobic glycolysis as metabolic basis for trained immunity. Science 2014, 345: 1250684.
93. Ma J, Gulbins E, Edwards MJ, et al.: Staphylococcus aureus α-toxin induces inflammatory cytokines via lysosomal acid sphingomyelinase and ceramides. Cell Physiol Biochem 2017, 43: 2170-2184
94. Mickiewicz B, Duggan GE, Winston BW, et al.: Alberta sepsis network. metabolic profiling of serum samples by 1h nuclear magnetic resonance spectroscopy as a potential diagnostic approach for septic shock. Crit Care Med 2014, 42: 1140-1149.
95. Brealey DA, Singer M, Terblanche M. Potential metabolic consequences of statins in sepsis. Crit Care Med 2011, 39: 1514-1520.
96. Chen C, Meng X, Zhu Y, et al.: Early identification of serum biomarkers and pathways of sepsis through GC-MS-based metabolomics analysis. Front Biosci (Landmark Ed) 2023, 28: 145.
97. Neugebauer S, Giamarellos-Bourboulis EJ, Pelekanou A, et al.: Metabolite profiles in sepsis: developing prognostic tools based on the type of infection. Crit Care Med 2016, 44: 1649-1662.
98. Murch O, Collin M, Hinds CJ, et al.: Lipoproteins in inflammation and sepsis. I. Basic science. Intensive Care Med 2007, 33: 13-24.

99. Drobnik W, Liebisch G, Audebert FX, et al.: Plasma ceramide and lysophosphatidylcholine inversely correlate with mortality in sepsis patients. J Lipid Res 2003, 44: 754-761
100. Ferrario M, Cambiaghi A, Brunelli L, et al.: Mortality prediction in patients with severe septic shock: a pilot study using a target metabolomics approach. Sci Rep 2016, 6: 20391.
101. Chen Q, Liang X, Wu T, et al.: Integrative analysis of metabolomics and proteomics reveals amino acid metabolism disorder in sepsis. J Transl Med 2022, 20: 123
102. Meier MA, Ottiger M, V?geli A, et al.: Activation of the tryptophan/serotonin pathway is associated with severity and predicts outcomes in pneumonia: results of a long-term cohort study. Clin Chem Lab Med 2017, 55: 1060-1069 21
103. Donnino MW, Cocchi MN, Salciccioli JD, et al.: P. Coenzyme Q10 levels are low and may be associated with the inflammatory cascade in septic shock. Crit Care 2011, 15: R189
104. Quinzii CM, Hirano M, DiMauro S. CoQ10 deficiency diseases in adults. Mitochondrion. 2007. Suppl (Suppl): S122-6
105. McMurray JJ., Dunselman P., Wedel H, et al. Coenzyme Q10, rosuvastatin, and clinical outcomes in heart failure: a pre-specified substudy of CORONA (controlled rosuvastatin multinational study in heart failure). J Am Coll Cardiol. 2010.5, 56(15):1196-204
106. De Castro R, Ruiz D, Lav?n BA, et al.: Cortisol and adrenal androgens as independent predictors of mortality in septic patients. PLoS One 2019, 14: e0214312.
107. Wang S., Xiao C., Liu C. et al. Identification of Biomarkers of Sepsis-Associated Acute Kidney Injury in Pediatric Patients Based on UPLC-QTOF/MS. Inflammation.2020, 43(2):629-640
108. Mickiewicz B, Vogel H, Wong H.R., et al. Metabolomics as a novel approach for early diagnosis of pediatric septic shock and its mortality. Am J Respir Crit Care Med. 2013 , 187(9):967-76
109. Dessi A, Liori B, Caboni P, et al. Monitoring neonatal fungal infection with metabolomics. J Matern Fetal Neonatal Med.2014, 27 Suppl 2:34-8

110. Schmidt H, Siems WG, Tilman G, et al. Concentration of purine compounds in the cerebrospinal fluid of infants suffering from sepsis, convulsions and hydrocephalus. J Perinat Med. 1995, 167-174
111. Leung J, Pharm D, Folabo Y. et al. Thiothixene in the Management of Delirium: A Case series. Psychosomatics. 2015, 56:542-546
112. Bjerkenstedt L, Eneroth P, H? rnryd C et al. Effects of Melperone and Thiothixene on Prolactin Levels in Cerebrospinal Fluid and Plasma of Psychotic Women. Arch Psychiatr Nervenkr (1970).1977, 224(4):281-93
113. Javelot H, Straczec C, Meyer G, et al. Psychotropes and COVID-19: an analysis of safety and prophylaxis. Encephale. 2021 , 47(6): 564-588

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ

Πίνακας 1: Πρωτόκολλα εγκρίσεων συμμετοχής στην έρευνα των 14 Νοσηλευτικών Ιδρυμάτων που συμμετείχαν		
Νοσηλευτικό Ίδρυμα/Τμήμα	**Αρχή έγκρισης**	**Αριθμός Έγκρισης**
4η Παθολογική Κλινική Πανεπιστημιακού Γενικού Νοσοκομείου «Αττικόν»	Επιτροπή Δεοντολογίας Πανεπιστημιακού Νοσοκομείου «Αττικόν»	21963/31 Οκτωβρίου 2017
2η Κλινική Εντατικής Θεραπείας, Πανεπιστημιακό Γενικό Νοσοκομείο «Αττικόν»	Επιτροπή Δεοντολογίας Νοσοκομείου «Αττικόν»	21827/31 Οκτωβρίου 2017
1η Πνευμονολογική Κλινική, Νοσοκομείο Νοσημάτων Θώρακος Αθηνών «Σωτηρία»	Επιτροπή Δεοντολογίας Νοσοκομείου «Σωτηρία»	316/11 Ιουλίου 2017
Παθολογική Κλινική, Πανεπιστημιακού Νοσοκομείου Πατρών	Επιτροπή Δεοντολογίας Πανεπιστημιακού Νοσοκομείου Πατρών	554/31-07-2017
Παθολογική Κλινική, Πανεπιστημιακού Νοσοκομείου Λάρισας	Επιτροπή Δεοντολογίας Πανεπιστημιακού Νοσοκομείου Λάρισας	30763/14 Ιουλίου 2017
Μονάδα Εντατικής Θεραπείας, Νοσοκομείο ΚΑΤ Κηφισιάς	Επιτροπή Δεοντολογίας Νοσοκομείου ΚΑΤ	285/01 Αυγούστου 2017
Μονάδα Εντατικής Θεραπείας, Πανεπιστημιακού Νοσοκομείου Ιωαννίνων	Επιτροπή Δεοντολογίας Πανεπιστημιακού Νοσοκομείου Ιωαννίνων	738/23 Οκτωβρίου 2017
Μονάδα Εντατικής Θεραπείας, Πανεπιστημιακού Νοσοκομείου Αλεξανδρούπολης	Επιτροπή Δεοντολογίας Πανεπιστημιακού Νοσοκομείου Αλεξανδρούπολης	584/28 Σεπτεμβρίου 2017
Μονάδα Εντατικής Θεραπείας Γενικού Νοσοκομείου Θεσσαλονίκης	Επιτροπή Δεοντολογίας Νοσοκομείου «Γ.	9432/ 07 Ιουλίου 2017

2. Πίνακας 2: Κατάλογος μεταβολιτών που αναλύθηκαν

ion ID	ion Mz	ion Average Intensity	Top annotation	Top annotation ids	Top annotatio	Top annotatio	Top annotati

«Γ. Γεννηματάς»	Γεννηματάς»	
Μονάδα Εντατικής Θεραπείας Γενικού Νοσοκομείου Θεσσαλονίκης «Άγιος Δημήτριος»	Επιτροπή Δεοντολογίας Νοσοκομείου «Άγιος Δημήτριος»	8025/11 Ιουλίου 2017
Μονάδα Εντατικής Θεραπείας Τζάνειου Γενικού Νοσοκομείου Πειραιά	Επιτροπή Δεοντολογίας Τζάνειου Νοσοκομείου	8756/27 Ιουνίου 2017
Μονάδα Εντατικής Θεραπείας, Γενικού Νοσοκομείου Λάρισας	Επιτροπή Δεοντολογίας Λάρισας Hpospital	223/25 Οκτωβρίου 2018
Μονάδα Εντατικής Θεραπείας Θριάσιου Γενικού Νοσοκομείου Ελευσίνας	Επιτροπή Δεοντολογίας Θριασίου Νοσοκομείου	383/18 Οκτωβρίου 2018
5η Παθολογική Κλινική, Γενικού Νοσοκομείου Αθηνών «Ευαγγελισμός»	Επιτροπή Δεοντολογίας Νοσοκομείου Ευαγγελισμός	331/12 Οκτωβρίου 2018

Ο πίνακας 1 παρουσιάζει μια περιεκτική περίληψη των αριθμών εγκρίσεων του Συμβουλίου Θεσμικής Αναθεώρησης (IRB) για κάθε τόπο μελέτης.

			name		n formula	n ion	on score
1	55,0181026	2342,578386	Acrolein	C01471; C05986; CHEBI:15368; HMDB0041822; HMDB41822	C3H4O	-H(-)	100
2	57,03378932	9055,648076	Acetone	C00207; C00479; C02001; C11506; C11507; C15508; CHEBI:15347; CHEBI:16605; CHEBI:17153; CHEBI:38685; HMDB0001659; HMDB0003366; HMDB0031558; HMDB0031652; HMDB01659; HMDB03366; HMDB31558; HMDB31652	C3H6O	-H(-)	100
3	58,00504086	2663,441763	Potassium acetate	C12554	C2H3O2.	-H(-)	100
4	59,01307778	24655,91103	Acetatic acid	C00033; C00266; CHEBI:15366; CHEBI:17071; HMDB0000042; HMDB0003344; HMDB00042; HMDB02165; HMDB03344	C2H4O2	-H(-)	100
5	60,00828002	931,1087359	Carbamate	C01563; C19275; CHEBI:28616; HMDB0003551; HMDB03551	CH3NO2	-H(-)	100
6	61,0287068	2030,159262	Ethylene glycol	C01380; C15588; CHEBI:30742; CHEBI:35928; HMDB0031430; HMDB0032262; HMDB31430;	C2H6O2	-H(-)	100

				HMDB32262			
7	67,01829245	2336,607985	Butynal	C00089; C06145; C14275; CHEBI:17992; CHEBI:28180; HMDB0006853; HMDB0013785; HMDB06853; HMDB06945; HMDB13785	C4H4O	-H(-)	100
8	69,03539765	1619,71187	Butynol	C06146; C17721; C19377; C20701; CHEBI:48058; HMDB0034233; HMDB0061873; HMDB0061874; HMDB34233; HMDB61873; HMDB61874	C4H6O	-H(-)	100
9	70,06548284	1023,472699	Pyrrolidine	CHEBI:33135; HMDB0031641; HMDB31641	C4H9N	-H(-)	100
10	71,01325091	21759,65233	Propenoic acid C3:1	C00511; C00546; C19246; C19297; C19440; CHEBI:17158; CHEBI:18308; CHEBI:566274; HMDB0001167; HMDB0006112; HMDB0031647; HMDB01167; HMDB06112; HMDB31647	C3H4O2	-H(-)	100
11	71,04964259	2856,393241	Butanal	C01412; C02845; C03219; C19237; CHEBI:15743; CHEBI:26911; CHEBI:28398; CHEBI:48943; HMDB0000246; HMDB0000474; HMDB0003543; HMDB00246; HMDB0031243; HMDB0031324; HMDB0033858; HMDB0034431; HMDB00474; HMDB03543; HMDB31243; HMDB31324;	C4H8O	-H(-)	100

				HMDB33858; HMDB34431			
12	71,99073031	1093,419108	Methyl isothiocyanate	C18587; CHEBI:78337; HMDB0034106; HMDB34106	C2H3NS	-H(-)	100
13	72,00844839	2842,865918	Iminoacetate	C15809	C2H3NO2	-H(-)	100
14	72,99265141	4359,574157	Glyoxylic acid	C00048; CHEBI:16891; HMDB0000119; HMDB00119	C2H2O3	-H(-)	100
15	73,02883624	7095,518846	C3:0 (Propionic acid)	C00163; C00424; C00937; C00969; C05235; C05999; C10920; C17530; CHEBI:17167; CHEBI:17871; CHEBI:18041; CHEBI:27957; CHEBI:30768; CHEBI:52342; HMDB0000237; HMDB0003052; HMDB0003453; HMDB0006458; HMDB0006961; HMDB00237; HMDB0031229; HMDB0031523; HMDB03052; HMDB03453; HMDB06458; HMDB06949; HMDB06961; HMDB31229; HMDB31523	C3H6O2	-H(-)	100
16	74,02408916	15373,94849	Glycine	C00037; C01837; C06808; C19445; CHEBI:15428; CHEBI:27777; HMDB0000123; HMDB00123;	C2H5NO2	-H(-)	100

				HMDB0014691; HMDB0031239; HMDB14691; HMDB31239			
17	74,99007465	3774,846287	Thioacetic acid	C01857; CHEBI:16555; HMDB0031188; HMDB31188	C2H4OS	-H(-)	100
18	75,0080515	11102,53907	Glycolate	C00160; CHEBI:17497; HMDB0000115; HMDB00115; HMDB0031608; HMDB03035; HMDB31608	C2H4O3	-H(-)	100
19	77,03898296	1835,552195	Benzene	C01407; CHEBI:16716; HMDB0001505; HMDB01505	C6H6	-H(-)	100
20	78,03441966	1292,93703	Pyridine	C00747; CHEBI:16227; HMDB0000926; HMDB00926	C5H5N	-H(-)	100
21	80,96467722	11868,42924	Sulfurous acid	C00094; CHEBI:48854; HMDB0034829; HMDB34829	H2O3S	-H(-)	100
22	82,99550357	1336,283589	Thiophene	C02595; CHEBI:30856; HMDB0029718; HMDB29718	C4H4S	-H(-)	100
23	83,01309625	4118,488775	Hydroxybutynal	C02648; C06144; C17601; C17602; CHEBI:38118; CHEBI:38120; HMDB0032330; HMDB0094691; HMDB32330; HMDB94691	C4H4O2	-H(-)	100
24	83,024564	1641,453281	Imidazolone	C06195; C20382; CHEBI:51023; HMDB0004363;	C3H4N2O	-H(-)	100

	84			HMDB04363			
25	83,04961471	3918,216315	Methyl propenyl ketone	C00557; C07330; CHEBI:15825; CHEBI:16486; CHEBI:51678; CHEBI:51679; CHEBI:87508; CHEBI:88419; HMDB0001184; HMDB0012157; HMDB0031407; HMDB0031512; HMDB0031530; HMDB0031601; HMDB0031606; HMDB0031607; HMDB0032458; HMDB0037788; HMDB0040584; HMDB01184; HMDB12157; HMDB31407; HMDB31512; HMDB31530; HMDB31601; HMDB31606; HMDB31607; HMDB32458; HMDB37788; HMDB40584	C5H8O	-H(-)	100
26	83,07412193	1181,810559	1-Methylpyrrolinium	CHEBI:27435; HMDB0060253; HMDB60253	C5H10N	-H(-)	100
27	84,04505997	2649,178407	Acetone cyanohydrin	C02659; C11118; CHEBI:15348; CHEBI:36592; HMDB0002039; HMDB0060427; HMDB02039; HMDB60427	C4H7NO	-H(-)	100
28	85,02888235	27333,15139	Succinic aldehyde	C00741; C01770; C01771; C02497; C16267; C16835; C19201; C19309; C19443; CHEBI:16583;	C4H6O2	-H(-)	100

				CHEBI:36253; CHEBI:41131; CHEBI:42639; CHEBI:46916; HMDB0000549; HMDB0002523; HMDB0003407; HMDB0010720; HMDB0031209; HMDB0033977; HMDB0034439; HMDB00549; HMDB02523; HMDB03407; HMDB10720; HMDB31209; HMDB33977; HMDB34439			
29	85,06502686	2295,415904	Iso-Valeraldehyde	C01390; C01949; C02020; C02223; C07329; CHEBI:121517; CHEBI:132752; CHEBI:16019; CHEBI:16182; CHEBI:16472; CHEBI:16638; CHEBI:62898; CHEBI:88414; HMDB0006478; HMDB0030124; HMDB0030126; HMDB0031206; HMDB0031525; HMDB0031526; HMDB0031604; HMDB0031605; HMDB0033854; HMDB0034235; HMDB0034465; HMDB0039779; HMDB06478; HMDB30124; HMDB30126; HMDB31206; HMDB31525; HMDB31526; HMDB31604; HMDB31605; HMDB33854; HMDB34235; HMDB34465; HMDB39779	C5H10O	-H(-)	100
30	86,024140	12055,47251	Dehydroala	C02218; C06695; C20253; CHEBI:17123;	C3H5NO2	-H(-)	100

	78		nine	HMDB0003609; HMDB0039426; HMDB03609; HMDB06356; HMDB39426			
31	87,00811739	23710,87897	Pyruvate	C00022; C00222; C12069; C20363; CHEBI:17960; CHEBI:32816; CHEBI:86354; HMDB0000243; HMDB0011111; HMDB00243; HMDB0040261; HMDB0062676; HMDB11111; HMDB11666; HMDB40261; HMDB62676	C3H4O3	-H(-)	100
32	87,04452379	4362,899746	C4:0 (Butyric acid)	C00246; C00466; C00810; C00849; C01769; C02632; C14440; CHEBI:15688; CHEBI:16135; CHEBI:27750; CHEBI:30772; HMDB0000039; HMDB0001873; HMDB0003243; HMDB00039; HMDB0030062; HMDB0031217; HMDB0031507; HMDB0040253; HMDB0040579; HMDB01873; HMDB03151; HMDB03243; HMDB30062; HMDB31217; HMDB31507; HMDB40253; HMDB40579	C4H8O2	-H(-)	100
33	87,05616226	1947,020422	Dimethylurea	C16364; C19281; C19779; CHEBI:80472; HMDB0029198; HMDB29198	C3H8N2O	-H(-)	100
34	88,003752	1195,141538	Oxamic acid	C01444; HMDB0143055	C2H3NO3	-H(-)	100

	88						
35	88,03967505	58579,80474	Alanine	C00041; C00099; C00133; C00213; C01401; C01537; C02116; C11488; CHEBI:15570; CHEBI:15611; CHEBI:16449; CHEBI:16958; CHEBI:16977; CHEBI:17967; HMDB0000056; HMDB0000161; HMDB0000271; HMDB0001310; HMDB00056; HMDB00161; HMDB00271; HMDB0031219; HMDB0062251; HMDB01310; HMDB31219; HMDB62251	C3H7NO2	-H(-)	100
36	88,98726584	1565,352887	Oxalic acid	C00209; C18586; CHEBI:16995; HMDB0002329; HMDB02329	C2H2O4	-H(-)	100
37	89,02403512	371482,0978	Lactate	C00184; C00186; C00256; C00577; C01013; C01432; C02154; C02426; CHEBI:132098; CHEBI:16016; CHEBI:33404; CHEBI:341; CHEBI:36596; CHEBI:422; CHEBI:50849; CHEBI:5445; HMDB0000190; HMDB0000700; HMDB0001051; HMDB0001311; HMDB0001882; HMDB00171; HMDB00190; HMDB0029580; HMDB0031232; HMDB0041929; HMDB0062492;	C3H6O3	-H(-)	100

				HMDB00700; HMDB01051; HMDB01311; HMDB0144295; HMDB01882; HMDB03328; HMDB29580; HMDB31232; HMDB41929; HMDB62492			
38	90,98525587	1491,054111	Thioglycolic acid	C02086	C2H4O2S	-H(-)	100
39	91,02146905	5620,174857	Cibulins	CHEBI:63861; CHEBI:91018; HMDB0030299; HMDB0032425; HMDB30299; HMDB32425	C3H8OS	-H(-)	100
40	91,05452981	3371,462654	Toluene	C01455; CHEBI:17578; HMDB0034168; HMDB34168	C7H8	-H(-)	100
41	92,05003464	3422,339025	Aniline	C00292; C14447; CHEBI:17296; CHEBI:39922; CHEBI:50415; HMDB0003012; HMDB0061887; HMDB0061888; HMDB03012; HMDB61887; HMDB61888	C6H7N	-H(-)	100
42	93,04528753	18881,17342	Methylpyrazine	HMDB0033112; HMDB33112	C5H6N2	-H(-)	100
43	94,0295824	8867,937476	Hydroxypyridine	C02502; CHEBI:16540; CHEBI:59978; HMDB0013751; HMDB0036057; HMDB13751; HMDB36057	C5H5NO	-H(-)	100

44	94,0657497	1980,714424	2,5-Dimethyl-1H-pyrrole	HMDB0032973; HMDB32973	C6H9N	-H(-)	100
45	95,0496207 5	3028,25183	Cyclohexenone	C02395; C19249; HMDB0031545; HMDB0031546; HMDB0032965; HMDB0033182; HMDB0034729; HMDB0040587; HMDB0040588; HMDB31545; HMDB31546; HMDB32965; HMDB33182; HMDB34729; HMDB40587; HMDB40588	C6H8O	-H(-)	100
46	96,0087973 6	4625,740329	Maleimide	C07272	C4H3NO2	-H(-)	100
47	96,0452964 7	2325,347897	1-Cyano-2-hydroxy-3-butene	CHEBI:1178473; HMDB0031339; HMDB0032968; HMDB0032969; HMDB0032970; HMDB31339; HMDB32968; HMDB32969; HMDB32970	C5H7NO	-H(-)	100
48	97,0107911	11603,57477	2-Methylthiophene	HMDB0033118; HMDB0033119; HMDB33118; HMDB33119	C5H6S	-H(-)	100
49	97,0651678 1	2974,072227	Cyclohexanone	C00414; C08497; C16310; CHEBI:17854; CHEBI:18554; CHEBI:20030; HMDB0003315; HMDB0030332; HMDB0031196; HMDB0031496;	C6H10O	-H(-)	100

				HMDB0031497; HMDB0031498; HMDB0031563; HMDB0031564; HMDB0033549; HMDB0033714; HMDB0035239; HMDB0040264; HMDB0040271; HMDB03315; HMDB30332; HMDB31196; HMDB31496; HMDB31497; HMDB31498; HMDB31563; HMDB31564; HMDB33549; HMDB33714; HMDB35239; HMDB40264; HMDB40271			
50	98,00658148	2000,216107	Allyl isothiocyanate	C19317; CHEBI:35626; CHEBI:494804; HMDB0005843; HMDB0029755; HMDB0033116; HMDB0033117; HMDB0038624; HMDB0061872; HMDB05843; HMDB29755; HMDB33116; HMDB33117; HMDB38624; HMDB61872	C4H5NS	-H(-)	100
51	98,02420292	9729,737612	Succinimide	C07273; C11103; HMDB0030276; HMDB30276	C4H5NO2	-H(-)	100
52	100,039735	7416,071598	Homoserine lactone	C01234; C02926; C07509; C08267; C11106; C17234; C19456; C19777; CHEBI:17289; CHEBI:18053; CHEBI:38108; HMDB0029387; HMDB0029615; HMDB0036458; HMDB29387;	C4H7NO2	-H(-)	100

				HMDB29615; HMDB36458			
53	101,0238052	26481,3009	Oxobutanoic acid	C00109; C00164; C00232; C00349; C06002; CHEBI:15344; CHEBI:16256; CHEBI:16265; CHEBI:27821; CHEBI:30831; CHEBI:36610; CHEBI:553775; HMDB0000005; HMDB0000060; HMDB00005; HMDB0001172; HMDB0001259; HMDB0002217; HMDB0003381; HMDB00060; HMDB0031646; HMDB01172; HMDB01259; HMDB02217; HMDB03381; HMDB06544; HMDB31646	C4H6O3	-H(-)	100
54	101,0476956	4488,356528	3-Aminobutyrate	CHEBI:87997; HMDB0094693; HMDB94693	C4H8NO2	-H(-)	100
55	101,0601642	5970,20111	Pentanoic acid	C00803; C08262; C18319; CHEBI:1132558; CHEBI:137944; CHEBI:167460; CHEBI:17418; CHEBI:28484; CHEBI:32026; CHEBI:37070; CHEBI:38655; CHEBI:40116; CHEBI:45133; CHEBI:73689; CHEBI:88514; HMDB0000718; HMDB0000892; HMDB0002176; HMDB0030058;	C5H10O2	-H(-)	100

				HMDB0031175; HMDB0031241; HMDB0031247; HMDB0031249; HMDB0031516; HMDB0032230; HMDB0032263; HMDB0033742; HMDB0033890; HMDB0034237; HMDB0039799; HMDB0040575; HMDB0041992; HMDB0059678; HMDB00718; HMDB00892; HMDB02176; HMDB30058; HMDB31175; HMDB31241; HMDB31247; HMDB31249; HMDB31516; HMDB32230; HMDB32263; HMDB33742; HMDB33890; HMDB34237; HMDB39799; HMDB40575; HMDB41992; HMDB59678			
56	102,0557029	14934,47759	Aminobutanoic acid (ABA)	C00334; C01026; C01205; C02261; C02356; C02721; C03284; C03665; C05145; C11109; C11735; C19514; CHEBI:15620; CHEBI:16320; CHEBI:16865; CHEBI:17519; CHEBI:17724; CHEBI:27389; CHEBI:27971; CHEBI:28797; CHEBI:33094; CHEBI:35619; CHEBI:37081; HMDB0000092; HMDB0000112; HMDB0000452; HMDB0000650; HMDB0001906; HMDB0002166;	C4H9NO2	-H(-)	100

				HMDB0002299; HMDB0003911; HMDB00092; HMDB00112; HMDB0031329; HMDB0031654; HMDB0038394; HMDB0041945; HMDB00452; HMDB00485; HMDB00581; HMDB00650; HMDB0094692; HMDB01906; HMDB02166; HMDB02299; HMDB03911; HMDB05815; HMDB31329; HMDB31654; HMDB38394; HMDB41945; HMDB94692			
57	103,0395374	52922,53019	Hydroxybutanoic acid	C00989; C01089; C01188; C01991; C03197; C05984; C06001; C14601; CHEBI:1148; CHEBI:17066; CHEBI:17290; CHEBI:20067; CHEBI:30830; CHEBI:37373; CHEBI:50129; CHEBI:741468; HMDB0000008; HMDB0000011; HMDB0000023; HMDB0000336; HMDB0000357; HMDB0000442; HMDB0000710; HMDB0000729; HMDB00008; HMDB00011; HMDB00023; HMDB0031212; HMDB00336; HMDB00357; HMDB00435; HMDB00442; HMDB0059748; HMDB00710; HMDB00729; HMDB00758;	C4H8O3	-H(-)	100

				HMDB0126088; HMDB11597; HMDB31212; HMDB59748			
58	104,0347422	12441,12736	Serine	C00065; C00716; C00740; CHEBI:16523; CHEBI:17115; CHEBI:17822; HMDB0000187; HMDB0003406; HMDB00187; HMDB00589; HMDB0062263; HMDB03406; HMDB62263	C3H7NO3	-H(-)	100
59	105,0009285	1360,878877	Methylthioglycolic acid	C03173; CHEBI:44111; CHEBI:47872; HMDB0031520; HMDB0041604; HMDB31520; HMDB41604	C3H6O2S	-H(-)	100
60	105,0188931	6214,756243	D-Glyceric acid	C00258; CHEBI:32398; CHEBI:33508; CHEBI:74324; HMDB0000139; HMDB0006372; HMDB00139; HMDB0031818; HMDB06372; HMDB31818	C3H6O4	-H(-)	100
61	105,0345751	2017,875425	Aromatic aldehyde	C00193; C00261; CHEBI:17169; HMDB0006115; HMDB06115	C7H6O	-H(-)	100
62	105,0552362	1699,746254	Diethylene glycol	C14689; CHEBI:131388; HMDB0034778; HMDB0061944; HMDB34778; HMDB61944	C4H10O3	-H(-)	100
63	106,0288927	1252,154624	Nitrosobenzene	C06876; C07327; C17500	C6H5NO	-H(-)	100

64	106,0659027	2257,554097	3-Ethylpyridine	C14403; C15562; CHEBI:127904; CHEBI:32548; CHEBI:40538; CHEBI:66892; HMDB0029734; HMDB0032244; HMDB0032972; HMDB0033871; HMDB0041965; HMDB29734; HMDB32244; HMDB32972; HMDB33871; HMDB41965	C7H9N	-H(-)	100
65	108,0212985	5830,55381	Benzosemiquinone	C02389; C05060	C6H5O2	-H(-)	100
66	108,0453087	9352,311987	Aminophenol	C01987; C02372; C02720; C05058; CHEBI:17602; CHEBI:59981; HMDB0001169; HMDB0035882; HMDB0040582; HMDB01169; HMDB35882; HMDB40582	C6H7NO	-H(-)	100
67	108,9957628	2127,807325	Methyl methanesulfonic acid	C19181	C2H6O3S	-H(-)	100
68	109,0115059	4255,845376	2-Vinylthiophene	CHEBI:48498; HMDB0029726; HMDB0033746; HMDB29726; HMDB33746	C6H6S	-H(-)	100
69	109,0291784	15521,5219	Catechol	C00090; C00530; C01751; C01785; C11115; C15571; CHEBI:17594; CHEBI:18135;	C6H6O2	-H(-)	100

				CHEBI:27810; CHEBI:59983; HMDB0000957; HMDB0002434; HMDB0031180; HMDB0032037; HMDB0033002; HMDB0033127; HMDB00957; HMDB02434; HMDB31180; HMDB32037; HMDB33002; HMDB33127			
70	109,0655797	2668,0578	2,3,5-Trimethylfuran	HMDB0029721; HMDB0029728; HMDB0031541; HMDB0040277; HMDB0040278; HMDB0061891; HMDB29721; HMDB29728; HMDB31541; HMDB40277; HMDB40278; HMDB61891	C7H10O	-H(-)	100
71	110,0245662	4261,389794	Pyrrole-2-carboxylic acid	C01059; C02932; C03056; C03927; C05942; CHEBI:36751; HMDB0004230; HMDB0038175; HMDB03094; HMDB04230; HMDB38175	C5H5NO2	-H(-)	100
72	110,0356542	2536,427942	Cytosine	C00380; CHEBI:16040; HMDB0000630; HMDB00630	C4H5N3O	-H(-)	100
73	110,0605465	1953,076067	N-Acetyl-2,3-dihydro-1H-pyrrole	C19548; CHEBI:67125; HMDB0031163; HMDB0031308; HMDB0037837; HMDB0037838; HMDB0037858; HMDB0037859; HMDB0037863; HMDB0039584; HMDB0040148; HMDB31163; HMDB31308; HMDB37837; HMDB37838;	C6H9NO	-H(-)	100

				HMDB37858; HMDB37859; HMDB37863; HMDB39584; HMDB40148			
74	110,071988	4911,070091	Histamine	C00388; CHEBI:18295; CHEBI:59170; HMDB0000870; HMDB0014417; HMDB0060263; HMDB00870; HMDB14417; HMDB60263	C5H9N3	-H(-)	100
75	110,9756288	3501,630845	Monomethyl sulfate	C02704	CH4O4S	-H(-)	100
76	110,9913337	3326,13683	2-Thiophenecarboxaldehyde	CHEBI:246417; HMDB0029717; HMDB29717	C5H4OS	-H(-)	100
77	111,0087688	46613,29372	Furoic acid	C01546; CHEBI:30845; CHEBI:30846; HMDB0000444; HMDB0000617; HMDB0032994; HMDB0039437; HMDB00444; HMDB00617; HMDB32994; HMDB39437	C5H4O3	-H(-)	100
78	111,0197305	9245,020585	Uracil	C00106; C18474; CHEBI:17568; HMDB0000300; HMDB00300; HMDB0060760; HMDB60760	C4H4N2O2	-H(-)	100
79	111,0275123	5180,32036	2,3-Dimethylthio	HMDB0032977; HMDB0032978; HMDB0032979; HMDB0032980; HMDB0035384; HMDB0035385;	C6H8S	-H(-)	100

			phene	HMDB32977; HMDB32978; HMDB32979; HMDB32980; HMDB35384; HMDB35385			
80	111,044811	3870,747184	C6:2	C01066; C04091; C04221; C06105; C08063; C08502; CHEBI:10702; CHEBI:38358; CHEBI:41674; HMDB0001164; HMDB0029581; HMDB0031344; HMDB0031543; HMDB0031759; HMDB0032233; HMDB0033569; HMDB0034247; HMDB0039778; HMDB0040260; HMDB01164; HMDB29581; HMDB31344; HMDB31543; HMDB31759; HMDB32233; HMDB33569; HMDB34247; HMDB39778; HMDB40260	C6H8O2	-H(-)	100
81	111,080986	2060,322281	(Z)-4-Heptenal	CHEBI:87582; HMDB0031483; HMDB0031486; HMDB0031487; HMDB0031488; HMDB0031539; HMDB0031540; HMDB0031550; HMDB0031551; HMDB0032301; HMDB0033667; HMDB0033827; HMDB0034372; HMDB0040339; HMDB31483; HMDB31486; HMDB31487; HMDB31488; HMDB31539; HMDB31540; HMDB31550; HMDB31551; HMDB32301; HMDB33667;	C7H12O	-H(-)	100

				HMDB33827; HMDB34372; HMDB40339			
82	112,0149506	4220,192642	Azomycin	C14531	C3H3N3O2	-H(-)	100
83	112,022935	2285,62042	2,4-Dimethylthiazole	HMDB0032974; HMDB0032975; HMDB0032976; HMDB0033867; HMDB0038460; HMDB0040036; HMDB32974; HMDB32975; HMDB32976; HMDB33867; HMDB38460; HMDB40036	C5H7NS	-H(-)	100
84	112,0401398	4592,093963	Pyrroline carboxylic acid	C03564; C03912; C04322; C07275; CHEBI:1372; CHEBI:36761; HMDB0001301; HMDB0006875; HMDB01301; HMDB02240; HMDB06875	C5H7NO2	-H(-)	100
85	112,0512461	56991,75501	Creatinine	C00791; C19280; CHEBI:16737; HMDB0000562; HMDB00562	C4H7N3O	-H(-)	100
86	112,9368104	4884,154559	Hydroxidodioxidosulfidosulfate	CHEBI:5587; HMDB0060293; HMDB60293	H2O3S2	-H(-)	100
87	113,0242068	43190,22403	2-Hydroxy-2,4-pentadienoic acid	C00596; C07091; CHEBI:28993; CHEBI:74456; HMDB0031859; HMDB0060461; HMDB31859; HMDB60461	C5H6O3	-H(-)	100

88	113,0431326	5300,94704	Di-2-propenyl sulfide	C08370; HMDB0036491; HMDB0040234; HMDB36491; HMDB40234	C6H10S	-H(-)	100
89	113,0600354	3996,861942	Delta-Hexanolactone	C01147; C01880; C03228; CHEBI:17915; CHEBI:422598; CHEBI:49284; CHEBI:589927; CHEBI:87334; CHEBI:87583; CHEBI:87721; HMDB0000453; HMDB0003843; HMDB0010719; HMDB0029487; HMDB0031158; HMDB0031491; HMDB0031492; HMDB0031501; HMDB0031559; HMDB0031560; HMDB0031561; HMDB0031562; HMDB0032490; HMDB0033568; HMDB0039581; HMDB0040328; HMDB00453; HMDB0060476; HMDB0061929; HMDB03843; HMDB10719; HMDB29487; HMDB31158; HMDB31491; HMDB31492; HMDB31501; HMDB31559; HMDB31560; HMDB31561; HMDB31562; HMDB32490; HMDB33568; HMDB39581; HMDB40328; HMDB60476; HMDB61929	C6H10O2	-H(-)	100
90	113,07167	2666,30773	Nitrosopiper	C19284; C19781; CHEBI:76341; HMDB0000323;	C5H10N2	-H(-)	100

	51		idine	HMDB00323; HMDB0061162; HMDB61162	O		
91	113,0966734	1773,016439	Heptanone	C08380; C14390; CHEBI:50139; CHEBI:5672; CHEBI:87754; CHEBI:88822; HMDB0003671; HMDB0004814; HMDB0005841; HMDB0031405; HMDB0031429; HMDB0031475; HMDB0031482; HMDB0031538; HMDB0031549; HMDB0032405; HMDB0038052; HMDB0040191; HMDB0041320; HMDB0059693; HMDB0061896; HMDB03671; HMDB04814; HMDB05841; HMDB31405; HMDB31429; HMDB31475; HMDB31482; HMDB31538; HMDB31549; HMDB32405; HMDB38052; HMDB40191; HMDB41320; HMDB59693; HMDB61896	C7H14O	-H(-)	100
92	114,0196012	2999,680005	Maleamic acid	C01596	C4H5NO3	-H(-)	100
93	114,0377468	2165,603928	1-Isothiocyanatobutane	CHEBI:50534; HMDB0031328; HMDB0032345; HMDB0040331; HMDB31328; HMDB32345; HMDB40331	C5H9NS	-H(-)	100
94	114,05570	117563,0767	Proline	C00148; C00763; C16435; C18170; CHEBI:16313;	C5H9NO2	-H(-)	100

	69			CHEBI:17203; CHEBI:30322; HMDB0000162; HMDB0003411; HMDB0012880; HMDB00162; HMDB0030409; HMDB0034208; HMDB03411; HMDB12880; HMDB30409; HMDB34208			
95	115,0033424	3484,211946	Fumarate	C00122; C01384; C02150; CHEBI:18012; CHEBI:18300; HMDB0000134; HMDB0000176; HMDB00134; HMDB00176	C4H4O4	-H(-)	100
96	115,0396461	8487,49506	Ketovaline	C00141; C02233; C03273; C06255; CHEBI:16530; CHEBI:33033; CHEBI:37079; CHEBI:39153; CHEBI:45630; HMDB0000019; HMDB0000310; HMDB0000720; HMDB0001865; HMDB00019; HMDB0003771; HMDB0012233; HMDB00310; HMDB0031643; HMDB0034466; HMDB00720; HMDB0128916; HMDB0128917; HMDB0128943; HMDB0129096; HMDB0129097; HMDB0129098; HMDB0132477; HMDB01865; HMDB03771; HMDB04260; HMDB12233; HMDB31643; HMDB34466	C5H8O3	-H(-)	100
97	115,05072	2450,289302	Diacetylhydr	C16622; C19283; C19484; HMDB0060496;	C4H8N2O	-H(-)	100

	55		azine	HMDB0061163; HMDB60496; HMDB61163	2		
98	115,0594414	8493,895968	2-Methyl-1-methylthio-2-butene	HMDB0032411; HMDB0040244; HMDB32411; HMDB40244	C6H12S	-H(-)	100
99	115,0760483	7285,221198	Hexanoic acid	C01585; C02948; C03739; C12293; C12304; C12313; CHEBI:167422; CHEBI:30776; CHEBI:31328; CHEBI:31726; CHEBI:410868; CHEBI:50569; CHEBI:55381; CHEBI:74903; CHEBI:87572; HMDB0000535; HMDB0000689; HMDB0029762; HMDB0030027; HMDB0030056; HMDB0030059; HMDB0031207; HMDB0031221; HMDB0031246; HMDB0031248; HMDB0031325; HMDB0031511; HMDB0031580; HMDB0033774; HMDB0033889; HMDB0034163; HMDB0037266; HMDB0040279; HMDB0040327; HMDB00535; HMDB00689; HMDB29762; HMDB30027; HMDB30056; HMDB30059; HMDB31207; HMDB31221; HMDB31246; HMDB31248; HMDB31325; HMDB31511; HMDB31580;	C6H12O2	-H(-)	100

				HMDB33774; HMDB33889; HMDB34163; HMDB37266; HMDB40279; HMDB40327			
100	116,0172411	1564,1718	Homocysteine thiolactone	HMDB0002287; HMDB02287	C4H7NOS	-H(-)	100
101	116,034988	5033,818045	Aspartate semialdehyde	C00441; C03214; C03508; C20250; CHEBI:18051; CHEBI:40410; CHEBI:40673; HMDB0000532; HMDB0006454; HMDB0012249; HMDB00532; HMDB06454; HMDB12249	C4H7NO3	-H(-)	100
102	116,0502517	16793,8036	Indole	C00463; C16074; CHEBI:16881; CHEBI:25979; HMDB0000738; HMDB0034171; HMDB00738; HMDB34171	C8H7N	-H(-)	100
103	116,0713306	127608,7566	Valine; Betaine	C00183; C00431; C00719; C01799; C01826; C03571; C06417; C07457; C15987; C16436; CHEBI:134261; CHEBI:15887; CHEBI:16414; CHEBI:17750; CHEBI:2691; CHEBI:28804; CHEBI:55344; HMDB0000043; HMDB0000883; HMDB0001382; HMDB0002141; HMDB0003355; HMDB00043; HMDB0013716; HMDB0015550;	C5H11NO2	-H(-)	100

				HMDB00883; HMDB01382; HMDB02141; HMDB03355; HMDB13716; HMDB15550; HMDB34366			
104	117,0191796	7556,14301	Succinate	C00042; C02170; C10900; CHEBI:15741; CHEBI:290972; CHEBI:30860; CHEBI:71176; HMDB0000202; HMDB0000254; HMDB0000349; HMDB0000940; HMDB00202; HMDB00254; HMDB0031204; HMDB00349; HMDB0039324; HMDB00940; HMDB0130020; HMDB02475; HMDB31204; HMDB39324	C4H6O4	-H(-)	100
105	117,0342131	3636,777401	Benzofuran	C14512; CHEBI:35260; HMDB0030968; HMDB0032929; HMDB0038998; HMDB0040549; HMDB30968; HMDB32929; HMDB38998; HMDB40549	C8H6O	-H(-)	100
106	117,0554902	33083,38145	5-Hydroxypentanoic acid	C02804; C20827; CHEBI:37051; CHEBI:37084; CHEBI:384411; CHEBI:45564; CHEBI:60631; CHEBI:60645; CHEBI:60647; CHEBI:68454; CHEBI:741550; CHEBI:78321; HMDB0000351; HMDB0000354; HMDB0000396; HMDB0000407;	C5H10O3	-H(-)	100

				HMDB0000410; HMDB0000531; HMDB0000642; HMDB0000754; HMDB0001863; HMDB0001987; HMDB0002011; HMDB00351; HMDB00354; HMDB00396; HMDB00407; HMDB0040735; HMDB00410; HMDB0041603; HMDB00420; HMDB00531; HMDB0059844; HMDB00605; HMDB0061927; HMDB0062584; HMDB00642; HMDB00754; HMDB0130836; HMDB01863; HMDB01987; HMDB02011; HMDB02187; HMDB02321; HMDB40735; HMDB41603; HMDB59844; HMDB61927; HMDB62584			
107	117,0744359	11097,45405	Diisopropyl sulfide	HMDB0029579; HMDB0031431; HMDB0039806; HMDB29579; HMDB31431; HMDB39806	C6H14S	-H(-)	100
108	118,0296681	3511,952989	1,2-Diacylglycerol-LD-PI-pool	CHEBI:53806; HMDB0062270; HMDB62270	C7H5NO	-H(-)	100
109	118,0506368	19942,95892	Threonine	C00188; C00263; C00820; C02115; C03678; C05519; C11108; C12317; CHEBI:15699;	C4H9NO3	-H(-)	100

				CHEBI:16080; CHEBI:16857; CHEBI:28718; HMDB0000167; HMDB0000719; HMDB0004041; HMDB00167; HMDB0061148; HMDB0061877; HMDB00719; HMDB04041; HMDB61148; HMDB61877			
110	118,9810339	5009,817412	Mercaptopyruvic acid	C00957; CHEBI:16208; HMDB0001368; HMDB01368	C3H4O3S	-H(-)	100
111	119,0346004	37769,56688	Tetrose	C01796; C02022; C02045; C06463; CHEBI:23956; CHEBI:27913; CHEBI:36532; CHEBI:86348; CHEBI:86371; CHEBI:86391; HMDB0000337; HMDB0000360; HMDB0000498; HMDB0002453; HMDB0002601; HMDB0002649; HMDB0006293; HMDB00337; HMDB00360; HMDB00498; HMDB02453; HMDB02601; HMDB02649; HMDB06118; HMDB06293	C4H8O4	-H(-)	100
112	119,0497478	19468,15621	Phenylacetaldehyde	C00601; C02083; C05627; C06758; C07113; C07209; C07214; C20782; CHEBI:16424; CHEBI:17907; CHEBI:1883; CHEBI:27434; CHEBI:27632; CHEBI:28476; CHEBI:28617;	C8H8O	-H(-)	100

				CHEBI:87607; HMDB0004072; HMDB0006236; HMDB0013815; HMDB0029636; HMDB0029637; HMDB0029638; HMDB0033910; HMDB0038997; HMDB0062765; HMDB0124943; HMDB04072; HMDB06236; HMDB13815; HMDB29636; HMDB29637; HMDB29638; HMDB33910; HMDB38997; HMDB62765			
113	120,0123014	4267,936862	Cys	C00097; C00736; C00793; CHEBI:16375; CHEBI:17561; HMDB0000574; HMDB0003417; HMDB00574; HMDB03417	C3H7NO2S	-H(-)	100
114	120,0256837	1406,943675	Dimethylsulfonioacetate	C03392	C4H9O2S	-H(-)	100
115	120,0452269	2927,041071	Benzamide	C09815; CHEBI:28179; HMDB0004461; HMDB0033131; HMDB0035281; HMDB04461; HMDB33131; HMDB35281	C7H7NO	-H(-)	100
116	120,0657041	1708,870866	Tromethamine	C07182	C4H11NO3	-H(-)	100
117	121,0293306	21200,10597	Benzoate	C00180; C00539; C00633; C03067; C06202; C15474; CHEBI:16008; CHEBI:17597;	C7H6O2	-H(-)	100

				CHEBI:30746; HMDB0001870; HMDB0011718; HMDB0032918; HMDB0034170; HMDB01870; HMDB11718; HMDB32918; HMDB34170			
118	121,040663	4203,754779	Nicotinamide	C00153; C01950; C02421; CHEBI:17154; HMDB0001406; HMDB0031861; HMDB01406; HMDB31861	C6H6N2O	-H(-)	100
119	121,0656445	3495,139764	Phenylethyl alcohol	C05853; C06757; C07112; C07213; C07216; C11348; C13637; C14385; C14386; C14582; CHEBI:1895; CHEBI:39839; CHEBI:421375; CHEBI:49000; CHEBI:49584; CHEBI:669; HMDB0029306; HMDB0030540; HMDB0032074; HMDB0032076; HMDB0032148; HMDB0032150; HMDB0032151; HMDB0032619; HMDB0033944; HMDB0041609; HMDB0059873; HMDB29306; HMDB30540; HMDB32074; HMDB32076; HMDB32148; HMDB32150; HMDB32151; HMDB32619; HMDB33944; HMDB41609; HMDB59873	C8H10O	-H(-)	100
120	122,02444	6935,024052	Nicotinate	C00253; C06813; C07446; C10164; CHEBI:15940;	C6H5NO2	-H(-)	100

	75			CHEBI:27798; CHEBI:28747; CHEBI:6032; HMDB0001488; HMDB0002243; HMDB0031713; HMDB0041950; HMDB0060665; HMDB01488; HMDB02243; HMDB31713; HMDB41950; HMDB60665			
121	122,035605	3685,200273	Pyrazinamide	C01956; CHEBI:45285; HMDB0014483; HMDB14483	C5H5N3O	-H(-)	100
122	122,060754	2739,192175	Anisidine	C19191; C19326; CHEBI:163384; CHEBI:59982; HMDB0029300; HMDB0032492; HMDB0032578; HMDB0036058; HMDB0040360; HMDB29300; HMDB32492; HMDB32578; HMDB36058; HMDB40360	C7H9NO	-H(-)	100
123	123,044398	24756,93378	Orcinol	C00727; C01502; C02323; C02923; C03351; C06730; C15572; C17467; CHEBI:16464; CHEBI:17069; CHEBI:17254; CHEBI:28591; CHEBI:437856; CHEBI:562752; HMDB0000873; HMDB0001398; HMDB0011724; HMDB0029696; HMDB0032917; HMDB0034877; HMDB0035226; HMDB0038963; HMDB0040280; HMDB0059709;	C7H8O2	-H(-)	100

				HMDB0059712; HMDB00873; HMDB0135619; HMDB01398; HMDB11724; HMDB29696; HMDB32917; HMDB34877; HMDB35226; HMDB38963; HMDB40280; HMDB59709; HMDB59712			
124	123,0813458	2625,297942	2,3-Dimethyl-2-cyclohexen-1-one	CHEBI:89984; HMDB0031414; HMDB0031582; HMDB0031686; HMDB0032446; HMDB0032447; HMDB0033238; HMDB0039844; HMDB0040246; HMDB0040272; HMDB0061898; HMDB31414; HMDB31582; HMDB31686; HMDB32446; HMDB32447; HMDB33238; HMDB39844; HMDB40246; HMDB40272; HMDB61898	C8H12O	-H(-)	100
125	124,0071826	47037,10197	Taurine	C00245; CHEBI:15891; HMDB0000251; HMDB00251	C2H7NO3S	-H(-)	100
126	124,0399271	8598,361242	N-Ethylmaleimide	C02441; C02854; C14602; C14604; C16671; C18351	C6H7NO2	-H(-)	100
127	124,0764999	1748,621256	6-Acetyl-1,2,3,4-	CHEBI:59533; HMDB0030345; HMDB0034883; HMDB0037853; HMDB0037854; HMDB0037860;	C7H11NO	-H(-)	100

			tetrahydropyridine	HMDB0037861; HMDB0037865; HMDB0037866; HMDB0037867; HMDB0038288; HMDB0038289; HMDB0039583; HMDB30345; HMDB34883; HMDB37853; HMDB37854; HMDB37860; HMDB37861; HMDB37865; HMDB37866; HMDB37867; HMDB38288; HMDB38289; HMDB39583			
128	124,9567203	1282,510706	Dimethyl trisulfide	C08372; HMDB0013780; HMDB13780	C2H6S3	-H(-)	100
129	124,9911488	7223,159253	2-Hydroxyethanesulfonate	C05123; C19177; CHEBI:1157; HMDB0003903; HMDB0031233; HMDB03903; HMDB31233	C2H6O4S	-H(-)	100
130	125,0237398	11956,90122	Pyrogallic acid	C01108; C02183; C02752; C02814; C11101; C11918; C20718; CHEBI:142577; CHEBI:16164; CHEBI:16204; CHEBI:412516; HMDB0013674; HMDB0013675; HMDB0029750; HMDB0030776; HMDB0031256; HMDB0032651; HMDB0034355; HMDB0059735; HMDB0124831; HMDB13674;	C6H6O3	-H(-)	100

				HMDB13675; HMDB29750; HMDB30776; HMDB31256; HMDB32651; HMDB34355; HMDB59735			
131	125,0435169	2714,207358	2-Ethyl-5-methylthiophene	HMDB0029733; HMDB0033160; HMDB29733; HMDB33160	C7H10S	-H(-)	100
132	125,0603771	2816,09073	Toluene-cis-dihydrodiol	C04592; C12101; CHEBI:515741; CHEBI:52939; HMDB0029582; HMDB0031222; HMDB0031223; HMDB0032067; HMDB0032333; HMDB0033629; HMDB0034080; HMDB0034835; HMDB0037026; HMDB0037027; HMDB0040445; HMDB0041474; HMDB29582; HMDB31222; HMDB31223; HMDB32067; HMDB32333; HMDB33629; HMDB34080; HMDB34835; HMDB37026; HMDB37027; HMDB40445; HMDB41474	C7H10O2	-H(-)	100
133	125,0968201	2668,880878	N(tele)-methylhistaminium; Sulcatone	C07287; CHEBI:16310; CHEBI:58600; CHEBI:61748; CHEBI:88838; HMDB0013809; HMDB0030961; HMDB0030966; HMDB0031197; HMDB0031301; HMDB0031309; HMDB0031590;	C6H12N3; C8H14O	-H(-); -H(-)	100

				HMDB0031591; HMDB0032403; HMDB0032451; HMDB0033547; HMDB0035242; HMDB0035390; HMDB0035915; HMDB0037152; HMDB0039769; HMDB0039770; HMDB0040146; HMDB0040149; HMDB0040151; HMDB0061945; HMDB0062471; HMDB0062529; HMDB0062536; HMDB0062574; HMDB13809; HMDB30961; HMDB30966; HMDB31197; HMDB31301; HMDB31309; HMDB31590; HMDB31591; HMDB32403; HMDB32451; HMDB33547; HMDB35242; HMDB35390; HMDB35915; HMDB37152; HMDB39769; HMDB39770; HMDB40146; HMDB40149; HMDB40151; HMDB61945; HMDB62471; HMDB62529; HMDB62536; HMDB62574			
134	126,0197294	2430,495201	2,3,6-Trihydroxypyridine	C03458; C19721; HMDB0034368; HMDB34368	C5H5NO3	-H(-)	100
135	126,03098	3897,008534	5-Amino-4-	C05516; C16621; HMDB0060659; HMDB60659	C4H5N3O	-H(-)	100

	05		imidazole carboxylate		2		
136	126,0414927	1538,442288	Ammeline	C08733	C3H5N5O	-H(-)	100
137	126,0550724	2940,478127	(S)-2,3,4,5-Tetrahydropyridine-2-carboxylate	C00450; C04092; C08268; C08292; C10149; C13694; CHEBI:30912; CHEBI:49014; CHEBI:49015; HMDB0001084; HMDB0012130; HMDB0029434; HMDB0059657; HMDB01084; HMDB12130; HMDB29434; HMDB59657	C6H9NO2	-H(-)	100
138	127,0031219	2263,224801	5-Hydroxy-2-furoic acid	CHEBI:86395; HMDB0059784; HMDB59784	C5H4O4	-H(-)	100
139	127,025793	2730,629065	Ammelide	C08734	C3H4N4O2	-H(-)	100
140	127,0395856	4157,043519	Dihydro-4,4-dimethyl-2,3-furandione	C01125; C06719; C06761; C11354; C20240; C20443; C20717; CHEBI:76247; HMDB0031303; HMDB0031306; HMDB0031847; HMDB0033285; HMDB0033517; HMDB0038072; HMDB0040594; HMDB0040732; HMDB31303; HMDB31306; HMDB31847; HMDB33285; HMDB33517;	C6H8O3	-H(-)	100

				HMDB38072; HMDB40594; HMDB40732			
141	127,051002	45292,74929	Dihydrothymine	C00906; C05715; C05717; CHEBI:133469; CHEBI:27468; CHEBI:565546; HMDB0000079; HMDB00079; HMDB0029874; HMDB0031547; HMDB0062558; HMDB29874; HMDB31547; HMDB62558	C5H8N2O2	-H(-)	100
142	127,07593	5743,849462	Ethyl tiglate	C08487; C09822; C10921; C10976; C11950; C13714; C13717; CHEBI:36096; CHEBI:38364; CHEBI:87515; HMDB0029165; HMDB0029314; HMDB0030330; HMDB0031174; HMDB0031342; HMDB0031351; HMDB0031476; HMDB0031477; HMDB0031484; HMDB0031500; HMDB0031504; HMDB0031593; HMDB0031603; HMDB0031681; HMDB0032391; HMDB0032460; HMDB0033793; HMDB0038271; HMDB0038962; HMDB0039819; HMDB0040214; HMDB0040591; HMDB29165; HMDB29314; HMDB30330; HMDB31174; HMDB31342; HMDB31351; HMDB31476; HMDB31477; HMDB31484; HMDB31500;	C7H12O2	-H(-)	100

				HMDB31504; HMDB31593; HMDB31603; HMDB31681; HMDB32391; HMDB32460; HMDB33793; HMDB38271; HMDB38962; HMDB39819; HMDB40214; HMDB40591			
143	127,1125284	1783,954076	1-Octanal	C01545; C07288; C14272; C17145; CHEBI:15833; CHEBI:17935; CHEBI:34118; CHEBI:87434; CHEBI:87586; CHEBI:88852; HMDB0001140; HMDB0029574; HMDB0030030; HMDB0031294; HMDB0031295; HMDB0031296; HMDB0031298; HMDB0031299; HMDB0031300; HMDB0032402; HMDB0032450; HMDB0035231; HMDB0035768; HMDB0037181; HMDB0061912; HMDB0061913; HMDB01140; HMDB29574; HMDB30030; HMDB31294; HMDB31295; HMDB31296; HMDB31298; HMDB31299; HMDB31300; HMDB32402; HMDB32450; HMDB35231; HMDB35768; HMDB37181; HMDB61912; HMDB61913	C8H16O	-H(-)	100
144	128,01088	1202,625821	Cyanuric	C06554; CHEBI:17696; HMDB0041861;	C3H3N3O	-H(-)	100

	05		acid	HMDB41861	3		
145	128,0352062	134885,7116	Oxoproline	C01877; C01879; C02237; C04281; C04282; CHEBI:16010; CHEBI:16352; CHEBI:18183; CHEBI:27391; CHEBI:6151; HMDB0000267; HMDB0000805; HMDB0001369; HMDB0001843; HMDB0002234; HMDB00267; HMDB0060262; HMDB0061093; HMDB0062585; HMDB00805; HMDB01369; HMDB01843; HMDB02234; HMDB60262; HMDB61093; HMDB62585	C5H7NO3	-H(-)	100
146	129,0193159	13473,88446	Itaconate	C00433; C00490; C01732; C02132; C02214; C02226; C02800; CHEBI:15670; CHEBI:16600; CHEBI:17204; CHEBI:17415; CHEBI:17626; CHEBI:30838; CHEBI:74524; HMDB0000620; HMDB0000634; HMDB0000749; HMDB0002092; HMDB0013233; HMDB0033809; HMDB0059743; HMDB0060365; HMDB0061185; HMDB00620; HMDB00634; HMDB00749; HMDB01657; HMDB02092; HMDB13233; HMDB33809; HMDB59743; HMDB60365; HMDB61185	C5H6O4	-H(-)	100

147	129,0386995	9958,809114	2-[(Methylthio)methyl]-2-butenal	HMDB0031370; HMDB0037493; HMDB0040238; HMDB31370; HMDB37493; HMDB40238	C6H10OS	-H(-)	100
148	129,0552487	45852,14806	4-Methyl-2-oxopentanoate	C00233; C00671; C00902; C01012; C02122; C02129; C03241; C03465; C03467; C03500; C06008; C06102; C12314; C14530; CHEBI:15888; CHEBI:17308; CHEBI:2490; CHEBI:28422; CHEBI:35932; CHEBI:386429; CHEBI:48430; CHEBI:86365; CHEBI:87307; HMDB0000408; HMDB0000491; HMDB0000695; HMDB0001864; HMDB0006024; HMDB0010717; HMDB0012882; HMDB0031214; HMDB0031216; HMDB0031218; HMDB0033286; HMDB0033302; HMDB0033698; HMDB00408; HMDB0041602; HMDB00491; HMDB0059876; HMDB0061881; HMDB00695; HMDB00762; HMDB01864; HMDB01962; HMDB02254; HMDB03736; HMDB04750; HMDB06024; HMDB10717; HMDB11647;	C6H10O3	-H(-)	100

				HMDB12882; HMDB31214; HMDB31216; HMDB31218; HMDB33286; HMDB33302; HMDB33698; HMDB41602; HMDB59876; HMDB61881			
149	129,0917521	6627,7746	Ethyl isovalerate	C12290; C12296; C17714; CHEBI:31725; CHEBI:45571; CHEBI:50585; CHEBI:77322; HMDB0000666; HMDB0030028; HMDB0030052; HMDB0031528; HMDB0031594; HMDB0031595; HMDB0031600; HMDB0032204; HMDB0032874; HMDB0033745; HMDB0034166; HMDB0034239; HMDB0035238; HMDB0036209; HMDB0036237; HMDB0036238; HMDB0038227; HMDB0039095; HMDB0039618; HMDB0039619; HMDB0040297; HMDB00666; HMDB30028; HMDB30052; HMDB31528; HMDB31594; HMDB31595; HMDB31600; HMDB32204; HMDB32874; HMDB33745; HMDB34166; HMDB34239; HMDB35238; HMDB36209; HMDB36237; HMDB36238; HMDB38227; HMDB39095;	C7H14O2	-H(-)	100

				HMDB39618; HMDB39619; HMDB40297			
150	130,0507189	12557,06705	5-Aminolevulinic acid	C00430; C01015; C01073; C01110; C01157; C01165; C03341; C03440; C03651; C03741; C04397; C05147; C19706; CHEBI:16231; CHEBI:16682; CHEBI:16889; CHEBI:17232; CHEBI:17549; CHEBI:18095; CHEBI:18240; CHEBI:20392; CHEBI:28397; CHEBI:40992; CHEBI:49268; CHEBI:87840; CHEBI:89836; HMDB0000725; HMDB0000766; HMDB0000783; HMDB0001149; HMDB0002104; HMDB0002113; HMDB0006055; HMDB0006272; HMDB0036576; HMDB0059659; HMDB0060460; HMDB0061880; HMDB00725; HMDB00766; HMDB00783; HMDB01149; HMDB02104; HMDB02113; HMDB0240251; HMDB06055; HMDB06272; HMDB36576; HMDB59659; HMDB60460; HMDB61880	C5H9NO3	-H(-)	100
151	130,0872073	248002,1311	(Iso)Leucine	C00123; C00407; C01570; C01933; C02378; C02486; C06418; C08263; C16434; C16439;	C6H13NO2	-H(-)	100

				C16647; CHEBI:15603; CHEBI:15604; CHEBI:16586; CHEBI:17191; CHEBI:18347; CHEBI:25017; CHEBI:28225; CHEBI:38264; CHEBI:43433; CHEBI:44212; CHEBI:67144; HMDB0000172; HMDB0000557; HMDB0000687; HMDB0001645; HMDB0001901; HMDB0003640; HMDB0013773; HMDB00172; HMDB0029168; HMDB0033923; HMDB0036382; HMDB00557; HMDB0060650; HMDB0061716; HMDB0062203; HMDB00687; HMDB01645; HMDB01901; HMDB02002; HMDB02291; HMDB03640; HMDB13773; HMDB29168; HMDB33923; HMDB36382; HMDB60650; HMDB61716; HMDB62203			
152	131,0349641	11016,39969	Glutarate	C00489; C00900; C02674; C03589; C04106; C04181; C06010; C08645; C11838; CHEBI:111517; CHEBI:16444; CHEBI:17859; CHEBI:18409; CHEBI:29003; CHEBI:741548; CHEBI:75146; HMDB0000576; HMDB0000622; HMDB0000661;	C5H8O4	-H(-)	100

				HMDB0001844; HMDB0002001; HMDB0006833; HMDB0006855; HMDB0029884; HMDB0033958; HMDB0040531; HMDB00576; HMDB0061879; HMDB00622; HMDB00661; HMDB01844; HMDB02001; HMDB06833; HMDB06855; HMDB29884; HMDB33958; HMDB40531; HMDB61879			
153	131,0463878	11429,82027	Asparagine	C00152; C01043; C01905; C02037; C02642; C16438; C19258; C19301; CHEBI:15737; CHEBI:17196; CHEBI:17201; CHEBI:18261; CHEBI:28159; HMDB0000026; HMDB0000168; HMDB00026; HMDB0011733; HMDB0012265; HMDB00168; HMDB0033780; HMDB11733; HMDB12265; HMDB33780	C4H8N2O3	-H(-)	100
154	131,0609431	4972,804893	1-Methylpyrrolo[1,2-a]pyrazine	HMDB0033171; HMDB0033173; HMDB33171; HMDB33173	C8H8N2	-H(-)	100
155	131,07091	8837,584687	NONOate;	C03264; C03499; C06103; C07834; C13773;	C4H10N3	-H(-); -H(-)	100

	78		D-2-Hydroxyisocaproate	CHEBI:131434; CHEBI:17869; CHEBI:27909; CHEBI:37035; CHEBI:44510; CHEBI:55534; CHEBI:59783; CHEBI:78842; CHEBI:86542; CHEBI:87685; HMDB0000317; HMDB0000409; HMDB0000525; HMDB0000624; HMDB0000665; HMDB0000746; HMDB0001624; HMDB0001975; HMDB0010718; HMDB0012843; HMDB0029166; HMDB00317; HMDB0032158; HMDB0032456; HMDB0033851; HMDB0040409; HMDB00409; HMDB0041844; HMDB00525; HMDB0059770; HMDB0061652; HMDB00624; HMDB00665; HMDB00746; HMDB01624; HMDB01975; HMDB10718; HMDB12843; HMDB29166; HMDB32158; HMDB32456; HMDB33851; HMDB40409; HMDB41844; HMDB59770; HMDB61652	O2; C6H12O3		
156	131,0824291	73496,71487	Ornithine	C00077; C00515; C01602; C03943; C11320; CHEBI:15729; CHEBI:16176; HMDB0000214; HMDB0003374; HMDB00214; HMDB00818;	C5H12N2O2	-H(-)	100

				HMDB03374; HMDB04984			
157	131,0909918	27916,9973	2-Heptanethiol	HMDB0032303; HMDB0032304; HMDB32303; HMDB32304	C7H16S	-H(-)	100
158	132,0300187	10954,98341	Aspartate	C00049; C00402; C16433; C19911; CHEBI:17053; CHEBI:17364; CHEBI:22660; CHEBI:24786; HMDB0000191; HMDB0006483; HMDB0011753; HMDB00191; HMDB0062186; HMDB06483; HMDB11753; HMDB62186	C4H7NO4	-H(-)	100
159	132,0454983	4277,593055	Mandelonitrile	C00561; C02040; C02615; C03766; C05658; C12312; CHEBI:16667; CHEBI:16910; CHEBI:17840; CHEBI:18450; CHEBI:31697; CHEBI:51603; CHEBI:89649; HMDB0004094; HMDB0029757; HMDB0032390; HMDB0034666; HMDB0059805; HMDB0060486; HMDB0061918; HMDB04094; HMDB29757; HMDB32390; HMDB34666; HMDB59805; HMDB60486; HMDB61918	C8H7NO	-H(-)	100
160	132,05770	2466,184188	3-	HMDB0033172; HMDB33172	C7H7N3	-H(-)	100

	05		Methylpyrrolo[1,2-a]pyrazine				
161	132,066339	3269,434308	Hydroxy-valine	C20313; HMDB0031658; HMDB0032356; HMDB0039499; HMDB31658; HMDB32356; HMDB39499	C5H11NO3	-H(-)	100
162	133,014080 9	10803,28614	Malate	C00149; C00497; C00711; C03064; CHEBI:30796; CHEBI:30797; CHEBI:6650; HMDB0000156; HMDB0000744; HMDB00156; HMDB0031518; HMDB0032872; HMDB00744; HMDB31518; HMDB32872	C4H6O5	-H(-)	100
163	133,049990 2	5207,326796	Deoxyribose	C01801; C02783; C04039; C04272; C06257; C08347; CHEBI:15684; CHEBI:28816; HMDB0000421; HMDB0001292; HMDB0003224; HMDB0012141; HMDB0012485; HMDB0029576; HMDB00421; HMDB0127615; HMDB01292; HMDB03224; HMDB12141; HMDB12485; HMDB29576	C5H10O4	-H(-)	100
164	133,06578	5886,643616	Indan-1-ol	C01710; C02394; C15512; C16930; C20464;	C9H10O	-H(-)	100

	75			CHEBI:16697; CHEBI:33226; CHEBI:33227; CHEBI:425902; CHEBI:50158; HMDB0029639; HMDB0029697; HMDB0029698; HMDB0030839; HMDB0031626; HMDB0032024; HMDB0032142; HMDB0032608; HMDB0032623; HMDB0033716; HMDB0034107; HMDB0034563; HMDB0036441; HMDB0059601; HMDB0059895; HMDB29639; HMDB29697; HMDB29698; HMDB30839; HMDB31626; HMDB32024; HMDB32142; HMDB32608; HMDB32623; HMDB33716; HMDB34107; HMDB34563; HMDB36441; HMDB59601; HMDB59895			
165	133,0765809	1931,641834	5,6,7,8-Tetrahydroquinoxaline	HMDB0033154; HMDB0034891; HMDB0037148; HMDB0037149; HMDB0039990; HMDB0039991; HMDB0039992; HMDB0039993; HMDB0039994; HMDB0039997; HMDB33154; HMDB34891; HMDB37148; HMDB37149; HMDB39990; HMDB39991; HMDB39992; HMDB39993; HMDB39994; HMDB39997	C8H10N2	-H(-)	100

166	134,0070788	2799,948706	Benzothiazole	CHEBI:45993; HMDB0032930; HMDB32930	C7H5NS	-H(-)	100
167	134,0246472	3719,293424	2-Benzoxazolol	HMDB0032931; HMDB32931	C7H5NO2	-H(-)	100
168	134,0468278	4159,421598	2-Hydroxymethylserine; Adenine	C00147; C03059; C06056; CHEBI:16708; HMDB0000034; HMDB00034; HMDB0029389; HMDB29389	C4H9NO4; C5H5N5	-H(-); -H(-)	100
169	134,0610439	10531,28191	2-Phenylacetamide	C02505; C07565; C15561; C16075; C19714; CHEBI:16562; CHEBI:28884; CHEBI:91110; HMDB0001250; HMDB0010715; HMDB0032628; HMDB0032630; HMDB0037071; HMDB0037072; HMDB0040008; HMDB0040013; HMDB0040222; HMDB0040223; HMDB0040224; HMDB01250; HMDB10715; HMDB32628; HMDB32630; HMDB37071; HMDB37072; HMDB40008; HMDB40013; HMDB40222; HMDB40223; HMDB40224	C8H9NO	-H(-)	100

170	135,030347	52041,69196	Threonate; 1-Pentanesulfenothioic acid; Hypoxanthine	C00262; C01620; CHEBI:15908; CHEBI:17368; CHEBI:37655; CHEBI:40279; CHEBI:49059; HMDB0000157; HMDB0000613; HMDB0000943; HMDB0014581; HMDB00157; HMDB0031160; HMDB0033053; HMDB0033054; HMDB00613; HMDB0062620; HMDB00943; HMDB14581; HMDB31160; HMDB33053; HMDB33054; HMDB62620	C4H8O5; C5H12S2; C5H4N4O	-H(-); -H(-); -H(-)	100
171	135,044864	62410,44251	Phenyl acetate	C00548; C01454; C03765; C05613; C06224; C07085; C07086; C07189; C07211; C07215; C10700; C10761; C14087; C15583; C20645; CHEBI:10589; CHEBI:15621; CHEBI:30745; CHEBI:36632; CHEBI:36635; CHEBI:366673; CHEBI:72775; CHEBI:8082; HMDB0000209; HMDB0002340; HMDB0003767; HMDB00209; HMDB0029635; HMDB0029686; HMDB0031459; HMDB0032400; HMDB0032568; HMDB0032603; HMDB0033128; HMDB0033766; HMDB0033968; HMDB0038176; HMDB0040638; HMDB0040733;	C8H8O2	-H(-)	100

				HMDB0041485; HMDB0062810; HMDB0124942; HMDB0125535; HMDB0126385; HMDB01326; HMDB02340; HMDB03767; HMDB29635; HMDB29686; HMDB31459; HMDB32400; HMDB32568; HMDB32603; HMDB33128; HMDB33766; HMDB33968; HMDB38176; HMDB40638; HMDB40733; HMDB41485; HMDB62810			
172	135,0812328	6269,658362	4-Propylphenol	C14311; CHEBI:38506; HMDB0029667; HMDB0031312; HMDB0031446; HMDB0031627; HMDB0031628; HMDB0032029; HMDB0032149; HMDB0032441; HMDB0032544; HMDB0032621; HMDB0032624; HMDB0032625; HMDB0033962; HMDB0034378; HMDB0038984; HMDB0038985; HMDB0038986; HMDB0038987; HMDB0038988; HMDB0039782; HMDB0059896; HMDB0125105; HMDB29667; HMDB31312; HMDB31446; HMDB31627; HMDB31628; HMDB32029; HMDB32149; HMDB32441; HMDB32544;	C9H12O	-H(-)	100

				HMDB32621; HMDB32624; HMDB32625; HMDB33962; HMDB34378; HMDB38984; HMDB38985; HMDB38986; HMDB38987; HMDB38988; HMDB39782; HMDB59896			
173	135,1171268	1334,651525	D-Limonene	C00521; C06074; C06075; C06076; C06078; C06099; C06307; C06308; C09839; C09873; C09875; C09877; C09880; C09882; C09898; C09900; C11382; C11391; C11392; C19818; C20230; C20241; C20242; CHEBI:10334; CHEBI:10577; CHEBI:129; CHEBI:15382; CHEBI:15383; CHEBI:15384; CHEBI:17221; CHEBI:28359; CHEBI:28660; CHEBI:301; CHEBI:3381; CHEBI:35661; CHEBI:367; CHEBI:36740; CHEBI:3830; CHEBI:48741; CHEBI:50025; CHEBI:50028; CHEBI:50029; CHEBI:50031; CHEBI:50035; CHEBI:53; CHEBI:59159; CHEBI:64266; CHEBI:64280; CHEBI:7; CHEBI:87574; CHEBI:88840; CHEBI:89044; CHEBI:89934; CHEBI:90018;	C10H16	-H(-)	100

				CHEBI:9457; HMDB0003375; HMDB0004321; HMDB0005806; HMDB0006525; HMDB0030088; HMDB0030089; HMDB0032473; HMDB0033200; HMDB0034697; HMDB0034928; HMDB0034970; HMDB0035087; HMDB0035619; HMDB0035625; HMDB0035658; HMDB0035850; HMDB0035851; HMDB0036076; HMDB0036081; HMDB0036104; HMDB0036116; HMDB0036559; HMDB0036560; HMDB0036994; HMDB0036995; HMDB0036997; HMDB0037046; HMDB0038121; HMDB0038150; HMDB0038169; HMDB0041574; HMDB0041633; HMDB0041634; HMDB0059726; HMDB0059839; HMDB0059884; HMDB0061789; HMDB0061790; HMDB0061791; HMDB0061792; HMDB0061793; HMDB0061938; HMDB03375; HMDB04321; HMDB05806; HMDB06525; HMDB30088; HMDB30089; HMDB32473; HMDB33200; HMDB34697; HMDB34928; HMDB34970; HMDB35087; HMDB35619; HMDB35625; HMDB35658; HMDB35850; HMDB35851;			

				HMDB36076; HMDB36081; HMDB36104; HMDB36116; HMDB36559; HMDB36560; HMDB36994; HMDB36995; HMDB36997; HMDB37046; HMDB38121; HMDB38150; HMDB38169; HMDB41574; HMDB41633; HMDB41634; HMDB59726; HMDB59839; HMDB59884; HMDB61789; HMDB61790; HMDB61791; HMDB61792; HMDB61793; HMDB61938			
174	136,0161733	2913,872654	Sodium salicylate	C07587	C7H5O3.	-H(-)	100
175	136,0221435	1716,58745	1H-Pyrrolo[2,1-c][1,4]thiazine	HMDB0040229; HMDB40229	C7H7NS	-H(-)	100
176	136,0404639	5062,937913	Anthranilate	C00108; C00568; C01004; C14394; C19486; C19597; CHEBI:1220323; CHEBI:18123; CHEBI:30753; CHEBI:30754; CHEBI:30761; CHEBI:32114; CHEBI:451700; HMDB0000875;	C7H7NO2	-H(-)	100

				HMDB0001123; HMDB0001392; HMDB0001538; HMDB0001891; HMDB0015687; HMDB0029806; HMDB0060722; HMDB00875; HMDB01123; HMDB01392; HMDB01538; HMDB01891; HMDB02129; HMDB15687; HMDB29806; HMDB60722			
177	136,076323 1	7645,469275	Tyramine	C00483; C01183; C02735; C03473; C16570; C18396; C19216; C19376; CHEBI:15760; CHEBI:16343; CHEBI:17735; CHEBI:341165; CHEBI:55545; HMDB0000306; HMDB0001065; HMDB0001466; HMDB0004989; HMDB0029759; HMDB00306; HMDB0039657; HMDB0040059; HMDB0060681; HMDB01065; HMDB01466; HMDB04989; HMDB29759; HMDB39657; HMDB40059; HMDB60681	C8H11NO	-H(-)	100
178	137,000819 4	3707,227365	Fosfomycin	C06454; CHEBI:28915; HMDB0014966; HMDB14966	C3H7O4P	-H(-)	100
179	137,035628	14002,64353	Urocanate	C00785; C02126; C19345; CHEBI:30817; CHEBI:30818; CHEBI:68572; HMDB0000301;	C6H6N2O 2	-H(-)	100

				HMDB0002730; HMDB00301; HMDB0031338; HMDB0034174; HMDB0061680; HMDB02280; HMDB02730; HMDB31338; HMDB34174; HMDB61680			
180	137,060849	5455,941145	3-Methoxybenzyl alcohol	C03352; C06044; C06728; C07084; C11480; C13638; C20694; CHEBI:1167379; CHEBI:16572; CHEBI:1879; CHEBI:59114; CHEBI:64275; HMDB0004284; HMDB0029563; HMDB0029671; HMDB0029672; HMDB0032036; HMDB0032136; HMDB0032137; HMDB0032139; HMDB0032159; HMDB0032290; HMDB0034241; HMDB0039802; HMDB0040174; HMDB0040177; HMDB0041607; HMDB0125590; HMDB0126388; HMDB04284; HMDB29563; HMDB29671; HMDB29672; HMDB32036; HMDB32136; HMDB32137; HMDB32139; HMDB32159; HMDB32290; HMDB34241; HMDB39802; HMDB40174; HMDB40177; HMDB41607	C8H10O2	-H(-)	100
181	137,07131	4330,386502	4-	C03994; C11765; C19218; HMDB0031850;	C7H10N2	-H(-)	100

	46		Hydroxymethylphenylhydrazine	HMDB0040054; HMDB0040142; HMDB0040144; HMDB0040911; HMDB31850; HMDB40054; HMDB40142; HMDB40144; HMDB40911	O		
182	137,0962548	2242,520925	Isophorone	C08499; C14743; C16323; CHEBI:7610; HMDB0013824; HMDB0031152; HMDB0031195; HMDB0031261; HMDB0031685; HMDB0033434; HMDB0033857; HMDB0035229; HMDB0035929; HMDB0036069; HMDB0036091; HMDB0036092; HMDB0040338; HMDB13824; HMDB31084; HMDB31152; HMDB31195; HMDB31261; HMDB31685; HMDB33434; HMDB33857; HMDB35229; HMDB35929; HMDB36069; HMDB36091; HMDB36092; HMDB40338	C9H14O	-H(-)	100
183	139,0596454	5696,361801	3,4-Diethylthiophene	HMDB0040236; HMDB40236	C8H12S	-H(-)	100
184	139,1126492	2562,558378	(3Z,6Z)-3,6-Nonadien-1-ol	CHEBI:84226; HMDB0030957; HMDB0030958; HMDB0031262; HMDB0031269; HMDB0031834; HMDB0032535; HMDB0033554; HMDB0033794;	C9H16O	-H(-)	100

				HMDB0034758; HMDB0034761; HMDB0034764; HMDB0034845; HMDB0035916; HMDB0035926; HMDB0035927; HMDB0037001; HMDB0037150; HMDB0037170; HMDB0038067; HMDB0038400; HMDB0039461; HMDB0059828; HMDB0062671; HMDB30957; HMDB30958; HMDB31262; HMDB31269; HMDB31834; HMDB32535; HMDB33554; HMDB33794; HMDB34758; HMDB34761; HMDB34764; HMDB34845; HMDB35916; HMDB35926; HMDB35927; HMDB37001; HMDB37150; HMDB37170; HMDB38067; HMDB38400; HMDB39461; HMDB59828; HMDB62671			
185	139,9759031	5112,350787	Carbamoyl phosphate	C00169; CHEBI:17672; HMDB0001096; HMDB01096	CH4NO5P	-H(-)	100
186	139,9940294	2467,932455	Methamidophos	C18667; CHEBI:38721; HMDB0031803; HMDB31803	C2H8NO2PS	-H(-)	100
187	140,0716466	4246,247077	Ethosuximide	C07505; C08287; C10128; C16821; CHEBI:226311; CHEBI:4887; HMDB0014731; HMDB0029427;	C7H11NO2	-H(-)	100

				HMDB0030352; HMDB14731; HMDB29427; HMDB30352			
188	140,0824166	2470,899165	Histidinol	C00860; CHEBI:16255; HMDB0003431; HMDB03431	C6H11N3O	-H(-)	100
189	141,0021017	4231,151419	Thien-2-ylacetate	C02595; HMDB0029719; HMDB0037731; HMDB0037762; HMDB29719; HMDB37731; HMDB37762	C6H6O2S	-H(-)	100
190	141,011634	2665,961045	Methylthiouracil	C19265	C5H6N2OS	-H(-)	76
191	141,0307371	3479,852021	5-Hydroxymethyluracil	C03088; C05133; C05281; CHEBI:16964; HMDB0000469; HMDB00469	C5H6N2O3	-H(-)	100
192	141,0554237	2400,853293	4-Oxocyclohexanecarboxylate	C03767; HMDB0033551; HMDB0033736; HMDB0034230; HMDB0041426; HMDB0041427; HMDB33551; HMDB33736; HMDB34230; HMDB41426; HMDB41427	C7H10O3	-H(-)	100
193	141,0709584	2966,864484	1-Methylnaphthalene	C14082; CHEBI:50717; HMDB0032860; HMDB32860	C11H10	-H(-)	100

194	141,0918498	4785,491158	Cycloheptanecarboxylic acid	C12104; C12297; C16648; C16653; C16654; C19318; C19757; CHEBI:288752; CHEBI:37277; CHEBI:37316; CHEBI:410867; CHEBI:61316; CHEBI:86544; CHEBI:87299; CHEBI:87560; HMDB0000392; HMDB0001568; HMDB0013897; HMDB0013902; HMDB0013903; HMDB0013904; HMDB0029761; HMDB0031293; HMDB0031343; HMDB0031352; HMDB0031403; HMDB0032164; HMDB0032207; HMDB0032266; HMDB0032267; HMDB0032268; HMDB0032278; HMDB0032533; HMDB0035422; HMDB0036212; HMDB0036236; HMDB0037622; HMDB0037624; HMDB0037630; HMDB0038036; HMDB0038310; HMDB00392; HMDB0039793; HMDB0039872; HMDB0040212; HMDB0040215; HMDB0059908; HMDB01568; HMDB10723; HMDB13897; HMDB13902; HMDB13903; HMDB13904; HMDB29761; HMDB31293; HMDB31343; HMDB31352; HMDB31403; HMDB32164; HMDB32207; HMDB32266; HMDB32267; HMDB32268;	C8H14O2	-H(-)	100

				HMDB32278; HMDB32533; HMDB35422; HMDB36212; HMDB36236; HMDB37622; HMDB37624; HMDB37630; HMDB38036; HMDB38310; HMDB39793; HMDB39872; HMDB40212; HMDB40215; HMDB59908			
195	141,1279004	1618,237923	2-Methyl-4-heptanone	CHEBI:59065; CHEBI:77927; CHEBI:84268; HMDB0013821; HMDB0029557; HMDB0030959; HMDB0031266; HMDB0031267; HMDB0031268; HMDB0031417; HMDB0031684; HMDB0031730; HMDB0034152; HMDB0037304; HMDB0040581; HMDB0041498; HMDB0041499; HMDB0041601; HMDB0059835; HMDB0059887; HMDB13821; HMDB13822; HMDB29557; HMDB30959; HMDB31266; HMDB31267; HMDB31268; HMDB31417; HMDB31684; HMDB31730; HMDB34152; HMDB37304; HMDB40581; HMDB41498; HMDB41499; HMDB41601; HMDB59835; HMDB59887	C9H18O	-H(-)	100
196	142,05067	6132,595347	2-	C17357; CHEBI:131804; CHEBI:415036;	C6H9NO3	-H(-)	100

	9		Hydroxymethylclavam	CHEBI:74435; CHEBI:87998; HMDB0000894; HMDB0014491; HMDB0032161; HMDB0061082; HMDB0061705; HMDB00894; HMDB06723; HMDB06724; HMDB14491; HMDB32161; HMDB61082; HMDB61705			
197	142,0663389	10205,5331	6-Methylquinoline	C02227; CHEBI:132813; CHEBI:27878; HMDB0033115; HMDB0041802; HMDB0042004; HMDB33115; HMDB41802; HMDB42004	C10H9N	-H(-)	100
198	142,0870052	2561,256362	(E)-4-(Trimethylammonio)but-2-enoate	C04114; C10172; CHEBI:35280; HMDB0004827; HMDB0030410; HMDB0038949; HMDB04827; HMDB30410; HMDB38949	C7H13NO2	-H(-)	100
199	142,0992846	1741,117491	octanoate radical	CHEBI:25646; HMDB0062511; HMDB0062546; HMDB62511; HMDB62546	C8H15O2	-H(-)	100
200	143,0347215	14948,25722	2,3-Dimethylmaleate	C00922; C01757; C02295; C02930; C19821; C19822; C19826; CHEBI:23812; CHEBI:35460; CHEBI:37245; CHEBI:49296; CHEBI:86952; HMDB0000393; HMDB0000522; HMDB0002266; HMDB0013311; HMDB0029171; HMDB0031257;	C6H8O4	-H(-)	100

				HMDB0036232; HMDB00393; HMDB0040207; HMDB00522; HMDB02266; HMDB03520; HMDB13311; HMDB29171; HMDB31257; HMDB36232; HMDB40207			
201	143,05025 75	4572,758106	2-Naphthol	C11713; C11714; C14786; C14787; CHEBI:10319; CHEBI:10432; CHEBI:34001; CHEBI:52431; HMDB0006215; HMDB0012138; HMDB0012322; HMDB0031001; HMDB0060301; HMDB06215; HMDB12138; HMDB12322; HMDB31001; HMDB60301	C10H8O	-H(-)	100
202	143,05273 03	3684,982095	alpha-EMTBL	C13720; HMDB0031698; HMDB31698	C7H12OS	-H(-)	100
203	143,06083 51	2503,709066	5-Methylquinoxaline	CHEBI:132799; HMDB0033178; HMDB0034175; HMDB33178; HMDB34175	C9H8N2	-H(-)	100
204	143,07132 89	5208,250307	trans-4-Hydroxycyclohexanecarboxylate	C04404; C16590; CHEBI:16817; HMDB0001988; HMDB0031176; HMDB0036594; HMDB0037114; HMDB0040433; HMDB01988; HMDB31176; HMDB36594; HMDB37114; HMDB40433	C7H12O3	-H(-)	100

205	143,0823243	78339,72614	4-Amino-1-piperidinecarboxylic acid	C16837; HMDB0060385; HMDB60385	C6H12N2O2	-H(-)	100
206	143,1075176	65941,60649	Octanoic acid	C06423; C07185; CHEBI:28837; CHEBI:39867; CHEBI:744024; CHEBI:86055; CHEBI:87419; CHEBI:87429; CHEBI:87510; CHEBI:87683; CHEBI:88826; HMDB0000482; HMDB0001877; HMDB0029980; HMDB0030368; HMDB0031230; HMDB0031290; HMDB0031478; HMDB0031579; HMDB0031587; HMDB0031588; HMDB0031596; HMDB0031638; HMDB0031703; HMDB0032046; HMDB0032047; HMDB0032203; HMDB0032225; HMDB0032272; HMDB0032335; HMDB0032551; HMDB0034161; HMDB0034164; HMDB0034234; HMDB0034459; HMDB0035457; HMDB0036165; HMDB0039217; HMDB0039620; HMDB0040209; HMDB0040251; HMDB0040252; HMDB0040296; HMDB0040298; HMDB00482; HMDB0061931; HMDB01877; HMDB29980; HMDB30368;	C8H16O2	-H(-)	100

				HMDB31230; HMDB31290; HMDB31478; HMDB31579; HMDB31587; HMDB31588; HMDB31596; HMDB31638; HMDB31703; HMDB32046; HMDB32047; HMDB32203; HMDB32225; HMDB32272; HMDB32335; HMDB32551; HMDB34161; HMDB34164; HMDB34234; HMDB34459; HMDB35457; HMDB36165; HMDB39217; HMDB39620; HMDB40209; HMDB40251; HMDB40252; HMDB40296; HMDB40298; HMDB61931			
207	144,0301784	2206,192193	2-Oxoglutaramate	C00940; C05572; CHEBI:30882; HMDB0001552; HMDB01552	C5H7NO4	-H(-)	100
208	144,0458103	26843,74042	3-Methyleneoxindole	C02796; C06324; C06338; C06343; C06415; C08493; C19434; CHEBI:343043; HMDB0029737; HMDB29737	C9H7NO	-H(-)	100
209	144,0670373	6854,754644	4-Acetamidobutanoate	C01475; C02946; C03239; C03656; C04076; C05825; CHEBI:17027; CHEBI:17534; CHEBI:17645; CHEBI:17917; CHEBI:27713;	C6H11NO3	-H(-)	100

				CHEBI:70979; CHEBI:724125; CHEBI:74048; CHEBI:89963; HMDB0000730; HMDB0000808; HMDB0001263; HMDB0003681; HMDB0012131; HMDB0012151; HMDB0015127; HMDB0029425; HMDB0029426; HMDB0059595; HMDB0060265; HMDB0061156; HMDB00730; HMDB00808; HMDB0094698; HMDB01263; HMDB03681; HMDB06238; HMDB12131; HMDB12151; HMDB15127; HMDB29425; HMDB29426; HMDB59595; HMDB60265; HMDB61156; HMDB94698			
210	144,0859209	7214,825151	(±)-2-Butylthiazolidine	HMDB0040116; HMDB0040117; HMDB40116; HMDB40117	C7H15NS	-H(-)	100
211	145,0144492	3902,435265	Oxoglutarate; Di-2-propenyl disulfide, 9CI	C00026; C03716; C05406; C06030; C06316; C08369; CHEBI:30915; CHEBI:4488; CHEBI:87810; HMDB0000208; HMDB0013701; HMDB00208; HMDB0033966; HMDB0041390; HMDB0041393; HMDB0062739; HMDB02812; HMDB13701;	C5H6O5; C6H10S2	-H(-); -H(-)	100

				HMDB33966; HMDB41390; HMDB41393; HMDB62739			
212	145,0504402	14312,63183	2-Methylglutaric acid	C00659; C00772; C00966; C01053; C04237; C06006; C06104; C06762; C13811; C14463; C16272; CHEBI:1007322; CHEBI:27681; CHEBI:30832; CHEBI:68566; CHEBI:68567; CHEBI:86537; CHEBI:89760; HMDB0000422; HMDB0000448; HMDB0000752; HMDB0000858; HMDB0002074; HMDB0002173; HMDB0006900; HMDB0033837; HMDB00422; HMDB00448; HMDB0061930; HMDB00752; HMDB00858; HMDB02074; HMDB02173; HMDB04862; HMDB06854; HMDB06900; HMDB33837; HMDB61930	C6H10O4	-H(-)	100
213	145,0619945	240628,6843	Glutamine	C00064; C00303; C00819; C05100; C16673; CHEBI:1670; CHEBI:17061; CHEBI:18050; CHEBI:185249; HMDB0000641; HMDB0002031; HMDB0003423; HMDB0006899; HMDB0028687; HMDB00641; HMDB02031; HMDB03423;	C5H10N2O3	-H(-)	100

				HMDB06899; HMDB28687			
214	145,0979375	123794,2949	Lysine	C00047; C00739; C01142; C01186; C05161; C16440; C20277; CHEBI:15613; CHEBI:15616; CHEBI:16855; CHEBI:18019; HMDB0000182; HMDB0003405; HMDB0012114; HMDB0012115; HMDB00182; HMDB0142894; HMDB03405; HMDB12114; HMDB12115	C6H14N2O2	-H(-)	100
215	146,0248117	5922,27479	Indole-5,6-quinone	C05579; C11129; CHEBI:27406; CHEBI:27539; HMDB0006779; HMDB0030481; HMDB0061933; HMDB06779; HMDB30481; HMDB61933	C8H5NO2	-H(-)	100
216	146,0460807	39188,7166	Glutamate	C00025; C00217; C00302; C00979; C03618; C03790; C05574; C05938; C05941; C12269; CHEBI:15966; CHEBI:16015; CHEBI:17981; CHEBI:18237; CHEBI:27809; CHEBI:31882; CHEBI:45441; HMDB0000148; HMDB0002393; HMDB0002931; HMDB0003011; HMDB0003339; HMDB0006556; HMDB00148; HMDB0033550; HMDB0060475; HMDB0062183; HMDB02393; HMDB02931; HMDB03011; HMDB03339;	C5H9NO4	-H(-)	100

				HMDB06556; HMDB33550; HMDB60475; HMDB62183			
217	146,0648367	19750,66386	5-Methylthiopentanaldoxime	C17245	C6H13NOS	-H(-)	100
218	146,0819495	10257,95377	(2R,3R,4R)-2-Amino-4-hydroxy-3-methylpentanoic acid	C10144; C20310; C20802; CHEBI:435538; CHEBI:4969; HMDB0029449; HMDB0033453; HMDB0061157; HMDB0142963; HMDB29449; HMDB33453; HMDB61157	C6H13NO3	-H(-)	100
219	147,0297112	13531,40342	Hydroxyglutarate	C00652; C00684; C00815; C01087; C01114; C02266; C02612; C02614; C02630; C02674; C02753; C02994; C03196; C03826; C05405; C06029; C06031; C06032; CHEBI:15584; CHEBI:15867; CHEBI:17084; CHEBI:32796; CHEBI:32797; CHEBI:707706; HMDB0000426; HMDB0000428; HMDB0000606; HMDB0000694; HMDB0001900; HMDB0011676; HMDB00426;	C5H8O5	-H(-)	100

				HMDB00428; HMDB0059655; HMDB00606; HMDB00694; HMDB01900; HMDB02323; HMDB11676; HMDB59655			
220	147,0451459	16311,3043	Cinnamate	C00423; C02274; C05608; C07720; C07728; C10438; C17268; CHEBI:16151; CHEBI:28353; CHEBI:35697; CHEBI:35699; CHEBI:63552; HMDB0000567; HMDB0000930; HMDB0031725; HMDB0032947; HMDB0035243; HMDB0036626; HMDB0040986; HMDB00567; HMDB00930; HMDB0128078; HMDB0134039; HMDB0135273; HMDB0135274; HMDB0135275; HMDB0135648; HMDB31725; HMDB32947; HMDB35243; HMDB36626; HMDB40986	C9H8O2	-H(-)	100
221	147,066681	7841,744495	Mevalonate	C00418; C00522; C02104; C03348; C04104; C06007; C06471; CHEBI:17710; CHEBI:25351; CHEBI:27512; CHEBI:67255; HMDB0000227; HMDB0012140; HMDB00227; HMDB0031639; HMDB0059629; HMDB0059705; HMDB12140; HMDB31639; HMDB59629; HMDB59705	C6H12O4	-H(-)	100

222	147,0816073	6212,418197	Cuminaldehyde	C06577; C10428; C10452; C14309; C17965; CHEBI:366706; CHEBI:992716; HMDB0002214; HMDB0030837; HMDB0031616; HMDB0032014; HMDB0032015; HMDB0032016; HMDB0032017; HMDB0032140; HMDB0033382; HMDB0034121; HMDB0059845; HMDB0133593; HMDB0133746; HMDB02214; HMDB30837; HMDB31616; HMDB32014; HMDB32015; HMDB32016; HMDB32017; HMDB32140; HMDB33382; HMDB34121; HMDB59845	C10H12O	-H(-)	100
223	147,0923452	2545,972207	Nornicotine	C06524; CHEBI:28313; HMDB0001126; HMDB0034892; HMDB0036142; HMDB0039831; HMDB0039832; HMDB0039983; HMDB0039984; HMDB0039985; HMDB0039986; HMDB0039987; HMDB0039988; HMDB01126; HMDB34892; HMDB36142; HMDB39831; HMDB39832; HMDB39983; HMDB39984; HMDB39985; HMDB39986; HMDB39987; HMDB39988	C9H12N2	-H(-)	100
224	148,02566	1610,709902	erythro-3-	C03961; C11511; C19813; C19838;	C4H7NO5;	-H(-); -H(-)	100

	36		Hydroxy-Ls-aspartate; Dihydro-4,6-dimethyl-4H-1,3,5-dithiazine	HMDB0039817; HMDB39817	C5H11NS2		
225	148,0438616	10219,84888	Methionine	C00073; C00855; C01733; C07418; CHEBI:16643; CHEBI:16811; CHEBI:50868; HMDB0000696; HMDB0014997; HMDB0033951; HMDB00696; HMDB14997; HMDB33951	C5H11NO2S	-H(-)	100
226	148,0616703	2903,244513	Dihydroxy-Val	C20314	C5H11NO4	-H(-)	100
227	148,076694	2614,314273	Venoterpine	C08301; C17236; HMDB0030175; HMDB0039662; HMDB0040016; HMDB0040029; HMDB0040043; HMDB0040047; HMDB0040050; HMDB0040051; HMDB30175; HMDB39662; HMDB40016; HMDB40029; HMDB40043; HMDB40047; HMDB40050; HMDB40051	C9H11NO	-H(-)	100
228	149,00959	32499,78795	Tartaric	C00552; C00898; C02107; CHEBI:15672;	C4H6O6;	-H(-); -H(-)	100

	37		acid; 2-Methyl-2-(methyldithio)propanal	CHEBI:15674; HMDB0029878; HMDB0038889; HMDB0059916; HMDB29878; HMDB38889; HMDB59916	C5H10OS2		
229	149,0455455	22061,75955	Pentose; Diisopropyl disulfide	C00121; C00181; C00216; C00259; C00309; C00310; C00312; C00476; C00508; C01394; C01488; C01508; C01510; C02096; C02204; C02205; C02479; C02604; C05052; C06115; C08346; C08353; C08354; C08373; C11476; C16639; C20569; CHEBI:15936; CHEBI:16880; CHEBI:16988; CHEBI:17140; CHEBI:17173; CHEBI:17399; CHEBI:17535; CHEBI:27476; CHEBI:27672; CHEBI:28272; CHEBI:45758; CHEBI:46983; CHEBI:53455; CHEBI:6178; CHEBI:86350; CHEBI:89890; HMDB0000098; HMDB0000283; HMDB0000366; HMDB0000621; HMDB0000646; HMDB0000751; HMDB0001644; HMDB0003371; HMDB00098; HMDB0012194; HMDB0012325; HMDB00283; HMDB0029578;	C5H10O5; C6H14S2	-H(-); -H(-)	100

				HMDB0029941; HMDB0029942; HMDB0031161; HMDB0031472; HMDB0031709; HMDB0032180; HMDB0032408; HMDB00366; HMDB0040056; HMDB00487; HMDB0059753; HMDB0060254; HMDB00621; HMDB00646; HMDB00654; HMDB00751; HMDB0094694; HMDB0127617; HMDB01644; HMDB02245; HMDB03371; HMDB03763; HMDB12194; HMDB12325; HMDB29578; HMDB29941; HMDB29942; HMDB31161; HMDB31472; HMDB31709; HMDB32180; HMDB32408; HMDB40056; HMDB59753; HMDB60254; HMDB94694			
230	149,0604557	7526,333467	Hydrocinnamic acid	C01839; C01963; C02646; C05629; C13342; C15513; C16706; C17883; C19291; C20697; CHEBI:262555; CHEBI:28631; CHEBI:32807; CHEBI:329287; CHEBI:389009; CHEBI:42438; CHEBI:48526; CHEBI:52051; CHEBI:64555; CHEBI:64818; CHEBI:86567; CHEBI:87417; HMDB0000764; HMDB0002097; HMDB0002222;	C9H10O2	-H(-)	100

				HMDB0002237; HMDB0003654; HMDB0011743; HMDB0013744; HMDB0031310; HMDB0032073; HMDB0032075; HMDB0032569; HMDB0032570; HMDB0032592; HMDB0032617; HMDB0033967; HMDB0033970; HMDB0037715; HMDB0038355; HMDB0040428; HMDB0040925; HMDB0059824; HMDB0062349; HMDB00764; HMDB0125532; HMDB0134026; HMDB0134027; HMDB0135239; HMDB0135276; HMDB0135277; HMDB0135278; HMDB0135279; HMDB0135280; HMDB0135281; HMDB0135644; HMDB02097; HMDB02222; HMDB02237; HMDB03654; HMDB11743; HMDB13744; HMDB31310; HMDB32073; HMDB32075; HMDB32569; HMDB32570; HMDB32592; HMDB32617; HMDB33967; HMDB33970; HMDB37715; HMDB38355; HMDB40428; HMDB40925; HMDB59824; HMDB62349			
231	149,07226	4915,183787	6-	C17512; C19680; CHEBI:88954; HMDB0013704;	C8H10N2	-H(-)	100

	88		Methylnicotinamide	HMDB0029410; HMDB0038513; HMDB0039998; HMDB0039999; HMDB13704; HMDB29410; HMDB38513; HMDB39998; HMDB39999	O		
232	149,0975626	16835,57504	Thymol	C01767; C01868; C01951; C02289; C02485; C02576; C06576; C09840; C09843; C09868; C09884; C09908; C09911; C09913; C11383; C11394; C11939; C14130; C14138; C14139; C14188; C14200; C14464; C14741; C16955; C17062; C18025; CHEBI:15399; CHEBI:15400; CHEBI:15421; CHEBI:17304; CHEBI:27607; CHEBI:28996; CHEBI:3440; CHEBI:34444; CHEBI:37001; CHEBI:38265; CHEBI:50542; CHEBI:53169; HMDB0001878; HMDB0003647; HMDB0004487; HMDB0029652; HMDB0031570; HMDB0031613; HMDB0031817; HMDB0032063; HMDB0032213; HMDB0032626; HMDB0033544; HMDB0034846; HMDB0034921; HMDB0035089; HMDB0035172; HMDB0035250; HMDB0035591; HMDB0035761; HMDB0035770; HMDB0035824;	C10H14O	-H(-)	100

				HMDB0036061; HMDB0036070; HMDB0036089; HMDB0036999; HMDB0037561; HMDB0038913; HMDB0061788; HMDB0133616; HMDB01878; HMDB03647; HMDB04487; HMDB06315; HMDB29652; HMDB31570; HMDB31613; HMDB31817; HMDB32063; HMDB32213; HMDB32626; HMDB33544; HMDB34846; HMDB34921; HMDB35089; HMDB35172; HMDB35250; HMDB35591; HMDB35761; HMDB35770; HMDB35824; HMDB36061; HMDB36070; HMDB36089; HMDB36999; HMDB37561; HMDB38913; HMDB61788			
233	150,0235073	3489,740857	(S)C(S)S-S-Methylcysteine sulfoxide	HMDB0029432; HMDB29432	C4H9NO3S	-H(-)	100
234	150,0558867	78781,92751	Acetaminophen	C02709; C03005; C03522; C04350; C04353; C06804; C07301; C16571; C17755; C17756; C18623; C20634; CHEBI:1017870; CHEBI:16394; CHEBI:46195; CHEBI:55484; CHEBI:74684;	C8H9NO2	-H(-)	100

				HMDB0001859; HMDB0002210; HMDB0012219; HMDB0012992; HMDB0029703; HMDB0032609; HMDB0033903; HMDB0059846; HMDB0060680; HMDB0061919; HMDB01859; HMDB02210; HMDB12219; HMDB12992; HMDB29703; HMDB32609; HMDB33903; HMDB59846; HMDB60680; HMDB61919			
235	150,9889973	3321,27562	Oxidized dithiothreitol	C01119; C04371; C06484; CHEBI:17919; CHEBI:42147; HMDB0033670; HMDB0035716; HMDB0059664; HMDB33670; HMDB35716; HMDB59664	C4H8O2S2	-H(-)	100
236	151,0263273	47017,43165	Xanthine	C00385; C07599; CHEBI:17712; CHEBI:28315; HMDB0000292; HMDB0000786; HMDB0001182; HMDB00292; HMDB00786; HMDB01182	C5H4N4O2	-H(-)	100
237	151,0326883	14043,76455	5,7-Dihydro-2-methylthieno[3,4-d]pyrimidine	HMDB0041565; HMDB41565	C7H8N2S	-H(-)	100

238	151,0404748	59560,26807	p-Hydroxyphenylacetic acid	C00642; C00755; C01983; C01984; C02181; C02519; C02639; C02657; C03663; C04043; C05593; C05852; C10675; C10804; C12064; C12305; C13635; C13636; C14088; C14103; C14108; C17900; CHEBI:17445; CHEBI:17656; CHEBI:18101; CHEBI:18346; CHEBI:18414; CHEBI:20141; CHEBI:27978; CHEBI:28478; CHEBI:31128; CHEBI:31832; CHEBI:31835; CHEBI:32800; CHEBI:35164; CHEBI:40813; CHEBI:421840; CHEBI:491876; CHEBI:559127; CHEBI:574890; CHEBI:8075; CHEBI:85239; HMDB0000020; HMDB0000440; HMDB0000669; HMDB0000703; HMDB0001101; HMDB00020; HMDB0002390; HMDB0003791; HMDB0004815; HMDB0012308; HMDB0029657; HMDB0029658; HMDB0029659; HMDB0029660; HMDB0029661; HMDB0029662; HMDB0031609; HMDB0032399; HMDB0032572; HMDB0032594; HMDB0032604; HMDB0032606; HMDB0032629; HMDB0032919; HMDB0033003; HMDB0034172; HMDB0036907;	C8H8O3	-H(-)	100

				HMDB0041283; HMDB00440; HMDB0060390; HMDB0062635; HMDB00669; HMDB00703; HMDB01101; HMDB0124926; HMDB0125528; HMDB0137457; HMDB02390; HMDB03791; HMDB04815; HMDB06256; HMDB06778; HMDB12308; HMDB29657; HMDB29658; HMDB29659; HMDB29660; HMDB29661; HMDB29662; HMDB31609; HMDB32399; HMDB32572; HMDB32594; HMDB32604; HMDB32606; HMDB32629; HMDB32919; HMDB33003; HMDB34172; HMDB36907; HMDB41283; HMDB60390; HMDB62635			
239	151,0602347	16306,09262	Ribitol	C00379; C00474; C00532; C01569; C01904; CHEBI:1305691; CHEBI:15963; CHEBI:18403; CHEBI:48310; CHEBI:893310; HMDB0000508; HMDB0000568; HMDB0001851; HMDB0002917; HMDB00199; HMDB0033730; HMDB00508; HMDB00568; HMDB01851; HMDB02917; HMDB33730	C5H12O5	-H(-)	100

240	151,1131415	5120,938726	(-)-trans-Carveol	C00808; C00809; C00964; C01123; C01499; C02213; C02452; C02759; C04435; C07271; C09847; C09859; C09885; C09893; C09906; C11387; C11395; C11398; C11401; C11408; C11409; C11412; C11415; C11938; C11941; C11942; C11951; C17623; C18018; C18369; C19081; C20260; C20425; CHEBI:10782; CHEBI:15388; CHEBI:15389; CHEBI:15396; CHEBI:15420; CHEBI:16431; CHEBI:168; CHEBI:16980; CHEBI:227; CHEBI:23046; CHEBI:232; CHEBI:23733; CHEBI:26137; CHEBI:26381; CHEBI:29020; CHEBI:29060; CHEBI:35596; CHEBI:37046; CHEBI:41; CHEBI:48697; CHEBI:48933; CHEBI:48934; CHEBI:4999; CHEBI:50040; CHEBI:50045; CHEBI:50046; CHEBI:53177; CHEBI:87568; CHEBI:89872; CHEBI:9577; HMDB0003450; HMDB0003634; HMDB0003667; HMDB0030892; HMDB0030893; HMDB0031854; HMDB0032120; HMDB0032242; HMDB0032536; HMDB0034715;	C10H16O	-H(-)	100

				HMDB0034916; HMDB0034973; HMDB0034974; HMDB0034975; HMDB0034985; HMDB0035054; HMDB0035077; HMDB0035078; HMDB0035092; HMDB0035100; HMDB0035120; HMDB0035125; HMDB0035158; HMDB0035203; HMDB0035241; HMDB0035277; HMDB0035280; HMDB0035600; HMDB0035604; HMDB0035622; HMDB0035656; HMDB0035706; HMDB0035737; HMDB0035738; HMDB0035741; HMDB0035743; HMDB0035744; HMDB0036044; HMDB0036079; HMDB0036080; HMDB0036082; HMDB0036083; HMDB0036085; HMDB0036087; HMDB0036088; HMDB0036113; HMDB0036114; HMDB0036115; HMDB0036127; HMDB0036128; HMDB0036129; HMDB0036598; HMDB0037008; HMDB0037009; HMDB0037010; HMDB0037015; HMDB0037017; HMDB0037024; HMDB0037025; HMDB0037172; HMDB0037280; HMDB0037302; HMDB0037303; HMDB0038251; HMDB0038290; HMDB0038557; HMDB0039008; HMDB0039816; HMDB0040766; HMDB0041011;			

				HMDB0041013; HMDB0041631; HMDB0059608; HMDB0059761; HMDB0059827; HMDB0059838; HMDB0059875; HMDB0059885; HMDB0061794; HMDB03450; HMDB03634; HMDB03667; HMDB06291; HMDB06410; HMDB30892; HMDB30893; HMDB31854; HMDB32120; HMDB32242; HMDB32536; HMDB34715; HMDB34916; HMDB34973; HMDB34974; HMDB34975; HMDB34985; HMDB35054; HMDB35077; HMDB35078; HMDB35092; HMDB35100; HMDB35120; HMDB35125; HMDB35158; HMDB35203; HMDB35241; HMDB35277; HMDB35280; HMDB35600; HMDB35604; HMDB35622; HMDB35656; HMDB35706; HMDB35737; HMDB35738; HMDB35741; HMDB35743; HMDB35744; HMDB36044; HMDB36079; HMDB36080; HMDB36082; HMDB36083; HMDB36085; HMDB36087; HMDB36088; HMDB36113; HMDB36114; HMDB36115; HMDB36127;			

				HMDB36128; HMDB36129; HMDB36598; HMDB37008; HMDB37009; HMDB37010; HMDB37015; HMDB37017; HMDB37024; HMDB37025; HMDB37172; HMDB37280; HMDB37302; HMDB37303; HMDB38251; HMDB38290; HMDB38557; HMDB39008; HMDB39816; HMDB40766; HMDB41011; HMDB41013; HMDB41631; HMDB59608; HMDB59761; HMDB59827; HMDB59838; HMDB59875; HMDB59885; HMDB61794			
241	152,0015158	3618,535468	3-Sulfinoalanine	C00606; CHEBI:16345; CHEBI:41721; HMDB0000996; HMDB0060179; HMDB00996; HMDB60179	C3H7NO4S	-H(-)	100
242	152,0115103	2304,428315	Fosamine	C18789	C3H8NO4P	-H(-)	100
243	152,017675	2158,098623	Thiobenzamide S-oxide	C16283	C7H7NOS	-H(-)	100
244	152,0716302	3129,74345	Dopamine	C03758; C04227; C16666; CHEBI:18243; CHEBI:44715; CHEBI:46958; HMDB0000073;	C8H11NO2	-H(-)	100

				HMDB0004825; HMDB00073; HMDB0012309; HMDB04825; HMDB12309			
245	152,1075635	1381,650503	psi-Pelletierine	C10865; HMDB0034580; HMDB0037856; HMDB0037857; HMDB0037862; HMDB0037872; HMDB0037873; HMDB0037874; HMDB0037875; HMDB0037876; HMDB0037878; HMDB0037879; HMDB0037880; HMDB0037881; HMDB0037882; HMDB34580; HMDB37856; HMDB37857; HMDB37862; HMDB37872; HMDB37873; HMDB37874; HMDB37875; HMDB37876; HMDB37878; HMDB37879; HMDB37880; HMDB37881; HMDB37882	C9H15NO	-H(-)	100
246	152,9684522	1231,272467	(E)-S-1-Propenyl thiosulfate	HMDB0041079; HMDB41079	C3H6O3S2	-H(-)	100
247	153,0196613	11542,31558	Gentisic acid	C00196; C00230; C00628; C16748; CHEBI:17189; CHEBI:18026; CHEBI:248101; CHEBI:258254; CHEBI:36062; CHEBI:545917; HMDB0000152; HMDB0000397; HMDB0001856; HMDB0013676;	C7H6O4	-H(-)	100

				HMDB0013677; HMDB00152; HMDB0029666; HMDB0034299; HMDB00397; HMDB0125090; HMDB01856; HMDB13676; HMDB13677; HMDB29666; HMDB34299			
248	153,03054 86	8600,152473	5-(2-carboxylatoethyl)-4-oxo-4,5-dihydro-1H-imidazol-5-ide	C03277; C03762; C19321; C19322; C19323; HMDB0062719; HMDB62719	C6H6N2O 3	-H(-)	100
249	153,05553 42	3450,614871	Hydroxytyrosol	C06317; C10787; CHEBI:18353; CHEBI:68889; CHEBI:955; HMDB0005784; HMDB0030570; HMDB0032012; HMDB0034158; HMDB0037724; HMDB0037728; HMDB0059966; HMDB0125534; HMDB0126617; HMDB0131231; HMDB0131232; HMDB0131479; HMDB0135785; HMDB05784; HMDB30570; HMDB32012; HMDB34158; HMDB37724; HMDB37728; HMDB59966	C8H10O3	-H(-)	100

250	153,0924974	3808,884793	C9:2	C09772; CHEBI:58972; HMDB0031302; HMDB0032314; HMDB0032442; HMDB0035135; HMDB0036177; HMDB0036239; HMDB0037276; HMDB0038268; HMDB0038697; HMDB0040285; HMDB0060285; HMDB31302; HMDB32314; HMDB32442; HMDB35135; HMDB36177; HMDB36239; HMDB37276; HMDB38268; HMDB38697; HMDB40285; HMDB60285	C9H14O2	-H(-)	100
251	153,1285751	1780,127117	Alpha-Terpineol	C00843; C01411; C01500; C01765; C01766; C02344; C02462; C02484; C03039; C03985; C09844; C09848; C09871; C09902; C11384; C11388; C11389; C11390; C11393; C11396; C11397; C11399; C11400; C11410; C11411; C11413; C11416; C11952; C16772; C16909; C17073; C17125; C17384; C17517; C17518; C17611; C18017; C20261; CHEBI:128; CHEBI:132848; CHEBI:149; CHEBI:15393; CHEBI:15394; CHEBI:15410; CHEBI:17447; CHEBI:17580; CHEBI:28; CHEBI:29452;	C10H18O	-H(-)	100

				CHEBI:299; CHEBI:300; CHEBI:31; CHEBI:36496; CHEBI:36742; CHEBI:368; CHEBI:47856; CHEBI:50281; CHEBI:546198; CHEBI:584235; CHEBI:78884; CHEBI:87529; CHEBI:90075; CHEBI:98; HMDB0004043; HMDB0004472; HMDB0005812; HMDB0030999; HMDB0031410; HMDB0032118; HMDB0032530; HMDB0034848; HMDB0034932; HMDB0034969; HMDB0034972; HMDB0034976; HMDB0035155; HMDB0035162; HMDB0035272; HMDB0035783; HMDB0035815; HMDB0035818; HMDB0035819; HMDB0035820; HMDB0035823; HMDB0035825; HMDB0035833; HMDB0035838; HMDB0035841; HMDB0035842; HMDB0035861; HMDB0035954; HMDB0035955; HMDB0036041; HMDB0036068; HMDB0036077; HMDB0036078; HMDB0036086; HMDB0036096; HMDB0036097; HMDB0036100; HMDB0036101; HMDB0036102; HMDB0036107; HMDB0036112; HMDB0036126; HMDB0036196; HMDB0036991; HMDB0036993; HMDB0036996; HMDB0037006;			

				HMDB0037007; HMDB0037016; HMDB0037019; HMDB0037047; HMDB0037048; HMDB0037049; HMDB0037133; HMDB0037161; HMDB0037214; HMDB0037215; HMDB0038025; HMDB0038185; HMDB0040448; HMDB0041014; HMDB0041034; HMDB0059864; HMDB0059869; HMDB0059881; HMDB0061802; HMDB02267; HMDB04043; HMDB04472; HMDB05804; HMDB05812; HMDB30999; HMDB31410; HMDB32118; HMDB32530; HMDB34848; HMDB34932; HMDB34969; HMDB34972; HMDB34976; HMDB35155; HMDB35162; HMDB35272; HMDB35614; HMDB35783; HMDB35815; HMDB35818; HMDB35819; HMDB35820; HMDB35823; HMDB35825; HMDB35833; HMDB35838; HMDB35841; HMDB35842; HMDB35861; HMDB35954; HMDB35955; HMDB36041; HMDB36068; HMDB36077; HMDB36078; HMDB36086; HMDB36096; HMDB36097; HMDB36100; HMDB36101;			

				HMDB36102; HMDB36107; HMDB36112; HMDB36126; HMDB36196; HMDB36991; HMDB36993; HMDB36996; HMDB37006; HMDB37007; HMDB37016; HMDB37019; HMDB37047; HMDB37048; HMDB37049; HMDB37133; HMDB37161; HMDB37214; HMDB37215; HMDB38025; HMDB38185; HMDB40448; HMDB41014; HMDB41034; HMDB59864; HMDB59869; HMDB59881; HMDB61802			
252	154,0515817	4864,88631	(3S,5S)-Carbapenam-3-carboxylic acid	C17367; C19830; C19831	C7H9NO3	-H(-)	100
253	154,0624554	132564,1447	Histidine	C00135; C00768; C01162; C06419; CHEBI:15971; HMDB0000177; HMDB00177; HMDB0034267; HMDB03412; HMDB34267	C6H9N3O2	-H(-)	100
254	154,99921	2983,812288	2,5-	C20450; CHEBI:84212; HMDB0004812;	C6H4O5;	-H(-); -H(-)	100

	37		Furandicarboxylic acid; Methyl phenyl disulfide	HMDB0040939; HMDB00578; HMDB04812; HMDB40939	C7H8S2		
255	155,016245	2923,529904	3-(Acetylthio)-2-methylfuran	HMDB0032160; HMDB0032334; HMDB0035088; HMDB32160; HMDB32334; HMDB35088	C7H8O2S	-H(-)	100
256	155,028998 2	3017,951547	Thio-THIP	C13711	C6H8N2OS	-H(-)	100
257	155,046373 2	6165,020333	5-Hydroxymethyl-4-methyluracil	C03680; C03817; C05132; C05568; C19481; CHEBI:27384; CHEBI:27487; HMDB0000544; HMDB0001014; HMDB0002320; HMDB00544; HMDB01014; HMDB02320	C6H8N2O3	-H(-)	100
258	155,070703 8	8106,444482	8-Hydroxy-5,6-octadienoic acid	HMDB0031101; HMDB0032232; HMDB31101; HMDB32232	C8H12O3	-H(-)	100

259	155,107293	9159,803647	C9:1	C02445; C08471; C08501; CHEBI:206353; CHEBI:58968; CHEBI:87682; HMDB0004362; HMDB0031263; HMDB0031271; HMDB0031514; HMDB0031531; HMDB0032265; HMDB0032307; HMDB0032413; HMDB0032491; HMDB0033167; HMDB0034716; HMDB0035307; HMDB0036208; HMDB0036222; HMDB0037023; HMDB0037496; HMDB0037618; HMDB0037629; HMDB0038272; HMDB0038275; HMDB0039736; HMDB0039794; HMDB0040210; HMDB0059728; HMDB0059817; HMDB0059840; HMDB0059894; HMDB0060286; HMDB04362; HMDB31263; HMDB31271; HMDB31514; HMDB31531; HMDB32265; HMDB32307; HMDB32413; HMDB32491; HMDB33167; HMDB34716; HMDB35307; HMDB36208; HMDB36222; HMDB37023; HMDB37496; HMDB37618; HMDB37629; HMDB38272; HMDB38275; HMDB39736; HMDB39794; HMDB40210; HMDB59728; HMDB59817; HMDB59840; HMDB59894;	C9H16O2	-H(-)	100

				HMDB60286			
260	155,1432142	1861,283838	Menthol	C00400; C00553; C09849; C11386; C12307; CHEBI:10360; CHEBI:15402; CHEBI:15409; CHEBI:18451; CHEBI:25187; CHEBI:31457; CHEBI:77929; CHEBI:87309; CHEBI:88; CHEBI:89175; HMDB0003352; HMDB0011623; HMDB0013810; HMDB0031409; HMDB0032206; HMDB0032212; HMDB0032241; HMDB0032274; HMDB0032532; HMDB0034717; HMDB0035093; HMDB0035094; HMDB0035726; HMDB0035763; HMDB0035764; HMDB0035765; HMDB0037020; HMDB0037171; HMDB0037223; HMDB0037806; HMDB0039854; HMDB0041628; HMDB0059861; HMDB03352; HMDB11623; HMDB13810; HMDB31409; HMDB32206; HMDB32212; HMDB32241; HMDB32274; HMDB32532; HMDB34717; HMDB35093; HMDB35094; HMDB35726; HMDB35763; HMDB35764; HMDB35765; HMDB37020; HMDB37171;	C10H20O	-H(-)	100

				HMDB37223; HMDB37806; HMDB39854; HMDB41628; HMDB59861			
261	157,0507713	4836,824898	Isopropylmaleate	C02631; C04670; C04815; C05126; CHEBI:17275; CHEBI:87897; HMDB0000635; HMDB0012241; HMDB0036380; HMDB0059815; HMDB00635; HMDB12241; HMDB36380; HMDB59815	C7H10O4	-H(-)	100
262	157,0617074	5621,03943	1-(Hydroxymethyl)-5,5-dimethyl-2,4-imidazolidinedione	C01109; C16432; HMDB0031670; HMDB31670	C6H10N2O3	-H(-)	100
263	157,0866813	7549,410114	cis-4-Hydroxycyclohexylacetic acid	C02975; C16652; C16655; CHEBI:18119; CHEBI:44680; CHEBI:80638; CHEBI:84261; CHEBI:88508; CHEBI:89344; HMDB0000451; HMDB0000909; HMDB0010721; HMDB0013211; HMDB0030303; HMDB0031177; HMDB0031307; HMDB0036230; HMDB0036395; HMDB0038305;	C8H14O3	-H(-)	100

				HMDB0040447; HMDB0041616; HMDB00451; HMDB0059938; HMDB0059939; HMDB0060683; HMDB0060685; HMDB0062788; HMDB00909; HMDB10721; HMDB13211; HMDB30303; HMDB31177; HMDB31307; HMDB36230; HMDB36395; HMDB38305; HMDB40447; HMDB41616; HMDB59938; HMDB59939; HMDB60683; HMDB60685; HMDB62788			
264	157,12312 47	22778,04236	Oenanthic ether	C01601; CHEBI:29019; CHEBI:86618; CHEBI:87365; CHEBI:87422; CHEBI:87432; CHEBI:87496; CHEBI:87537; CHEBI:87549; HMDB0000798; HMDB0000847; HMDB0030331; HMDB0031291; HMDB0031480; HMDB0031557; HMDB0032042; HMDB0032309; HMDB0032406; HMDB0032454; HMDB0034162; HMDB0034165; HMDB0034606; HMDB0036234; HMDB0037143; HMDB0037164; HMDB0037288; HMDB0038040; HMDB0038603; HMDB0039216; HMDB0039219; HMDB0040221; HMDB0040295; HMDB0040430;	C9H18O2	-H(-)	100

				HMDB0059822; HMDB00798; HMDB00847; HMDB30331; HMDB31291; HMDB31480; HMDB31557; HMDB32042; HMDB32309; HMDB32406; HMDB32454; HMDB34162; HMDB34165; HMDB34606; HMDB36234; HMDB37143; HMDB37164; HMDB37288; HMDB38040; HMDB38603; HMDB39216; HMDB39219; HMDB40221; HMDB40295; HMDB40430; HMDB59822			
265	158,0458609	6820,985149	L-2-Amino-4-methylenepentanedioic acid	C00651; C03623; CHEBI:48029; HMDB0029433; HMDB0034442; HMDB29433; HMDB34442	C6H9NO4	-H(-)	100
266	158,0828928	5334,584026	2-Methylbutyrylglycine	C02636; C03087; C08269; C10151; C10850; CHEBI:240943; CHEBI:57885; CHEBI:70830; CHEBI:70984; CHEBI:85534; HMDB0000339; HMDB0000678; HMDB0000927; HMDB0011757; HMDB0012154; HMDB0012175; HMDB0029230;	C7H13NO3	-H(-)	100

				HMDB0029409; HMDB0029412; HMDB0031345; HMDB00339; HMDB0036384; HMDB0038593; HMDB0038625; HMDB0061678; HMDB00678; HMDB00927; HMDB11757; HMDB12154; HMDB12175; HMDB29230; HMDB29409; HMDB29412; HMDB31345; HMDB36384; HMDB38593; HMDB38625; HMDB61678			
267	158,093966	2533,941325	delta-Guanidinovaleric acid; 8-Hydroxyoctanoate	C13688; HMDB0061914; HMDB61914	C6H13N3O2; C8H15O3	-H(-); -H(-)	100
268	158,1184962	3599,15118	DL-2-Aminooctanoic acid	CHEBI:64356; CHEBI:75145; HMDB0000991; HMDB0014375; HMDB00991; HMDB14375	C8H17NO2	-H(-)	100
269	159,0412744	2579,799096	Tricholomic acid	C03409; C08298; C19483; C20232; C20846; CHEBI:29128; CHEBI:529821; HMDB0030412; HMDB0042037; HMDB30412; HMDB42037	C5H8N2O4	-H(-)	100

270	159,0816295	5246,125274	3-Methyl-4-phenyl-3-buten-2-one	HMDB0031567; HMDB0035207; HMDB0038790; HMDB31567; HMDB35207; HMDB38790	C11H12O	-H(-)	100
271	159,0911241	2776,496278	Dehydrocarnitine	C02636	C7H14NO3	-H(-)	94
272	159,102631	6061,075047	Propylhydroxypentanoic acid	C03864; C03865; C16649; C16650; C16651; C17527; C20793; CHEBI:23997; CHEBI:37098; CHEBI:37099; CHEBI:78949; CHEBI:86543; CHEBI:87534; HMDB0000486; HMDB0000711; HMDB0001954; HMDB0002264; HMDB0010722; HMDB0013898; HMDB0013899; HMDB0013900; HMDB0031509; HMDB0032270; HMDB0032827; HMDB00486; HMDB0059825; HMDB0059867; HMDB0062596; HMDB00711; HMDB01954; HMDB02264; HMDB10722; HMDB13898; HMDB13899; HMDB13900; HMDB31509; HMDB32270; HMDB32827; HMDB59825; HMDB59867; HMDB62596	C8H16O3	-H(-)	100
273	159,11344	22593,25542	Methyl-Lys	C02728; CHEBI:17604; HMDB0002038;	C7H16N2	-H(-)	100

	97			HMDB0006009; HMDB02038; HMDB06009	O2		
274	160,0254862	2008,444135	Formyl-Asp; Erucin	C01044; C03079; CHEBI:16338; CHEBI:48429; HMDB0002273; HMDB0002467; HMDB0033764; HMDB0038446; HMDB0060495; HMDB01344; HMDB02273; HMDB02467; HMDB33764; HMDB38446; HMDB60495	C5H7NO5; C6H11NS2	-H(-); -H(-)	100
275	160,0513596	2465,631261	4-Acetylimidazo[4,5-c]pyridine	HMDB0034888; HMDB34888	C8H7N3O	-H(-)	100
276	160,0611903	6843,147497	Aminoadipate	C00956; C01046; C01077; C02207; C03210; C05016; C06234; C17581; C19694; CHEBI:16440; CHEBI:37024; CHEBI:45826; CHEBI:7671; CHEBI:857; HMDB0000510; HMDB0029423; HMDB0033747; HMDB00510; HMDB0061715; HMDB0062557; HMDB0062660; HMDB0094716; HMDB29423; HMDB33747; HMDB61715; HMDB62557; HMDB62660; HMDB94716	C6H11NO4	-H(-)	100
277	160,09785	1675,963401	Carnitine	C00318; C15025; CHEBI:11060; CHEBI:17126;	C7H15NO	-H(-)	100

	32			HMDB0000062; HMDB00062; HMDB0062496; HMDB01467; HMDB62496	3		
278	161,0221346	28018,45235	1-Piperazinecarbodithioic acid	HMDB0038379; HMDB38379	C5H10N2S2	-H(-)	100
279	161,0336439	9823,592333	Erythro-4-hydroxy-L-glutamate(1-)	CHEBI:6331; HMDB0062752; HMDB62752	C5H8NO5	-H(-)	100
280	161,0456668	38975,45552	Hydroxyadipate; (-)-1-Methylpropyl 1-propenyl disulfide	C00478; C01088; C01989; C02360; C02488; C02991; C03652; C03761; C03827; C03979; C06158; C06159; C06474; C06478; C06485; C11592; C16390; C17209; C18028; CHEBI:16831; CHEBI:17023; CHEBI:30997; CHEBI:55541; CHEBI:59051; HMDB0000321; HMDB0000345; HMDB0000355; HMDB0000368; HMDB0000640; HMDB0029934; HMDB00321; HMDB0032873; HMDB0034426; HMDB00345; HMDB00355;	C6H10O5; C7H14S2	-H(-); -H(-)	100

				HMDB00368; HMDB0041561; HMDB0059758; HMDB00640; HMDB29934; HMDB32873; HMDB34426; HMDB41561; HMDB59758			
281	161,0974296	17780,72706	1-Phenyl-1-pentanone	CHEBI:36812; HMDB0031208; HMDB0031856; HMDB0032025; HMDB0032415; HMDB0033562; HMDB0036183; HMDB0039803; HMDB0040245; HMDB0041493; HMDB0133676; HMDB31208; HMDB31856; HMDB32025; HMDB32415; HMDB33562; HMDB36183; HMDB39803; HMDB40245; HMDB41493	C11H14O	-H(-)	100
282	161,1091083	4006,605281	L(-)-Nicotine	C00745; C06180; C16150; CHEBI:17688; CHEBI:18723; CHEBI:28986; HMDB0001934; HMDB0004350; HMDB0014330; HMDB0039982; HMDB01001; HMDB01934; HMDB04350; HMDB05069; HMDB13119; HMDB13120; HMDB13135; HMDB13323; HMDB13644; HMDB13661; HMDB13666; HMDB13673; HMDB13697; HMDB14330; HMDB39982	C10H14N2	-H(-)	100
283	162,03759	2332,809152	1-	CHEBI:351346; HMDB0038445; HMDB0040034;	C9H9NS	-H(-)	100

	97		Isothiocyanato-2-phenylethane	HMDB38445; HMDB40034			
284	162,056025 9	5434,105667	3-Methyldioxyindole	C05834; C19567; CHEBI:28254; CHEBI:66879; HMDB0001424; HMDB0004186; HMDB0062406; HMDB01424; HMDB04186; HMDB62406	C9H9NO2	-H(-)	100
285	162,077345 5	2415,010002	Amino-dideoxy-hexose	C10141; C10143; C15478; C15479; C16843; C17580; C20311; CHEBI:39066; HMDB0011727; HMDB0032862; HMDB0035359; HMDB11727; HMDB32862; HMDB35359	C6H13NO4	-H(-)	100
286	162,091789 3	2823,935021	(R)-2-Methylimino-1-phenylpropan-1-ol	C04351; C06746; C11487; CHEBI:84270; HMDB0039661; HMDB0040015; HMDB0040022; HMDB0040023; HMDB0040024; HMDB0040025; HMDB0040026; HMDB0041927; HMDB0061786; HMDB39661; HMDB40015; HMDB40022; HMDB40023; HMDB40024; HMDB40025; HMDB40026; HMDB41927; HMDB61786	C10H13NO	-H(-)	100
287	162,10085	3467,963597	Erythro-5-	CHEBI:58357; HMDB0062570; HMDB62570	C6H15N2	-H(-)	100

	05		hydroxy-L-lysinium(1+)		O3		
288	163,0401125	7987,290478	Coumarate	C00166; C00811; C01772; C02763; C05838; C06738; C07114; C10945; C12621; CHEBI:16815; CHEBI:17450; CHEBI:18125; CHEBI:28873; CHEBI:30851; CHEBI:32357; CHEBI:32374; CHEBI:84256; HMDB0000205; HMDB0001713; HMDB0002035; HMDB0002641; HMDB0012225; HMDB00205; HMDB0030677; HMDB0041592; HMDB0062605; HMDB01237; HMDB0125104; HMDB0126545; HMDB0128076; HMDB0129375; HMDB0134028; HMDB0134029; HMDB0134030; HMDB0134031; HMDB0141767; HMDB0141768; HMDB01713; HMDB02035; HMDB02641; HMDB12225; HMDB30677; HMDB31629; HMDB41592; HMDB62605	C9H8O3	-H(-)	100
289	163,0501594	5222,059988	Ricinine	C01526; CHEBI:18043; HMDB0042006; HMDB42006	C8H8N2O2	-H(-)	80
290	163,06122	65832,42286	Deoxyhexos	C00507; C00586; C00861; C01018; C01019;	C6H12O5;	-H(-); -H(-)	100

	55		e; Butyl isopropyl disulfide	C01684; C01721; C02095; C02338; C02431; C02476; C02522; C02781; C07326; C08258; C08259; C08352; C16538; C20835; C20836; CHEBI:16070; CHEBI:17617; CHEBI:17897; CHEBI:2181; CHEBI:27442; CHEBI:42548; CHEBI:42564; CHEBI:42589; CHEBI:48204; CHEBI:62346; HMDB0000174; HMDB0000849; HMDB0002712; HMDB0003081; HMDB0005876; HMDB0010207; HMDB0012327; HMDB00174; HMDB0029196; HMDB0033050; HMDB0033051; HMDB0033821; HMDB0039783; HMDB0059624; HMDB0059625; HMDB0060267; HMDB0062477; HMDB0062489; HMDB00849; HMDB0124735; HMDB02712; HMDB03081; HMDB05876; HMDB10207; HMDB11726; HMDB11736; HMDB12327; HMDB29196; HMDB33050; HMDB33051; HMDB33821; HMDB39783; HMDB59624; HMDB59625; HMDB60267; HMDB62477; HMDB62489	C7H16S2		

291	163,1130237	25612,69442	1-(1-Methoxy-1-methylethyl)-4-methylbenzene	C08490; C14226; C14466; C14697; CHEBI:88585; HMDB0029653; HMDB0031311; HMDB0031454; HMDB0031624; HMDB0031625; HMDB0031866; HMDB0032060; HMDB0035601; HMDB0035989; HMDB0036719; HMDB0036814; HMDB0036816; HMDB0037294; HMDB29653; HMDB31311; HMDB31454; HMDB31624; HMDB31625; HMDB31866; HMDB32060; HMDB35601; HMDB35989; HMDB36719; HMDB36814; HMDB36816; HMDB37294	C11H16O	-H(-)	100
292	163,1244521	6531,617708	2,5-Diethyl-3,6-dimethylpyrazine	HMDB0039979; HMDB0039980; HMDB0039981; HMDB0040001; HMDB39979; HMDB39980; HMDB39981; HMDB40001	C10H16N2	-H(-)	100
293	164,071804	175027,1863	Phenylalanine	C00079; C02057; C02265; C07527; C18090; C18747; C19565; C19578; C20487; C20488; CHEBI:110006; CHEBI:116735; CHEBI:17295; CHEBI:82572; HMDB0000159; HMDB0001007; HMDB0004992; HMDB0006044; HMDB00159;	C9H11NO2	-H(-)	100

				HMDB0033485; HMDB0033589; HMDB0034169; HMDB0059934; HMDB00612; HMDB0062402; HMDB0062407; HMDB01007; HMDB04992; HMDB06044; HMDB33485; HMDB33589; HMDB34169; HMDB59934; HMDB62402; HMDB62407			
294	165,0190115	19162,02202	Phthalate	C01606; C03590; C06337; C14096; C14100; CHEBI:15702; CHEBI:29069; HMDB0002107; HMDB0002334; HMDB0002428; HMDB0032613; HMDB02107; HMDB02334; HMDB02428; HMDB32613	C8H6O4	-H(-)	100
295	165,0409832	71912,43719	Pentonic acid; S-Propyl 1-propanesulfinothioate; Methylxanthine	C00502; C00545; C00878; C01685; C05411; C05412; C16353; C16357; C16358; CHEBI:20912; CHEBI:21077; CHEBI:287361; CHEBI:336244; CHEBI:48092; CHEBI:48991; CHEBI:62207; CHEBI:6268; CHEBI:91021; HMDB0000539; HMDB0000867; HMDB0001886; HMDB0001991; HMDB0010738; HMDB0034394; HMDB00539; HMDB0059716; HMDB0059750; HMDB0060255;	C5H10O6; C6H14OS2; C6H6N4O2	-H(-); -H(-); -H(-)	100

				HMDB0060256; HMDB00867; HMDB01886; HMDB01991; HMDB10738; HMDB34394; HMDB59716; HMDB59750; HMDB60255; HMDB60256			
296	165,0748593	21834,53213	3-(4-Methyl-3-pentenyl)thiophene	HMDB0038183; HMDB38183	C10H14S	-H(-)	100
297	165,0896606	9099,593883	Cyromazine	C14147; CHEBI:30260; HMDB0029862; HMDB29862	C6H10N6	-H(-)	100
298	165,1279268	3369,757426	(-)-Nopol	CHEBI:525644; HMDB0030002; HMDB0030252; HMDB0031359; HMDB0031565; HMDB0031728; HMDB0032540; HMDB0033546; HMDB0036190; HMDB0036815; HMDB30002; HMDB30252; HMDB31359; HMDB31565; HMDB31728; HMDB32540; HMDB33546; HMDB36190; HMDB36815	C11H18O	-H(-)	100
299	165,9792964	2301,641478	2(3H)-Benzothiazo	C14437; HMDB0030524; HMDB30524	C7H5NS2	-H(-)	100

			lethione				
300	166,0155904	14203,20124	Quinolinate	C03722; C16234; C18625; CHEBI:16675; CHEBI:46837; HMDB0000232; HMDB00232; HMDB0033161; HMDB33161	C7H5NO4	-H(-)	98
301	166,0509683	20775,17698	Pyridoxal	C00250; C03493; C03986; C05831; C06051; C12323; C14170; C14171; C20821; CHEBI:17310; CHEBI:17889; CHEBI:27440; HMDB0001545; HMDB0004290; HMDB0034887; HMDB0034889; HMDB0060374; HMDB01545; HMDB04290; HMDB34887; HMDB34889; HMDB60374	C8H9NO3	-H(-)	100
302	166,0993775	4575,14562	2-Dimethylamino-5,6-dimethylpyrimidin-4-ol	C10916	C8H13N3O	-H(-)	100
303	167,009308	8727,882409	1,2-Dinitrobenzene	C14702	C6H4N2O4	-H(-)	100
304	167,02134	1143455,037	Urate	C00366; CHEBI:17775; HMDB0000289;	C5H4N4O	-H(-)	100

	26			HMDB00289	3		
305	167,1437844	5440,647922	10-Undecenal	C20243; CHEBI:132843; HMDB0031128; HMDB0032238; HMDB0033577; HMDB0035417; HMDB0037807; HMDB0040247; HMDB31128; HMDB32238; HMDB33577; HMDB35417; HMDB37807; HMDB40247	C11H20O	-H(-)	100
306	168,006998	4647,850347	Glyphosate	C01705; C05672; C11638; C12021; C18564; C18565; CHEBI:244030; HMDB0000370; HMDB00370	C3H8NO5P	-H(-)	100
307	168,0669324	6660,591947	Pyridoxine	C00314; C00547; CHEBI:144646; CHEBI:16709; CHEBI:18357; CHEBI:317612; CHEBI:33569; HMDB0000216; HMDB0000239; HMDB0001537; HMDB0004817; HMDB00216; HMDB00239; HMDB0035178; HMDB0037685; HMDB01537; HMDB02075; HMDB04817; HMDB35178; HMDB37685	C8H11NO3	-H(-)	100
308	168,0780106	14497,289	Methyl-His	C01152; C03298; CHEBI:27596; CHEBI:50599; HMDB0000001; HMDB00001; HMDB0000479; HMDB00479; HMDB04935; HMDB06703;	C7H11N3O2	-H(-)	100

				HMDB06704			
309	168,0849257	6180,520134	4-Butyl-5-ethylthiazole	HMDB0040065; HMDB0040066; HMDB0040076; HMDB0040077; HMDB0040078; HMDB0040079; HMDB0040080; HMDB0040081; HMDB0040082; HMDB0040098; HMDB0040099; HMDB0040106; HMDB0040107; HMDB0040108; HMDB40065; HMDB40066; HMDB40076; HMDB40077; HMDB40078; HMDB40079; HMDB40080; HMDB40081; HMDB40082; HMDB40098; HMDB40099; HMDB40106; HMDB40107; HMDB40108	C9H15NS	-H(-)	100
310	168,0900684	4960,166972	Pyridoxamin ium(1+)	CHEBI:57761; HMDB0062696; HMDB62696	C8H13N2O2	-H(-)	100
311	169,0157719	13163,48893	Benzyl methyl disulfide	HMDB0040590; HMDB40590	C8H10S2	-H(-)	100
312	169,0334534	9332,13663	2,5-Dimethyl-3-furanthiol	HMDB0032234; HMDB0037732; HMDB32234; HMDB37732	C8H10O2S	-H(-)	100

			acetate				
313	169,0494914	5248,576656	3,4-Dihydroxyphenylglycol	C05576; C06720; C06729; C06731; C07123; C16804; C19495; CHEBI:1387; CHEBI:89898; HMDB0000318; HMDB00318; HMDB0032966; HMDB0038760; HMDB0038761; HMDB0059756; HMDB0132906; HMDB0132907; HMDB0133971; HMDB0133972; HMDB0133982; HMDB05870; HMDB32966; HMDB38760; HMDB38761; HMDB59756	C8H10O4	-H(-)	80
314	169,0657746	11571,99152	Methyl beta-naphthyl ketone	C02499; C07733; C14224; C14342; CHEBI:17043; CHEBI:39258; CHEBI:52364; HMDB0032412; HMDB0032582; HMDB0034446; HMDB32412; HMDB32582; HMDB34446	C12H10O	-H(-)	100
315	169,0988855	3360,780655	Levetiracetam	C07841; CHEBI:352567; HMDB0015333; HMDB0033926; HMDB15333; HMDB33926	C8H14N2O2	-H(-)	100
316	169,123363	9703,371331	C10:1	C03092; C04433; C07276; C09790; C16462; C17621; C18020; C18027; C18066; C18202; C19082; C20326; CHEBI:16271; CHEBI:32380; CHEBI:32381; CHEBI:50243; CHEBI:50467;	C10H18O2	-H(-)	100

				CHEBI:87327; CHEBI:88534; CHEBI:88903; HMDB0004980; HMDB0010726; HMDB0012183; HMDB0029358; HMDB0029859; HMDB0030031; HMDB0031002; HMDB0031003; HMDB0031297; HMDB0031362; HMDB0031440; HMDB0031441; HMDB0032119; HMDB0032275; HMDB0032393; HMDB0032452; HMDB0033203; HMDB0033377; HMDB0034427; HMDB0034581; HMDB0034880; HMDB0035122; HMDB0035365; HMDB0035837; HMDB0035839; HMDB0035907; HMDB0036099; HMDB0036211; HMDB0036990; HMDB0036992; HMDB0037021; HMDB0037116; HMDB0037217; HMDB0037497; HMDB0037632; HMDB0038744; HMDB0039149; HMDB0039768; HMDB0039795; HMDB0040194; HMDB0040208; HMDB0040213; HMDB0040330; HMDB0040530; HMDB0040726; HMDB0040727; HMDB0041012; HMDB0041630; HMDB0059610; HMDB0059852; HMDB04980; HMDB10726; HMDB12183; HMDB29358; HMDB29859; HMDB30031; HMDB31002;			

				HMDB31003; HMDB31297; HMDB31362; HMDB31440; HMDB31441; HMDB32119; HMDB32275; HMDB32393; HMDB32452; HMDB33203; HMDB33377; HMDB34427; HMDB34581; HMDB34880; HMDB35122; HMDB35365; HMDB35837; HMDB35839; HMDB35907; HMDB36099; HMDB36211; HMDB36990; HMDB36992; HMDB37021; HMDB37116; HMDB37217; HMDB37497; HMDB37632; HMDB38744; HMDB39149; HMDB39768; HMDB39795; HMDB40194; HMDB40208; HMDB40213; HMDB40330; HMDB40530; HMDB40726; HMDB40727; HMDB41012; HMDB41630; HMDB59610; HMDB59852			
317	169,1599214	1948,862507	Undecanal	C01875; CHEBI:131344; CHEBI:17700; CHEBI:46202; HMDB0030941; HMDB0030943; HMDB0031016; HMDB0031064; HMDB0031065; HMDB0032371; HMDB0032379; HMDB0033713;	C11H22O	-H(-)	100

				HMDB0034856; HMDB30941; HMDB30943; HMDB31016; HMDB31064; HMDB31065; HMDB32371; HMDB32379; HMDB33713; HMDB34856			
318	170,0281374	2976,15346	2-(4-Methyl-5-thiazolyl)ethyl formate	C14412; HMDB0032420; HMDB32420	C7H9NO2S	-H(-)	100
319	170,0822491	3774,620218	Crotanecine	C10284; C11837	C8H13NO3	-H(-)	100
320	170,1019539	1771,23042	2,5-Dihydro-4,5-dimethyl-2-(2-methylpropyl)thiazole	HMDB0037159; HMDB0037514; HMDB0038438; HMDB37159; HMDB37514; HMDB38438	C9H17NS	-H(-)	91
321	170,1183512	2976,502123	Gabapentin	CHEBI:42797; HMDB0005015; HMDB05015	C9H17NO2	-H(-)	100
322	171,01161	19808,25951	p-	C06677; CHEBI:27849; HMDB0059933;	C7H8O3S	-H(-)	100

	14		Toluenesulfonic acid	HMDB59933			
323	171,0413262	6038,002711	Hydantoin-5-propionic acid	C05565; C13739; HMDB0001212; HMDB0034322; HMDB01212; HMDB34322	C6H8N2O4	-H(-)	100
324	171,0659148	7445,916804	2-Octenedioic acid	CHEBI:68508; CHEBI:89192; HMDB0000341; HMDB0004982; HMDB0013312; HMDB0032352; HMDB00341; HMDB0034851; HMDB0038601; HMDB04982; HMDB13312; HMDB32352; HMDB34851; HMDB38601	C8H12O4	-H(-)	100
325	171,0776122	13209,53843	Glycylproline	CHEBI:356329; CHEBI:356660; HMDB0000721; HMDB0011178; HMDB00721; HMDB11178	C7H12N2O3	-H(-)	100
326	171,0897093	3413,329856	L-Capreomycidine	C18472; C20602	C6H12N4O2	-H(-)	100
327	171,102274	14602,35578	Tetrahydrofurfuryl butyrate	C16322; CHEBI:78700; HMDB0036188; HMDB0036213; HMDB0036396; HMDB0040165; HMDB0040202; HMDB0040203; HMDB0059936; HMDB0059937; HMDB0060287; HMDB0094711;	C9H16O3	-H(-)	100

				HMDB36188; HMDB36213; HMDB36396; HMDB40165; HMDB40202; HMDB40203; HMDB59936; HMDB59937; HMDB60287; HMDB94711			
328	171,1388342	124671,0961	Decanoic acid (FA10:0)	C01571; C02904; C12289; C12292; CHEBI:120941; CHEBI:30813; CHEBI:44499; CHEBI:48250; CHEBI:53459; CHEBI:606526; CHEBI:87332; CHEBI:87421; CHEBI:87495; CHEBI:88553; HMDB0000511; HMDB0029760; HMDB0030029; HMDB0031264; HMDB0031739; HMDB0032045; HMDB0032070; HMDB0032155; HMDB0032264; HMDB0032302; HMDB0032315; HMDB0033620; HMDB0034457; HMDB0034849; HMDB0035595; HMDB0035723; HMDB0036136; HMDB0036145; HMDB0036228; HMDB0037387; HMDB0037849; HMDB0038038; HMDB0038602; HMDB0038783; HMDB0039218; HMDB0040157; HMDB0040167; HMDB0040195; HMDB0040211; HMDB0040529; HMDB0041216; HMDB00511; HMDB0061805;	C10H20O2	-H(-)	100

				HMDB0094654; HMDB29760; HMDB30029; HMDB31264; HMDB31739; HMDB32045; HMDB32070; HMDB32155; HMDB32264; HMDB32302; HMDB32315; HMDB33620; HMDB34457; HMDB34849; HMDB35595; HMDB35723; HMDB36136; HMDB36145; HMDB36228; HMDB37387; HMDB37849; HMDB38038; HMDB38602; HMDB38783; HMDB39218; HMDB40157; HMDB40167; HMDB40195; HMDB40211; HMDB40529; HMDB41216; HMDB61805; HMDB94654			
329	172,0409716	4259,205755	2-Quinolinecarboxylic acid	C06325; C06414; C14040; C19474; CHEBI:18386; CHEBI:34104; HMDB0000842; HMDB0062188; HMDB00842; HMDB62188	C10H7NO2	-H(-)	100
330	172,0616834	2975,559263	Acetyl-Glu-semialdehyde	C01250; C12121; C17366; CHEBI:16319; HMDB0006488; HMDB06488	C7H11NO4	-H(-)	100
331	172,0979105	4154,469916	Acetyl-Leu	C02710; C10173; CHEBI:17786; CHEBI:64390; CHEBI:84056; HMDB0000701; HMDB0000747;	C8H15NO3	-H(-)	100

				HMDB0002087; HMDB0011756; HMDB0061684; HMDB00701; HMDB00747; HMDB02087; HMDB11756; HMDB61684			
332	172,9920409	194220,5308	Phenol sulfate	C00850; C02180; C12849; CHEBI:27905; HMDB0060015; HMDB60015	C6H6O4S	-H(-)	100
333	173,0818982	8919,407992	Suberic acid	C08278; C14570; C16658; C19402; CHEBI:80644; CHEBI:89933; CHEBI:9300; HMDB0000893; HMDB0002023; HMDB0033838; HMDB0041606; HMDB0059727; HMDB0059757; HMDB0060684; HMDB00837; HMDB00893; HMDB02023; HMDB33838; HMDB41606; HMDB59727; HMDB59757; HMDB60684	C8H14O4	-H(-)	100
334	173,0933493	18035,88285	Acetylornithine	C00437; C01047; CHEBI:16543; CHEBI:17394; HMDB0003357; HMDB0028854; HMDB0029127; HMDB0034365; HMDB0062764; HMDB0094702; HMDB03357; HMDB06489; HMDB28854; HMDB29127; HMDB34365; HMDB62764; HMDB94702	C7H14N2O3	-H(-)	100
335	173,10479	36427,29801	Arginine	C00062; C00792; C02385; CHEBI:15816;	C6H14N4	-H(-)	100

	57			CHEBI:16467; HMDB0000517; HMDB0003416; HMDB00517; HMDB03416	O2		
336	173,1183608	8553,912085	(±)-3-Hydroxynonanoic acid	HMDB0031513; HMDB0034040; HMDB31513; HMDB34040	C9H18O3	-H(-)	100
337	173,1291502	6307,568363	Ne,Ne dimethyllysine	C05545; HMDB0013287; HMDB13287	C8H18N2O2	-H(-)	100
338	174,0423913	8940,645438	Berteroin; 7-Cyano-7-carbaguanine	C15996; HMDB0031577; HMDB31577	C7H13NS2; C7H5N5O	-H(-); -H(-)	100
339	174,0559802	7084,69127	Indole-3-acetate	C00954; C01386; C02298; C03230; C05634; C06331; C06344; C06525; C11504; CHEBI:16411; CHEBI:50157; HMDB0000197; HMDB0004073; HMDB00197; HMDB0038628; HMDB0040972; HMDB04073; HMDB38628; HMDB40972	C10H9NO2	-H(-)	100
340	174,0770937	3673,744833	Calystegin B2	C10851; CHEBI:64305; HMDB0002201; HMDB0034252; HMDB0036383; HMDB0038594;	C7H13NO4	-H(-)	100

				HMDB0094717; HMDB02201; HMDB34252; HMDB36383; HMDB38594; HMDB94717			
341	174,0886713	9665,595502	Citrulline	C00327; CHEBI:16349; HMDB0000904; HMDB0003148; HMDB00904; HMDB03148	C6H13N3O3	-H(-)	100
342	175,0516521	5302,72033	4-Hydroxyaminoquinoline N-oxide	C04050; C07899	C9H8N2O2	-H(-)	100
343	175,0763887	7172,092252	Ethyl cinnamate	C06359; C10389; C12299; C14083; C14102; C14111; HMDB0029699; HMDB0033834; HMDB0036905; HMDB0037142; HMDB0037145; HMDB0126379; HMDB0126467; HMDB0132267; HMDB0132973; HMDB0133466; HMDB0133677; HMDB0133678; HMDB0133679; HMDB0133680; HMDB0133681; HMDB29699; HMDB33834; HMDB36905; HMDB37142; HMDB37145	C11H12O2	-H(-)	100
344	175,0977091	4211,3178	L-Cladinose	C11917; C18744	C8H16O4	-H(-)	100
345	175,11295	3141,885408	4-Methyl-1-	HMDB0031569; HMDB0034177; HMDB0036021;	C12H16O	-H(-)	100

	09		phenyl-2-pentanone	HMDB0036171; HMDB0094661; HMDB31569; HMDB34177; HMDB36021; HMDB36171; HMDB94661			
346	176,082798	3401,903969	Nitrosonornicotine	C16452; HMDB0041940; HMDB41940	C9H11N3O	-H(-)	100
347	176,093721	2276,012723	Anthopleurine	C16994; HMDB0035360; HMDB35360	C7H15NO4	-H(-)	100
348	177,023182 7	10314,6378	3,3''-Thiobispropanoic acid	CHEBI:1093323; HMDB0031162; HMDB31162	C6H10O4S	-H(-)	100
349	177,033733	8101,399677	Cys-Gly	C01419; CHEBI:4047; HMDB0000078; HMDB00078; HMDB0028775; HMDB0028838; HMDB28775; HMDB28838	C5H10N2O3S	-H(-)	100
350	177,055789 1	5632,649858	4-Methoxycinnamic acid	C01624; C02666; C10667; C14784; C20327; C20646; CHEBI:260249; CHEBI:34048; CHEBI:84260; HMDB0002040; HMDB0030903; HMDB0031055; HMDB0033248; HMDB0038712; HMDB0038965; HMDB0039471; HMDB0062273; HMDB0062729; HMDB0125103; HMDB0125518;	C10H10O3	-H(-)	100

				HMDB0131168; HMDB0133457; HMDB0133611; HMDB0133612; HMDB0133613; HMDB0133614; HMDB0133615; HMDB0134055; HMDB0135647; HMDB0135649; HMDB0135650; HMDB0135651; HMDB0141076; HMDB0141077; HMDB0141078; HMDB0141782; HMDB02040; HMDB30903; HMDB31055; HMDB33248; HMDB38712; HMDB38965; HMDB39471; HMDB62273; HMDB62729			
351	177,0664842	3296,345736	4-Oxo-4-(3-pyridyl)-butanamide	C07428; CHEBI:183000; HMDB0001267; HMDB0004145; HMDB0004146; HMDB0015253; HMDB01267; HMDB04145; HMDB04146; HMDB15253	C9H10N2O2	-H(-)	100
352	177,0874871	4035,11534	Streptamine	C01854; C17574	C6H14N2O4	-H(-)	100
353	177,0923392	6434,335101	5-Phenylvaleric acid	C10454; C10478; C14535; C14709; C17663; C17665; C17666; C17782; CHEBI:40131; CHEBI:4918; CHEBI:50550; CHEBI:81257; CHEBI:87500; HMDB0002043; HMDB0031250;	C11H14O2	-H(-)	100

				HMDB0031864; HMDB0033376; HMDB0033386; HMDB0033597; HMDB0035013; HMDB0036235; HMDB0036385; HMDB0037680; HMDB0037708; HMDB0038179; HMDB0040287; HMDB0040356; HMDB0040411; HMDB0040425; HMDB0040426; HMDB0040583; HMDB0040800; HMDB0041553; HMDB0126149; HMDB0126449; HMDB0132981; HMDB0133181; HMDB0133469; HMDB0133682; HMDB0133683; HMDB0133684; HMDB0133685; HMDB0133686; HMDB0133687; HMDB02043; HMDB31250; HMDB31864; HMDB33376; HMDB33386; HMDB33597; HMDB35013; HMDB36235; HMDB36385; HMDB37680; HMDB37708; HMDB38179; HMDB40287; HMDB40356; HMDB40411; HMDB40425; HMDB40426; HMDB40583; HMDB40800; HMDB41553			
354	177,1044411	3158,920097	Pseudooxynicotine	C01056; C03043; C16569; C20361; CHEBI:30734; CHEBI:357241; CHEBI:37753; HMDB0001240;	C10H14N2O	-H(-)	84

				HMDB0001329; HMDB0001497; HMDB0060679; HMDB01240; HMDB01329; HMDB01497; HMDB60679			
355	177,128942	81146,50497	Propofol	C07523; C14465; CHEBI:44915; HMDB0014956; HMDB0031194; HMDB0031568; HMDB0031731; HMDB0032579; HMDB0035055; HMDB0036681; HMDB0037272; HMDB0038107; HMDB0038194; HMDB14956; HMDB31194; HMDB31568; HMDB31731; HMDB32579; HMDB35055; HMDB36681; HMDB37272; HMDB38107; HMDB38194	C12H18O	-H(-)	100
356	177,981526	1552,848114	5-Methyl-3-isoxazolyl sulfate	C11105	C4H5NO5S	-H(-)	100
357	178,033085	3027,017157	1-(Isothiocyanatomethyl)-4-methoxyben	HMDB0032581; HMDB32581	C9H9NOS	-H(-)	100

			zene				
358	178,0510168	52104,00909	Hippurate	C01586; C06332; C06339; C19569; CHEBI:18089; CHEBI:66951; CHEBI:838058; HMDB0000714; HMDB0000992; HMDB0012884; HMDB0032398; HMDB0032595; HMDB00714; HMDB00992; HMDB12884; HMDB32398; HMDB32595	C9H9NO3	-H(-)	100
359	179,0354376	4220,135657	4-Hydroxyphenylpyruvic acid	C01179; C01197; C01405; C01481; C05350; C12623; C13400; CHEBI:15365; CHEBI:15999; CHEBI:16433; CHEBI:17395; CHEBI:27683; CHEBI:32356; CHEBI:491486; HMDB0000707; HMDB0001879; HMDB0001964; HMDB0002130; HMDB0003501; HMDB0006915; HMDB0011663; HMDB0032057; HMDB0032131; HMDB00707; HMDB0125102; HMDB0125527; HMDB0125589; HMDB0125805; HMDB0126377; HMDB0132508; HMDB0134040; HMDB0134041; HMDB0140954; HMDB0140955; HMDB0140956; HMDB01879; HMDB01964; HMDB02130; HMDB03501; HMDB06494; HMDB06915; HMDB11663;	C9H8O4	-H(-)	100

				HMDB32057; HMDB32131			
360	179,0462345	5245,604137	Nicotinurate	C05380; C16623; CHEBI:467315; CHEBI:7563; CHEBI:80617; HMDB0003269; HMDB0041912; HMDB0059766; HMDB03269; HMDB41912; HMDB59766	C8H8N2O3	-H(-)	100
361	179,0572319	237886,564	Theophylline	C07130; C07480; C13747; CHEBI:25858; CHEBI:28177; CHEBI:28946; HMDB0001860; HMDB0001889; HMDB0002825; HMDB01860; HMDB01889; HMDB02825	C7H8N4O2	-H(-)	100
362	179,1078594	13576,80159	2,2,7,7-Tetramethyl-1,6-dioxaspiro[4.4]nona-3,8-diene	C03929; CHEBI:76357; CHEBI:76358; HMDB0030007; HMDB0030039; HMDB0032468; HMDB0035240; HMDB0036669; HMDB0036817; HMDB0039159; HMDB0039957; HMDB0059925; HMDB0059926; HMDB30007; HMDB30039; HMDB32468; HMDB35240; HMDB36669; HMDB36817; HMDB39159; HMDB39957; HMDB59925; HMDB59926	C11H16O2	-H(-)	100
363	179,1435794	4073,308551	(3Z,6Z,9Z)-3,6,9-	C08375; HMDB0031181; HMDB0032531; HMDB0038108; HMDB0039339; HMDB0039590;	C12H20O	-H(-)	100

			Dodecatrien-1-ol	HMDB31181; HMDB32531; HMDB38108; HMDB39339; HMDB39590			
364	180,0339923	13123,36339	Acamprosate	CHEBI:51041; HMDB0014797; HMDB14797	C5H11NO4S	-H(-)	100
365	180,0423648	3866,305828	L-2-Amino-4-(hydroxymethylphosphinyl)butanoate	C04650; C05042	C5H12NO4P	-H(-)	100
366	180,0668075	105311,0756	Tyrosine	C00082; C01536; C03290; C04368; C06420; C19579; C19712; C20807; CHEBI:16939; CHEBI:17895; CHEBI:278475; CHEBI:44303; HMDB0000158; HMDB0001119; HMDB0002184; HMDB0003831; HMDB0006050; HMDB00158; HMDB0059720; HMDB0060280; HMDB00647; HMDB01119; HMDB02184; HMDB03831; HMDB06050; HMDB59720; HMDB60280	C9H11NO3	-H(-)	100
367	180,9902832	6167,410969	2-Oxo-4-phosphonob	C17941	C4H7O6P	-H(-)	100

			utanoate				
368	181,036807	18862,13998	3-Methyluric acid	C16355; C16359; CHEBI:149031; CHEBI:149558; CHEBI:149744; HMDB0001970; HMDB0001973; HMDB0003099; HMDB0011107; HMDB01970; HMDB01973; HMDB03099; HMDB11107	C6H6N4O3	-H(-)	100
369	181,050814	24991,50233	Homovanillic acid	C03672; C03964; C04044; C05582; C05583; C10447; C10680; C12622; CHEBI:17385; CHEBI:296881; CHEBI:48400; CHEBI:545935; CHEBI:545959; CHEBI:562351; CHEBI:78336; CHEBI:823536; CHEBI:86369; HMDB0000118; HMDB0000333; HMDB0000423; HMDB0000755; HMDB0002643; HMDB0004061; HMDB00118; HMDB0029232; HMDB0029273; HMDB0029646; HMDB00333; HMDB0033624; HMDB0037274; HMDB0041270; HMDB00423; HMDB0059763; HMDB0062595; HMDB00755; HMDB0124923; HMDB0125533; HMDB0125591; HMDB0125595; HMDB0126386; HMDB0127495; HMDB0129348; HMDB0131428; HMDB0133494; HMDB0133788;	C9H10O4	-H(-)	100

				HMDB0134042; HMDB0134043; HMDB0140294; HMDB0140892; HMDB02643; HMDB04061; HMDB04285; HMDB06776; HMDB29232; HMDB29273; HMDB29646; HMDB33624; HMDB37274; HMDB41270; HMDB59763; HMDB62595			
370	181,1960289	1278,720052	1-Tridecene	CHEBI:88594; HMDB0030930; HMDB0061827; HMDB30930; HMDB61827	C13H26	-H(-)	100
371	181,9917873	23297,83662	Saccharin	C12283; CHEBI:32111; HMDB0029723; HMDB29723	C7H5NO3S	-H(-)	100
372	182,0286636	76468,42225	p-Hydroxyphenylacetothiohydroximate	C17239	C8H9NO2S	-H(-)	100
373	182,0462879	30251,4293	4-Pyridoxate	C00847; C04447; C04773; C11466; C12026; CHEBI:17405; HMDB0000017; HMDB00017	C8H9NO4	-H(-)	100
374	182,9702576	1838,037846	3-Phosphonooxypyruvate	C03232; CHEBI:30933; HMDB0001024; HMDB01024; HMDB60175	C3H5O7P	-H(-)	100

375	183,0063634	2899,715418	L-3,4-Dihydroxybutan-2-one 4-P	C15556	C4H9O6P	-H(-)	100
376	183,0493707	5298,384362	(+/-)-3-[(2-methyl-3-furyl)thio]-2-butanone	HMDB0032401; HMDB32401	C9H12O2S	-H(-)	100
377	183,1141696	3628,912011	N-(3-acetamidopropyl)pyrrolidin-2-one	CHEBI:133185; HMDB0061384; HMDB61384	C9H16N2O2	-H(-)	100
378	183,1187908	2466,408295	1,4-Dimethyl-7-ethylazulene	C09633; HMDB0036470; HMDB36470	C14H16	-H(-)	100
379	183,1389966	8655,839807	Citronellyl formate	C12295; C13422; C13823; C13910; C19420; CHEBI:31676; CHEBI:35045; CHEBI:48944; HMDB0031062; HMDB0031063; HMDB0031087;	C11H20O2	-H(-)	100

				HMDB0031272; HMDB0031406; HMDB0031691; HMDB0031843; HMDB0032308; HMDB0032320; HMDB0032396; HMDB0032404; HMDB0032453; HMDB0032461; HMDB0032489; HMDB0032534; HMDB0033371; HMDB0033724; HMDB0034428; HMDB0034429; HMDB0036140; HMDB0036784; HMDB0037106; HMDB0037185; HMDB0037225; HMDB0037309; HMDB0038273; HMDB0038274; HMDB0038277; HMDB0038278; HMDB0038311; HMDB0038906; HMDB0040593; HMDB31062; HMDB31063; HMDB31087; HMDB31272; HMDB31406; HMDB31691; HMDB31843; HMDB32308; HMDB32320; HMDB32396; HMDB32404; HMDB32453; HMDB32461; HMDB32489; HMDB32534; HMDB33371; HMDB33724; HMDB34428; HMDB34429; HMDB36140; HMDB36784; HMDB37106; HMDB37185; HMDB37225; HMDB37309; HMDB38273; HMDB38274; HMDB38277; HMDB38278; HMDB38311; HMDB38906;			

				HMDB40593			
380	183,1749301	1760,69836	Dodecylaldehyde	C02278; C14996; CHEBI:27836; HMDB0031019; HMDB0031734; HMDB0032543; HMDB0033933; HMDB31019; HMDB31734; HMDB32543; HMDB33933	C12H24O	-H(-)	100
381	184,002274	3778,989984	Phosphoserine	C01005; C02532; CHEBI:15811; CHEBI:37712; HMDB0000272; HMDB0001721; HMDB00272; HMDB01721	C3H8NO6P	-H(-)	100
382	184,097733	5230,132969	Pseudoecgonine	C10356; C10858; C12449; C20673; CHEBI:708641; HMDB0006348; HMDB0006548; HMDB0094728; HMDB0094729; HMDB0094730; HMDB0094731; HMDB06348; HMDB06548; HMDB94728; HMDB94729; HMDB94730; HMDB94731	C9H15NO3	-H(-)	100
383	184,1084007	2212,370889	Isocarbamid	C19047	C8H15N3O2	-H(-)	100
384	184,9861321	3322,137483	Phosphoglycerate; Diethyldithiophosphate	C00197; C00597; C00631; CHEBI:17050; CHEBI:17794; CHEBI:17835; CHEBI:24344; HMDB0000362; HMDB0000807; HMDB0003391; HMDB00362; HMDB0060180; HMDB0061736;	C3H7O7P; C4H11O2PS2	-H(-); -H(-)	100

				HMDB00807; HMDB03391; HMDB60180; HMDB61736			
385	185,0712198	6575,013973	1-Methoxy-1H-indole-3-acetonitrile	C10659; C19116; HMDB0040973; HMDB40973	C11H10N2O	-H(-)	100
386	185,118841	8831,13074	3-Oxodecanoic acid	C02217; C11404; C11406; C11417; C11420; C13945; C17620; C20714; CHEBI:37157; HMDB0010724; HMDB0030367; HMDB0030369; HMDB0033010; HMDB0038692; HMDB0038978; HMDB0039533; HMDB0039582; HMDB0039587; HMDB0040204; HMDB0040205; HMDB0041376; HMDB0041545; HMDB10724; HMDB30367; HMDB30369; HMDB33010; HMDB38692; HMDB38978; HMDB39533; HMDB39582; HMDB39587; HMDB40204; HMDB40205; HMDB41376; HMDB41545	C10H18O3	-H(-)	100
387	185,1543296	7039,989556	Undecanoic acid	C17715; CHEBI:32368; CHEBI:63864; CHEBI:87374; CHEBI:87501; CHEBI:87511; CHEBI:87542; HMDB0000947; HMDB0002373;	C11H22O2	-H(-)	100

				HMDB0032044; HMDB0032325; HMDB0032448; HMDB0033618; HMDB0033848; HMDB0034134; HMDB0034456; HMDB0034458; HMDB0034460; HMDB0036034; HMDB0036229; HMDB0038237; HMDB0038267; HMDB0039215; HMDB0040171; HMDB0040193; HMDB0040266; HMDB0041559; HMDB0059831; HMDB0059860; HMDB0062119; HMDB0094659; HMDB00947; HMDB02373; HMDB32044; HMDB32325; HMDB32448; HMDB33618; HMDB33848; HMDB34134; HMDB34456; HMDB34458; HMDB34460; HMDB36034; HMDB36229; HMDB38237; HMDB38267; HMDB39215; HMDB40171; HMDB40193; HMDB40266; HMDB41559; HMDB59831; HMDB59860; HMDB62119; HMDB94659			
388	186,0669315	3733,137621	Amrinone	C13594; CHEBI:111066; HMDB0015496; HMDB15496	C10H9N3O	-H(-)	100
389	186,08825	3378,765652	5-	C20234	C7H13N3	-H(-)	100

	71		Guanidino-3-methyl-2-oxopentanoate		O3		
390	186,1140243	3893,753607	N-Heptanoylglycine	C01092; C12029; CHEBI:15830; CHEBI:74433; HMDB0013010; HMDB0037790; HMDB13010; HMDB37790	C9H17NO3	-H(-)	100
391	186,1499794	2386,505971	n-Decanohydroxamic acid	C12889	C10H21NO2	-H(-)	100
392	187,0077428	797594,3306	p-Cresol sulfate	C06678; CHEBI:82914; HMDB0011635; HMDB0034782; HMDB11635; HMDB34782	C7H8O4S	-H(-)	100
393	187,0729389	97890,80129	N-Acetylglutamine	CHEBI:73685; HMDB0006029; HMDB0011173; HMDB0028842; HMDB06029; HMDB11173; HMDB28842	C7H12N2O4	-H(-)	100
394	187,0755518	84112,01015	Trigoforin	C06589; C16924; HMDB0029495; HMDB0032028; HMDB0032061; HMDB0041219; HMDB0132978; HMDB29495; HMDB32028; HMDB32061; HMDB41219	C12H12O2	-H(-)	100

395	187,0979138	21193,13595	Azelaic acid	C08261; C17878; CHEBI:48131; CHEBI:87319; CHEBI:88404; CHEBI:89874; HMDB0000784; HMDB0011717; HMDB0032200; HMDB0032258; HMDB0032387; HMDB0036233; HMDB0059760; HMDB0059783; HMDB0059814; HMDB0059879; HMDB00784; HMDB11717; HMDB32200; HMDB32258; HMDB32387; HMDB36233; HMDB59760; HMDB59783; HMDB59814; HMDB59879	C9H16O4	-H(-)	100
396	187,1338867	11153,02805	3-Hydroxycapric acid	C02774; C18067; CHEBI:132983; HMDB0002203; HMDB0010725; HMDB0033201; HMDB0033574; HMDB0033640; HMDB0034783; HMDB0038186; HMDB0039470; HMDB0039668; HMDB0039669; HMDB0039893; HMDB0040329; HMDB0041600; HMDB02203; HMDB10725; HMDB33201; HMDB33574; HMDB33640; HMDB34783; HMDB38186; HMDB39470; HMDB39668; HMDB39669; HMDB39893; HMDB40329; HMDB41600	C10H20O3	-H(-)	100

397	187,1448359	5984,943585	N6,N6,N6-Trimethyl-L-lysine	C01037; C03793; C18885; CHEBI:17311; HMDB0001325; HMDB01325	C9H20N2O2	-H(-)	100
398	188,0823818	8601,300359	N'-Nitrosoanatabine	C19478	C10H11N3O	-H(-)	100
399	188,1035623	5486,49891	Homocitrulline	C02427; CHEBI:17443; HMDB0000679; HMDB00679	C7H15N3O3	-H(-)	100
400	188,1073288	5023,299275	1-Methyl-4-phenyl-1,2,3,6-tetrahydropyridine N-oxide	C04731	C12H15NO	-H(-)	100
401	188,9870481	56266,86369	Pyrocatechol sulfate	C06336; C06674; CHEBI:68505; HMDB0059724; HMDB0061713; HMDB59724; HMDB61713	C6H6O5S	-H(-)	100
402	189,0034894	53407,04716	Oxalosuccinic acid	C05379; CHEBI:7815; HMDB0003974; HMDB03974	C6H6O7	-H(-)	100
403	189,04111	41706,09994	3-	C00944; C04049; C05601; C06201; CHEBI:17947;	C7H10O6;	-H(-); -H(-)	100

	42		Dehydroquinate; 5-(Methylthio)-2-[(methylthio)methyl]-2-pentenal	HMDB0012710; HMDB0037815; HMDB0059927; HMDB12710; HMDB37815; HMDB59927	C8H14OS2		
404	189,12851 83	3350,602173	beta-Damascenone	CHEBI:67251; HMDB0013804; HMDB0036178; HMDB0036572; HMDB0036685; HMDB0037763; HMDB0059904; HMDB0059906; HMDB13804; HMDB36178; HMDB36572; HMDB36685; HMDB37763; HMDB59904; HMDB59906	C13H18O	-H(-)	100
405	190,05393 17	9332,071386	Acetyl-Met	C02712; CHEBI:165927; HMDB0011745; HMDB11745	C7H13NO3S	-H(-)	100
406	190,09953 66	2803,310033	4-Hydroxydebrisoquine	C19477; CHEBI:63800; HMDB0006468; HMDB0041939; HMDB06468; HMDB41939	C10H13N3O	-H(-)	100
407	191,02061 49	280934,4176	(Iso)Citrate	C00158; C00311; C00451; C00679; C02780; C03600; C03921; C04575; C04617; C12649;	C6H8O7	-H(-)	100

				CHEBI:151; CHEBI:15622; CHEBI:160; CHEBI:30769; CHEBI:30887; CHEBI:85805; HMDB0000094; HMDB0000193; HMDB0001874; HMDB0005971; HMDB0006511; HMDB00094; HMDB00193; HMDB0033717; HMDB0041862; HMDB01874; HMDB05971; HMDB06511; HMDB33717; HMDB41862			
408	191,056565	24803,69401	Quinic acid	C00296; C01295; C06746; C12113; CHEBI:17521; HMDB0003072; HMDB03072	C7H12O6	-H(-)	100
409	191,093801 2	8000,033158	1,9-Nonanedithiol	HMDB0031710; HMDB31710	C9H20S2	-H(-)	100
410	191,106984 7	4978,658599	C12:4	C09909; C17853; C17875; CHEBI:87409; CHEBI:87413; HMDB0031571; HMDB0031614; HMDB0031618; HMDB0032043; HMDB0033380; HMDB0035010; HMDB0035014; HMDB0035015; HMDB0035447; HMDB0036388; HMDB0036734; HMDB0037165; HMDB0037709; HMDB0037716; HMDB0037717; HMDB0037792; HMDB0038180;	C12H16O2	-H(-)	100

				HMDB0039496; HMDB0039643; HMDB0039841; HMDB0040427; HMDB0132942; HMDB0132971; HMDB0132979; HMDB31571; HMDB31614; HMDB31618; HMDB32043; HMDB33380; HMDB35010; HMDB35014; HMDB35015; HMDB35447; HMDB36388; HMDB36734; HMDB37165; HMDB37709; HMDB37716; HMDB37717; HMDB37792; HMDB38180; HMDB39496; HMDB39643; HMDB39841; HMDB40427			
411	192,1396323	1667,952836	N-Cyclopropyl-trans-2-cis-6-nonadienamide	HMDB0032210; HMDB32210	C12H19NO	-H(-)	100
412	193,0144771	3525,75568	2-(2H-1,3-benzodioxol-5-yl)-2-	HMDB0129377; HMDB0132253; HMDB0132254; HMDB0136659; HMDB0136660; HMDB0136661	C9H6O5	-H(-)	100

			oxoacetic acid				
413	193,0356786	10386,87749	Hexuronate	C00191; C00333; C00470; C00558; C00618; C00905; C01062; C02024; C03342; C06472; C06473; C06477; C08348; C08350; C15673; C16245; CHEBI:16142; CHEBI:24769; CHEBI:33885; CHEBI:42717; CHEBI:47954; CHEBI:47962; HMDB0000127; HMDB0002545; HMDB0002704; HMDB0003363; HMDB0003402; HMDB0006334; HMDB0011731; HMDB0011732; HMDB00127; HMDB0038491; HMDB0127846; HMDB02545; HMDB02704; HMDB03348; HMDB03363; HMDB03402; HMDB06334; HMDB11731; HMDB11732; HMDB38491	C6H10O7	-H(-)	100
414	193,0612009	4729,25089	4-Aminohippuric acid	CHEBI:104011; CHEBI:68456; HMDB0001867; HMDB0059723; HMDB01867; HMDB59723	C9H10N2O3	-H(-)	100
415	193,0873085	8565,061092	(R)-3-Hydroxy-5-	C17497; C20342; CHEBI:86562; HMDB0031517; HMDB0031984; HMDB0032575; HMDB0032590;	C11H14O3	-H(-)	100

			phenylpentanoic acid	HMDB0034206; HMDB0034990; HMDB0036432; HMDB0037271; HMDB0040730; HMDB0041194; HMDB0041505; HMDB0041506; HMDB0041666; HMDB0059898; HMDB0059940; HMDB0059941; HMDB0059942; HMDB0059943; HMDB0059944; HMDB0059945; HMDB0124918; HMDB0126161; HMDB0126162; HMDB0126163; HMDB0126262; HMDB0126462; HMDB0126463; HMDB0126464; HMDB0126465; HMDB0126466; HMDB0132270; HMDB0133190; HMDB0133191; HMDB0133192; HMDB0133193; HMDB0133194; HMDB0133463; HMDB0133484; HMDB0133515; HMDB0133538; HMDB0141323; HMDB31517; HMDB31984; HMDB32575; HMDB32590; HMDB34206; HMDB34990; HMDB36432; HMDB37271; HMDB40730; HMDB41194; HMDB41505; HMDB41506; HMDB41666; HMDB59898; HMDB59940; HMDB59941; HMDB59942; HMDB59943; HMDB59944; HMDB59945			

416	193,1084685	2358,173326	Tetraethylene glycol	CHEBI:44920; HMDB0094708; HMDB94708	C8H18O5	-H(-)	100
417	193,1230923	5968,508049	4-Hydroxypropofol	C14305; C16937; C17002; HMDB0014018; HMDB0031840; HMDB0032567; HMDB0034450; HMDB0035126; HMDB0035375; HMDB0035376; HMDB0035801; HMDB0037018; HMDB0037231; HMDB0037389; HMDB0038046; HMDB0038292; HMDB0039685; HMDB0040439; HMDB0041497; HMDB0041610; HMDB0132986; HMDB14018; HMDB31840; HMDB32567; HMDB34450; HMDB35126; HMDB35375; HMDB35376; HMDB35801; HMDB37018; HMDB37231; HMDB37389; HMDB38046; HMDB38292; HMDB39685; HMDB40439; HMDB41497; HMDB41610	C12H18O2	-H(-)	100
418	193,1591002	2042,956601	Geranylacetone	C03527; C09704; C13297; CHEBI:18015; CHEBI:59958; HMDB0031846; HMDB0032355; HMDB0032913; HMDB0036026; HMDB0036184; HMDB0036820; HMDB0036823; HMDB0038026;	C13H22O	-H(-)	100

				HMDB0038216; HMDB0038731; HMDB0038897; HMDB0041629; HMDB31846; HMDB32355; HMDB32913; HMDB36026; HMDB36184; HMDB36820; HMDB36823; HMDB38026; HMDB38216; HMDB38731; HMDB38897; HMDB41629			
419	194,045734	12417,97251	Salicyluric acid	C00822; C04274; C05604; C07588; C19631; CHEBI:16852; CHEBI:242989; CHEBI:594277; CHEBI:60872; CHEBI:613375; CHEBI:68451; CHEBI:9008; HMDB0000840; HMDB0001229; HMDB0002016; HMDB0002404; HMDB0004067; HMDB0006116; HMDB0013678; HMDB0030726; HMDB0038055; HMDB0039119; HMDB0060602; HMDB00840; HMDB01229; HMDB02016; HMDB02404; HMDB04067; HMDB06116; HMDB06340; HMDB13678; HMDB30726; HMDB38055; HMDB39119; HMDB60602	C9H9NO4	-H(-)	100
420	195,033925	5470,138013	1-(Methylthio)	HMDB0033044; HMDB0033045; HMDB33044; HMDB33045	C7H16S3	-H(-)	100

			propyl propyl disulfide				
421	195,051457	71574,53149	Hexonic acid; 1,3-Dimethyluric acid	C00257; C00514; C00770; C00800; C00817; C00880; C03215; C15930; C16356; C16360; CHEBI:149713; CHEBI:149714; CHEBI:149724; CHEBI:16154; CHEBI:16534; CHEBI:33198; HMDB0000565; HMDB0000625; HMDB0001857; HMDB0001982; HMDB0002026; HMDB0003290; HMDB0004308; HMDB0011103; HMDB00565; HMDB0059704; HMDB00625; HMDB01857; HMDB01982; HMDB02026; HMDB03290; HMDB03373; HMDB04308; HMDB11103; HMDB59704	C6H12O7; C7H8N4O3	-H(-); -H(-)	100
422	195,1024094	23671,91155	2,6-Dimethoxy-4-propylphenol	HMDB0036226; HMDB0037725; HMDB0037734; HMDB0135672; HMDB36226; HMDB37725; HMDB37734	C11H16O3	-H(-)	100

423	195,1387107	8221,781854	Dihydro-5-(2-octenyl)-2(3H)-furanone	C03107; C08486; C09837; C09861; C09863; C11338; C12300; C12301; C12302; C12306; CHEBI:16165; HMDB0030867; HMDB0030945; HMDB0031030; HMDB0031692; HMDB0032051; HMDB0032193; HMDB0032331; HMDB0032901; HMDB0034903; HMDB0035157; HMDB0036048; HMDB0036599; HMDB0037301; HMDB0038270; HMDB0038280; HMDB0039522; HMDB0040206; HMDB0040227; HMDB0040397; HMDB0040725; HMDB0041469; HMDB0041494; HMDB0061816; HMDB30867; HMDB30945; HMDB31030; HMDB31692; HMDB32051; HMDB32193; HMDB32331; HMDB32901; HMDB34903; HMDB35157; HMDB36048; HMDB36599; HMDB37301; HMDB38270; HMDB38280; HMDB39522; HMDB40206; HMDB40227; HMDB40397; HMDB40725; HMDB41469; HMDB41494; HMDB61816	C12H20O2	-H(-)	100
424	195,17496	2263,349787	(Z)-4-	HMDB0032247; HMDB0036172; HMDB0037275;	C13H24O	-H(-)	100

	35		Dodecenal	HMDB0041404; HMDB0041490; HMDB32247; HMDB36172; HMDB37275; HMDB41404; HMDB41490			
425	196,0016388	4405,681109	O-phosphonato-L-homoserine(2-)	CHEBI:57590; HMDB0062692; HMDB62692	C4H8NO6P	-H(-)	100
426	197,061683	8516,394919	3-(2-Furanyl)-2-phenyl-2-propenal	C07717; C07724; C08447; C14230; C16926; C17856; HMDB0036185; HMDB0130034; HMDB36185	C13H10O2	-H(-)	100
427	197,0818707	9483,029591	Guaifenesin	C06579; C09853; C16644; C17454; C20789; CHEBI:125366; CHEBI:200157; CHEBI:89869; CHEBI:89887; HMDB0004998; HMDB0030991; HMDB0033093; HMDB0034099; HMDB0059768; HMDB0059779; HMDB0131265; HMDB0135755; HMDB04998; HMDB30991; HMDB33093; HMDB34099; HMDB59768; HMDB59779	C10H14O4	-H(-)	100

428	197,0925743	4359,286978	Metharbital	CHEBI:102408; HMDB0014606; HMDB14606	C9H14N2O3	-H(-)	100
429	197,1180426	4047,89414	Hercynine	C05575	C9H16N3O2	-H(-)	90
430	197,1299219	2692,175586	Slaframine	C06185	C10H18N2O2	-H(-)	100
431	197,1544353	10622,23338	C12:1	C09870; C12298; C16825; C16947; CHEBI:1030421; CHEBI:1115857; CHEBI:37162; CHEBI:38381; CHEBI:750110; CHEBI:87324; HMDB0000529; HMDB0010729; HMDB0029585; HMDB0029763; HMDB0031683; HMDB0032214; HMDB0032235; HMDB0032248; HMDB0033378; HMDB0034160; HMDB0034844; HMDB0036182; HMDB0037186; HMDB0037305; HMDB0037329; HMDB0037498; HMDB0037742; HMDB0037813; HMDB0038081; HMDB0038269; HMDB0038895; HMDB0038924; HMDB0039220; HMDB0040158; HMDB0040163; HMDB0040361; HMDB0041264; HMDB0041449; HMDB00529; HMDB10729;	C12H22O2	-H(-)	100

				HMDB29585; HMDB29763; HMDB31683; HMDB32214; HMDB32235; HMDB32248; HMDB33378; HMDB34160; HMDB34844; HMDB36182; HMDB37186; HMDB37305; HMDB37329; HMDB37498; HMDB37742; HMDB37813; HMDB38081; HMDB38269; HMDB38895; HMDB38924; HMDB39220; HMDB40158; HMDB40163; HMDB40361; HMDB41264; HMDB41449			
432	198,0960754	2578,951388	Cevimeline	CHEBI:3568; HMDB0014331; HMDB0061079; HMDB0061080; HMDB0061081; HMDB14331; HMDB61079; HMDB61080; HMDB61081	C10H17NOS	-H(-)	100
433	199,0074212	10092,19816	4-Vinylphenol sulfate	CHEBI:82931; HMDB0062775; HMDB0124988; HMDB62775	C8H8O4S	-H(-)	100
434	199,0622653	12834,05645	3,6-Dihydro-4-(4-methyl-3-pentenyl)-1,2-dithiin	HMDB0030009; HMDB30009	C10H16S2	-H(-)	100

435	199,0727505	6889,056648	Dihydroclavaminic acid	C06659; C17360	C8H12N2O4	-H(-)	100
436	199,0975185	6246,029582	cis-4-Decenedioic acid	HMDB0000603; HMDB0013227; HMDB0030989; HMDB0030990; HMDB0034491; HMDB0034971; HMDB0036715; HMDB00603; HMDB13227; HMDB30989; HMDB30990; HMDB34491; HMDB34971; HMDB36715	C10H16O4	-H(-)	100
437	199,1246688	2128,409785	Dexmedetomidine	C07450; CHEBI:4466; HMDB0014771; HMDB14771	C13H16N2	-H(-)	100
438	199,1340087	4648,356789	(S)-9-Hydroxy-10-undecenoic acid	CHEBI:132854; HMDB0032662; HMDB0036029; HMDB0037179; HMDB32662; HMDB36029; HMDB37179	C11H20O3	-H(-)	100
439	199,1703655	55132,3689	Dodecanoic acid (FA12:0)	C02679; CHEBI:201659; CHEBI:30805; CHEBI:87430; HMDB0000638; HMDB0030998; HMDB0032310; HMDB0032440; HMDB0033619; HMDB0034128; HMDB0034136; HMDB0034137; HMDB0035410; HMDB0036225; HMDB0040166; HMDB0059868; HMDB00638; HMDB30998;	C12H24O2	-H(-)	100

				HMDB32310; HMDB32440; HMDB33619; HMDB34128; HMDB34136; HMDB34137; HMDB35410; HMDB36225; HMDB40166; HMDB59868			
440	199,969563	3561,989151	Sulfo-Cys	C05824; CHEBI:27891; HMDB0000731; HMDB00731	C3H7NO5S2	-H(-)	100
441	200,1032412	2479,690131	(alpha-keto-dimethyl-delta-N,N-Dimethylguanidynol) valeric acid	HMDB0240212	C8H15N3O3	-H(-)	100
442	200,129788	2407,326107	Capryloylglycine	CHEBI:74099; CHEBI:89901; HMDB0000832; HMDB0013116; HMDB0041540; HMDB0059745; HMDB00832; HMDB13116; HMDB41540; HMDB59745	C10H19NO3	-H(-)	100
443	200,9856182	4473,097568	4-Sulfobenzoate	C02236	C7H6O5S	-H(-)	100

444	201,0232106	6226,12895	4-ethylphenylsulfate	CHEBI:82932; CHEBI:82935; HMDB0062551; HMDB0062721; HMDB62551; HMDB62721	C8H10O4S	-H(-)	100
445	201,1037361	4140,487179	Tetrahydroharmol	CHEBI:114202; HMDB0029835; HMDB0032756; HMDB29835; HMDB32756	C12H14N2O	-H(-)	100
446	201,1135422	12429,87014	Sebacic acid	C08277; C14566; C17803; CHEBI:41865; CHEBI:68453; CHEBI:70747; CHEBI:89889; HMDB0000792; HMDB0031510; HMDB0040196; HMDB0059708; HMDB0059719; HMDB0059754; HMDB0062180; HMDB00792; HMDB31510; HMDB40196; HMDB59708; HMDB59719; HMDB59754; HMDB62180	C10H18O4	-H(-)	100
447	201,1499841	3164,876495	3-Hydroxynonyl acetate	HMDB0032443; HMDB0061654; HMDB32443; HMDB61654	C11H22O3	-H(-)	100
448	201,1861339	1728,778583	Acetaldehyde diisoamyl acetal	HMDB0032153; HMDB0037310; HMDB32153; HMDB37310	C12H26O2	-H(-)	100
449	202,09835	5991,499497	Tryptophan	C00977; CHEBI:791437; HMDB0013318;	C11H13N3	-H(-)	100

	53		amide	HMDB0060860; HMDB13318; HMDB60860	O		
450	203,0026394	58347,82434	O-methoxycatechol-O-sulphate	CHEBI:133460; HMDB0060013; HMDB60013	C7H8O5S	-H(-)	100
451	203,0190452	39838,82689	Daucic acid	C05533; HMDB0031665; HMDB31665	C7H8O7	-H(-)	100
452	203,0680614	12302,67626	L-beta-aspartyl-L-alanine	CHEBI:73505; CHEBI:73845; HMDB0011162; HMDB0011667; HMDB0028683; HMDB0028746; HMDB0028819; HMDB0029149; HMDB11162; HMDB11667; HMDB28683; HMDB28746; HMDB28819; HMDB29149	C7H12N2O5	-H(-)	100
453	203,0826246	79565,76046	Tryptophan	C00078; C00525; C00806; C07839; C10968; C14916; CHEBI:16296; CHEBI:16828; CHEBI:27897; CHEBI:4888; HMDB0000929; HMDB0013609; HMDB0013840; HMDB0014892; HMDB0030396; HMDB0060533; HMDB0060878; HMDB0060967; HMDB00929; HMDB13609; HMDB13840; HMDB14892; HMDB30396;	C11H12N2O2	-H(-)	100

				HMDB60533; HMDB60878; HMDB60967			
454	203,1037207	30984,36123	Serinyl-Valine	C03955; C04210; CHEBI:74823; HMDB0029052; HMDB0029136; HMDB0033891; HMDB0039948; HMDB0094706; HMDB29052; HMDB29136; HMDB33891; HMDB39948; HMDB94706	C8H16N2O4	-H(-)	100
455	203,118177	8600,720018	Bufotenin	C08299; C08312; C10760; CHEBI:3210; CHEBI:8613; HMDB0041842; HMDB0042000; HMDB41842; HMDB42000	C12H16N2O	-H(-)	100
456	203,1438763	4233,577551	2,4-Di-tert-butylphenol	HMDB0013816; HMDB0031776; HMDB0036170; HMDB0041482; HMDB0133154; HMDB13816; HMDB31776; HMDB36170; HMDB41482	C14H20O	-H(-)	100
457	204,0310497	4372,238473	Xanthurenic acid	C02470; C05663; C08480; CHEBI:217069; HMDB0000881; HMDB0032963; HMDB0033528; HMDB00881; HMDB32963; HMDB33528	C10H7NO4	-H(-)	100
458	204,0527341	3372,618031	Lipoamide	C00248; CHEBI:17460; HMDB0000962; HMDB0038461; HMDB00962; HMDB06877; HMDB06950; HMDB38461	C8H15NOS2	-H(-)	100
459	204,0669328	18250,90144	Indolelactic acid	C02043; C05660; C09961; C10741; CHEBI:235589; CHEBI:24813; CHEBI:613590; CHEBI:89877;	C11H11NO3	-H(-)	100

				HMDB0000671; HMDB0004096; HMDB0011621; HMDB0030179; HMDB0032755; HMDB0059765; HMDB00671; HMDB04096; HMDB11621; HMDB30179; HMDB32755; HMDB59765			
460	204,1390788	2181,597417	Diethylpropion	C06954; C19134; CHEBI:4530; HMDB0015072; HMDB0060843; HMDB15072; HMDB60843	C13H19NO	-H(-)	100
461	204,9816452	13800,41035	5-Sulfoxymethylfurfural	CHEBI:89613; CHEBI:89615; HMDB0059752; HMDB0060016; HMDB0060018; HMDB59752; HMDB60016; HMDB60018	C6H6O6S	-H(-)	100
462	205,0139036	38931,93064	7-hydroxy-1-oxo-1H-isochromene-3-carboxylic acid	C18012; HMDB0128623; HMDB0128624; HMDB0128625; HMDB0131684; HMDB0136642; HMDB0136643	C10H6O5	-H(-)	100
463	205,1597204	40789,74767	4-(1,1,3,3-Tetramethylbutyl)-phenol	C09690; C11350; C14132; C14205; CHEBI:10284; CHEBI:88618; CHEBI:88921; HMDB0013825; HMDB0031737; HMDB0031738; HMDB0032397; HMDB0032528; HMDB0035245; HMDB0035631;	C14H22O	-H(-)	100

				HMDB0036023; HMDB0036024; HMDB0038130; HMDB0061831; HMDB0133179; HMDB13825; HMDB31737; HMDB31738; HMDB32397; HMDB32528; HMDB35245; HMDB35631; HMDB36023; HMDB36024; HMDB38130; HMDB61831			
464	206,0457248	3288,935041	4-(2-Aminophenyl)-2,4-dioxobutanoic acid	C01252; C05835; C12466; C14801; CHEBI:17442; CHEBI:34099; HMDB0000978; HMDB0060328; HMDB00978; HMDB60328	C10H9NO4	-H(-)	100
465	207,050699	7364,523002	Dihydrolipoate	C02147; CHEBI:18047; HMDB0012210; HMDB12210	C8H16O2S2	-H(-)	73
466	207,1028478	17443,64095	Isoelemicin	C04561; C04562; C10390; C10430; C10451; C15765; C16975; C17821; C17846; HMDB0029867; HMDB0029872; HMDB0030150; HMDB0030197; HMDB0030681; HMDB0031469; HMDB0033778; HMDB0034991; HMDB0035224; HMDB0038604; HMDB0040218; HMDB0040225;	C12H16O3	-H(-)	100

				HMDB0041411; HMDB0124910; HMDB0126246; HMDB0132980; HMDB0132982; HMDB0132984; HMDB0132985; HMDB0133263; HMDB29867; HMDB29872; HMDB30150; HMDB30197; HMDB30681; HMDB31469; HMDB33778; HMDB34991; HMDB35224; HMDB38604; HMDB40218; HMDB40225; HMDB41411			
467	207,1145425	4668,850667	Pilocarpine	C07474; C11071; C18619; CHEBI:8207; HMDB0015217; HMDB0060813; HMDB15217; HMDB60813	C11H16N2O2	-H(-)	100
468	207,1391702	6400,420767	Eremopetasinorol	C14236; HMDB0029668; HMDB0031869; HMDB0034672; HMDB0034984; HMDB0035228; HMDB0036686; HMDB0036821; HMDB0036824; HMDB0037776; HMDB0038047; HMDB0038529; HMDB0040233; HMDB0041636; HMDB0132947; HMDB29668; HMDB31869; HMDB34672; HMDB34984; HMDB35228; HMDB36686; HMDB36821; HMDB36824; HMDB37776; HMDB38047; HMDB38529; HMDB40233;	C13H20O2	-H(-)	100

				HMDB41636			
469	208,0625169	4070,563714	Hydroxyphenylacetylglycine	C03710; C05596; C16591; CHEBI:28595; CHEBI:80589; HMDB0000735; HMDB0060367; HMDB00735; HMDB0126552; HMDB0127991; HMDB0131190; HMDB60367	C10H11NO4	-H(-)	100
470	208,0768709	2423,125318	3-Methyl-9H-carbazole-9-carboxaldehyde	C16604; HMDB0032757; HMDB0033000; HMDB0060652; HMDB32757; HMDB33000; HMDB60652	C14H11NO	-H(-)	100
471	209,0136999	4089,564527	1-(Methylsulfinyl)propyl 1-propenyl disulfide	HMDB0033058; HMDB0033059; HMDB0033076; HMDB0033077; HMDB33058; HMDB33059; HMDB33076; HMDB33077	C7H14OS3	-H(-)	100
472	209,0674636	27751,08908	Sedoheptulose; 1,3,7-Trimethyluric acid	C02076; C06397; C08236; C08355; C16361; C19612; CHEBI:130460; CHEBI:28723; CHEBI:691622; HMDB0002123; HMDB0003219; HMDB0029901; HMDB0029935; HMDB0029952;	C7H14O7; C8H10N4O3	-H(-); -H(-)	100

				HMDB0036431; HMDB02123; HMDB03219; HMDB29901; HMDB29935; HMDB29952; HMDB36431			
473	209,0819425	15875,54554	Sinapyl alcohol	C02325; C07350; C10709; CHEBI:15951; CHEBI:64557; HMDB0013070; HMDB0029187; HMDB0029233; HMDB0033798; HMDB0034047; HMDB0036199; HMDB0039428; HMDB0041406; HMDB0060737; HMDB0125803; HMDB0127493; HMDB0129253; HMDB0129254; HMDB0129255; HMDB0129256; HMDB0130385; HMDB0133478; HMDB0133511; HMDB0133519; HMDB0133526; HMDB0133535; HMDB0135671; HMDB13070; HMDB29187; HMDB29233; HMDB33798; HMDB34047; HMDB36199; HMDB39428; HMDB41406; HMDB60737	C11H14O4	-H(-)	100
474	209,0940549	8046,630572	Aprobarbital	C07826; C15986; CHEBI:2791; HMDB0015441; HMDB15441	C10H14N2O3	-H(-)	100
475	209,1296584	4686,729936	L,L-Cyclo(leucyl	HMDB0034276; HMDB34276	C11H18N2O2	-H(-)	100

			prolyl)				
476	209,1413809	2280,82438	Salicifoline	C17063	C12H20NO2	-H(-)	100
477	209,1542571	9474,541431	C13:2	HMDB0030425; HMDB0031014; HMDB0032052; HMDB0032098; HMDB0037286; HMDB0037307; HMDB0037390; HMDB0038249; HMDB0038258; HMDB0038291; HMDB0040232; HMDB0041554; HMDB30425; HMDB31014; HMDB32052; HMDB32098; HMDB37286; HMDB37307; HMDB37390; HMDB38249; HMDB38258; HMDB38291; HMDB40232; HMDB41554	C13H22O2	-H(-)	100
478	210,0685022	7624,71048	Milrinone	C07224; CHEBI:50693; HMDB0014380; HMDB14380	C12H9N3O	-H(-)	71
479	210,104582	1970,645919	Varenicline	C19306; CHEBI:84500; HMDB0015398; HMDB0029746; HMDB15398; HMDB29746	C13H13N3	-H(-)	100
480	211,0254206	4733,214508	2-oxo-3-(3,4,5-trihydroxyphenyl)propan	C04366; C12624; C18338; HMDB0125210; HMDB0126568; HMDB0126571; HMDB0128683; HMDB0128685; HMDB0137303	C9H8O6	-H(-)	100

			oic acid				
481	211,0621124	10170,93343	Vanillactic acid	C09801; C10674; C11155; CHEBI:1240674; CHEBI:454991; HMDB0000913; HMDB0031704; HMDB0033835; HMDB0033839; HMDB0034493; HMDB0041286; HMDB0041661; HMDB0041663; HMDB0041665; HMDB0060557; HMDB00913; HMDB0125013; HMDB0125520; HMDB0125526; HMDB0125540; HMDB0129354; HMDB0131424; HMDB0133486; HMDB0142083; HMDB31704; HMDB33835; HMDB33839; HMDB34493; HMDB41286; HMDB41661; HMDB41663; HMDB41665; HMDB60557	C10H12O5	-H(-)	100
482	211,0975159	10799,59152	3,4-Methyleneazelaic acid	C20790; CHEBI:89902; HMDB0059744; HMDB59744	C11H16O4	-H(-)	100
483	211,1136105	3702,642076	11,12-Dihydrolactaroviolin	C14258; C14666; HMDB0035736; HMDB0036454; HMDB0041460; HMDB0135216; HMDB0135544; HMDB0135578; HMDB0135579; HMDB0135580; HMDB35736; HMDB36454; HMDB41460	C15H16O	-H(-)	100

484	211,1341236	10881,68326	Cucurbic acid	C08482; C08509; C16309; C16311; CHEBI:19144; HMDB0029388; HMDB0033601; HMDB0035085; HMDB0037326; HMDB0041572; HMDB29388; HMDB33601; HMDB35085; HMDB37326; HMDB41572	C12H20O3	-H(-)	100
485	211,1455325	3312,689775	1,4''-Bipiperidine-1''-carboxylic acid	C16836; HMDB0060336; HMDB60336	C11H20N2O2	-H(-)	100
486	211,1700166	5107,833656	10-Undecenyl acetate	C18206; HMDB0031017; HMDB0031028; HMDB0031741; HMDB0032792; HMDB0034286; HMDB0037187; HMDB0037226; HMDB0037626; HMDB0037907; HMDB0038078; HMDB0039805; HMDB0040451; HMDB31017; HMDB31028; HMDB31741; HMDB32792; HMDB34286; HMDB37187; HMDB37226; HMDB37626; HMDB37907; HMDB38078; HMDB39805; HMDB40451	C13H24O2	-H(-)	100

487	212,002556	77143,3516	Indoxyl sulfate	CHEBI:43355; HMDB0000682; HMDB00682; HMDB03309	C8H7NO4S	-H(-)	100
488	212,0750833	84116,75054	2-(4-Methyl-5-thiazolyl)ethyl butanoate	CHEBI:10979; HMDB0032418; HMDB0032422; HMDB32418; HMDB32422	C10H15NO2S	-H(-)	100
489	212,9794525	2527,736215	2-Benzothiazolesulfonamide	C14181	C7H6N2O2S2	-H(-)	100
490	213,0192046	30906,22608	Dibenzo[1,4]dioxin-2,3-dione	C03861	C12H6O4	-H(-)	100
491	213,1503344	6525,635414	3-Oxododecanoic acid	C02367; CHEBI:18037; HMDB0010727; HMDB0037398; HMDB10727; HMDB37398	C12H22O3	-H(-)	100
492	213,1859301	8319,407746	C13:0	C04780; C16640; C17076; CHEBI:15720; CHEBI:45919; CHEBI:86973; CHEBI:87494; CHEBI:87536; HMDB0000910; HMDB0029552;	C13H26O2	-H(-)	100

				HMDB0031018; HMDB0032211; HMDB0034140; HMDB0036217; HMDB0036219; HMDB0037311; HMDB0038729; HMDB0059900; HMDB0061828; HMDB0061829; HMDB00910; HMDB29552; HMDB31018; HMDB32211; HMDB34140; HMDB36217; HMDB36219; HMDB37311; HMDB38729; HMDB59900; HMDB61828; HMDB61829			
493	214,0712024	9827,447314	Succinylproline	C11711	C9H13NO5	-H(-)	100
494	214,1453963	3558,643171	N-Nonanoylglycine	C18830; CHEBI:74439; HMDB0013279; HMDB13279	C11H21NO3	-H(-)	100
495	215,1655126	7942,789081	3-Hydroxydodecanoic acid	C08317; CHEBI:36206; CHEBI:39567; CHEBI:43197; HMDB0000387; HMDB0002059; HMDB0010728; HMDB00387; HMDB0040169; HMDB02059; HMDB10728; HMDB40169	C12H24O3	-H(-)	100
496	216,0343213	109336,8058	Tyramine-O-sulfate	CHEBI:133530; HMDB0006409; HMDB06409	C8H11NO4S	-H(-)	100

497	216,099415	6811,282662	N-a-Acetylcitrulline; 5-Hydroxysebacate	C15532; CHEBI:49006; HMDB0000856; HMDB0028685; HMDB0028701; HMDB0028790; HMDB0029189; HMDB00856; HMDB28685; HMDB28701; HMDB28790; HMDB29189	C10H17O5; C8H15N3O4	-H(-); -H(-)	100
498	216,1246378	3894,967159	Propionylcarnitine	C03017; CHEBI:28867; CHEBI:53210; HMDB0000824; HMDB0062514; HMDB00824; HMDB62514	C10H19NO4	-H(-)	100
499	216,1343751	3774,697532	Gamma-glutamyl-L-putrescine	C05341; C15699; CHEBI:27749; CHEBI:48005; HMDB0012230; HMDB0028692; HMDB0028944; HMDB0060442; HMDB12230; HMDB28692; HMDB28944; HMDB60442	C9H19N3O3	-H(-)	100
500	216,981911	6098,371181	5-Sulfosalicylic acid	C16199; CHEBI:480324; CHEBI:88700; HMDB0011725; HMDB0059968; HMDB0059982; HMDB11725; HMDB59968; HMDB59982	C7H6O6S	-H(-)	100
501	217,0180623	16934,6291	Tyrosol 4-sulfate	HMDB0041785; HMDB0124986; HMDB41785	C8H10O5S	-H(-)	100
502	217,0867101	25203,68641	(R)-Bitalin A	C08744; C08979; C09006; HMDB0040358; HMDB40358	C13H14O3	-H(-)	100

503	217,1243753	7366,346215	C14:5	HMDB0030759; HMDB0032227; HMDB0037704; HMDB0037738; HMDB0038281; HMDB0041318; HMDB0133155; HMDB0133156; HMDB0133157; HMDB0133158; HMDB0133159; HMDB0133160; HMDB0133161; HMDB0133162; HMDB30759; HMDB32227; HMDB37704; HMDB37738; HMDB38281; HMDB41318	C14H18O2	-H(-)	100
504	217,1806308	2830,812223	8,8-Dimethoxy-2,6-dimethyl-2-octanol	HMDB0040219; HMDB40219	C12H26O3	-H(-)	100
505	217,9767749	11466,89304	4-Nitrophenyl sulfate	CHEBI:35422; HMDB0006492; HMDB06492	C6H5NO6S	-H(-)	100
506	218,0339326	39492,75671	4-Amino-2-methyl-5-phosphomethylpyrimidin	C04556	C6H10N3O4P	-H(-)	100

			e				
507	218,103493	16833,39444	Pantothenic acid	C00864; CHEBI:46905; CHEBI:7916; HMDB0000210; HMDB00210; HMDB0062717; HMDB62717	C9H17NO5	-H(-)	100
508	219,0491284	16421,80504	2-(2-Thienylmethylene)-1,6-dioxaspiro[4.4]non-3-ene	HMDB0034857; HMDB0035149; HMDB34857; HMDB35149	C12H12O2S	-H(-)	100
509	219,0812031	6590,450655	Alanyl-Methionine; 1-Hydroxypyrene	C14519; HMDB0013139; HMDB0028693; HMDB0028788; HMDB0028966; HMDB0029124; HMDB13139; HMDB28693; HMDB28788; HMDB28966; HMDB29124	C16H12O; C8H16N2O3S	-H(-); -H(-)	100
510	219,1387923	3087,656279	2,6-Di-tert-butylbenzoquinone	C09519; C09673; HMDB0013817; HMDB0036389; HMDB0037606; HMDB0037714; HMDB0037718; HMDB0038996; HMDB0039539; HMDB0040217; HMDB0040226; HMDB0126515; HMDB0126516;	C14H20O2	-H(-)	100

				HMDB0126517; HMDB0126518; HMDB0126519; HMDB0126520; HMDB0133164; HMDB0133165; HMDB0133166; HMDB0133167; HMDB0133169; HMDB0133170; HMDB0133180; HMDB13817; HMDB36389; HMDB37606; HMDB37714; HMDB37718; HMDB38996; HMDB39539; HMDB40217; HMDB40226			
511	219,1748362	6512,24848	Nootkatol	C03461; C09719; C09720; C14550; C14693; C16908; C16945; C16974; C17462; C17915; C17953; C17955; C19676; C19711; C19938; C20229; C20307; C20325; CHEBI:10441; CHEBI:15894; CHEBI:34247; CHEBI:34440; HMDB0013688; HMDB0030232; HMDB0032220; HMDB0033826; HMDB0034661; HMDB0034718; HMDB0034940; HMDB0035020; HMDB0035026; HMDB0035097; HMDB0035306; HMDB0035391; HMDB0035645; HMDB0035704; HMDB0035718; HMDB0035720; HMDB0035739; HMDB0035793; HMDB0036118; HMDB0036192; HMDB0036402;	C15H24O	-H(-)	100

				HMDB0036420; HMDB0036716; HMDB0036717; HMDB0036788; HMDB0036789; HMDB0036793; HMDB0036798; HMDB0037069; HMDB0037392; HMDB0037395; HMDB0037811; HMDB0038119; HMDB0038123; HMDB0038134; HMDB0038146; HMDB0038160; HMDB0038193; HMDB0038208; HMDB0038209; HMDB0038210; HMDB0038211; HMDB0038212; HMDB0038512; HMDB0038982; HMDB0039532; HMDB0039711; HMDB0040763; HMDB0059836; HMDB0060356; HMDB0134152; HMDB13688; HMDB30232; HMDB32220; HMDB33826; HMDB34661; HMDB34718; HMDB34940; HMDB35020; HMDB35026; HMDB35097; HMDB35306; HMDB35391; HMDB35645; HMDB35704; HMDB35718; HMDB35720; HMDB35739; HMDB35793; HMDB36118; HMDB36192; HMDB36402; HMDB36420; HMDB36716; HMDB36717; HMDB36788; HMDB36789; HMDB36793; HMDB36798; HMDB37069; HMDB37392;			

				HMDB37395; HMDB37811; HMDB38119; HMDB38123; HMDB38134; HMDB38146; HMDB38160; HMDB38193; HMDB38208; HMDB38209; HMDB38210; HMDB38211; HMDB38212; HMDB38512; HMDB38982; HMDB39532; HMDB39711; HMDB40763; HMDB59836; HMDB60356			
512	221,0670512	6058,132225	Ethyl glucuronide	C02655; CHEBI:87248; HMDB0010325; HMDB0125202; HMDB0131286; HMDB10325	C8H14O7	-H(-)	100
513	221,0817908	10064,58495	Monoisobutyl phthalic acid	C10429; C10449; C14175; C19228; C20225; CHEBI:1156602; CHEBI:34698; CHEBI:544678; CHEBI:90038; HMDB0002056; HMDB0013247; HMDB0029226; HMDB0029470; HMDB0030725; HMDB0031668; HMDB0033776; HMDB0034056; HMDB0037130; HMDB0037681; HMDB0038563; HMDB0041379; HMDB0094660; HMDB0127824; HMDB0131283; HMDB0131284; HMDB0131285; HMDB0135689; HMDB0135900; HMDB0135904; HMDB0135906; HMDB02056; HMDB13247;	C12H14O4	-H(-)	100

				HMDB29226; HMDB29470; HMDB30725; HMDB31668; HMDB33776; HMDB34056; HMDB37130; HMDB37681; HMDB38563; HMDB41379; HMDB94660			
514	221,0935572	4566,904259	Glycyl-Phenylalanine	C20843; HMDB0028848; HMDB0028995; HMDB28848; HMDB28995	C11H14N2O3	-H(-)	100
515	221,1186362	3842,411862	Annuionone B	C02533; C04223; CHEBI:133197; CHEBI:18429; CHEBI:88836; HMDB0032121; HMDB0036819; HMDB0038894; HMDB0060565; HMDB0060920; HMDB0060921; HMDB0061943; HMDB0132941; HMDB0132943; HMDB0132945; HMDB0132946; HMDB0140966; HMDB0140967; HMDB32121; HMDB36819; HMDB38894; HMDB60565; HMDB60698; HMDB60920; HMDB60921; HMDB61943	C13H18O3	-H(-)	100
516	221,1288541	2280,88994	3-Hydroxymonoethylglyci	C11763; C16572; C18952; HMDB0060678; HMDB60678	C12H18N2O2	-H(-)	100

			nexylidide				
517	221,1544906	5033,504255	Rishitin	C09715; C16977; C16983; HMDB0035593; HMDB0036790; HMDB0036791; HMDB0037605; HMDB0037820; HMDB0040178; HMDB35593; HMDB36790; HMDB36791; HMDB37605; HMDB37820; HMDB40178	C14H22O2	-H(-)	100
518	221,1911375	1726,520965	Farnesol	C01126; C03220; C09621; C09628; C09631; C09651; C09663; C09664; C09676; C09682; C09698; C09704; C09705; C16143; C16813; C16970; C17124; C18245; C19743; C19744; C19746; C19755; C19756; C19893; C19974; C20172; C20181; C20184; C20479; C20576; CHEBI:16619; CHEBI:16774; CHEBI:7524; HMDB0004305; HMDB0030938; HMDB0030939; HMDB0033239; HMDB0034951; HMDB0034982; HMDB0035021; HMDB0035199; HMDB0035351; HMDB0035364; HMDB0035383; HMDB0035662; HMDB0035663; HMDB0035711; HMDB0035811; HMDB0035868; HMDB0036111; HMDB0036197;	C15H26O	-H(-)	100

				HMDB0036198; HMDB0036421; HMDB0036445; HMDB0036447; HMDB0036452; HMDB0036579; HMDB0036580; HMDB0036642; HMDB0036645; HMDB0036646; HMDB0036679; HMDB0036732; HMDB0036908; HMDB0037031; HMDB0037066; HMDB0037067; HMDB0037234; HMDB0037394; HMDB0038167; HMDB0038213; HMDB0039538; HMDB0039744; HMDB0040422; HMDB0041575; HMDB0059841; HMDB0059849; HMDB04305; HMDB30938; HMDB30939; HMDB33239; HMDB34951; HMDB34982; HMDB35021; HMDB35199; HMDB35351; HMDB35364; HMDB35383; HMDB35662; HMDB35663; HMDB35711; HMDB35811; HMDB35868; HMDB36111; HMDB36197; HMDB36198; HMDB36421; HMDB36445; HMDB36447; HMDB36452; HMDB36579; HMDB36580; HMDB36642; HMDB36645; HMDB36646; HMDB36679; HMDB36732; HMDB36908; HMDB37031; HMDB37066; HMDB37067;			

				HMDB37234; HMDB37394; HMDB38167; HMDB38213; HMDB39538; HMDB39744; HMDB40422; HMDB41575; HMDB59841; HMDB59849			
519	221,9992632	2370,888253	4-Methyl-5-(2-phosphoethyl)thiazole	C04327	C6H10NO4PS	-H(-)	100
520	222,1127071	3082,108535	Cerulenin	C12058; C13138; C16704; CHEBI:171741; HMDB0015168; HMDB15168	C12H17NO3	-H(-)	100
521	222,1496366	3784,144565	Dihydrodioscorine	C10868; HMDB0029828; HMDB0029875; HMDB0030268; HMDB29828; HMDB29875; HMDB30268	C13H21NO2	-H(-)	100
522	223,0977908	25065,33143	Diplosporin	C10673; C20417; HMDB0030680; HMDB0030703; HMDB0032552; HMDB0032663; HMDB0036203; HMDB0040629; HMDB0040890; HMDB0124917; HMDB0124919; HMDB0124920; HMDB0125801; HMDB0127761; HMDB0127765; HMDB0135709; HMDB30680; HMDB30703; HMDB32552;	C12H16O4	-H(-)	100

				HMDB32663; HMDB36203; HMDB40629; HMDB40890			
523	223,1337894	14013,96475	Epoxyeremopetasinorol	C01760; C04166; C11512; C16318; CHEBI:15929; HMDB0029670; HMDB0032679; HMDB0032689; HMDB0034564; HMDB0036583; HMDB0037244; HMDB0037726; HMDB0037730; HMDB0037736; HMDB0112084; HMDB29670; HMDB32679; HMDB32689; HMDB34564; HMDB36583; HMDB37244; HMDB37726; HMDB37730; HMDB37736	C13H20O3	-H(-)	100
524	223,1701523	12348,03364	5,8-Tetradecadienoic acid	CHEBI:70719; HMDB0000560; HMDB0030426; HMDB0030427; HMDB0031015; HMDB0032053; HMDB0032342; HMDB0032524; HMDB0036424; HMDB0037814; HMDB0038246; HMDB0038259; HMDB0038260; HMDB0039129; HMDB00560; HMDB30426; HMDB30427; HMDB31015; HMDB32053; HMDB32342; HMDB32524; HMDB36424; HMDB37814; HMDB38246; HMDB38259; HMDB38260; HMDB39129	C14H24O2	-H(-)	100

525	223,1807352	3837,752797	Cuscohygrine	C06183; C06521; C11358; CHEBI:27920; HMDB0030290; HMDB30290	C13H24N2O	-H(-)	100
526	224,078884	22390,06082	Aciclovir	C06810; CHEBI:2453; HMDB0014925; HMDB14925	C8H11N5O3	-H(-)	100
527	225,0521903	10615,49037	3-Nitrotyrosine	CHEBI:44454; HMDB0001904; HMDB01904	C9H10N2O5	-H(-)	100
528	225,1129787	16379,07824	Allixin	C19142; CHEBI:89935; HMDB0040705; HMDB0059729; HMDB40705; HMDB59729	C12H18O4	-H(-)	100
529	225,1613222	9741,221618	1,8-Diazacyclotetradecane-2,9-dione	C04277; C20514	C12H22N2O2	-H(-)	100
530	225,1856735	33032,67201	C14:1	C08322; C16947; CHEBI:131381; CHEBI:27781; CHEBI:37271; CHEBI:53206; CHEBI:70716; HMDB0000499; HMDB0000521; HMDB0002000; HMDB0005051; HMDB0010732; HMDB0030921; HMDB0031029; HMDB0031073; HMDB0032152; HMDB0032321; HMDB0034561; HMDB0037188;	C14H26O2	-H(-)	100

				HMDB0037189; HMDB0037227; HMDB0037228; HMDB0037369; HMDB0037633; HMDB0038056; HMDB0040228; HMDB00499; HMDB00521; HMDB0062243; HMDB0062248; HMDB0094671; HMDB02000; HMDB05051; HMDB10732; HMDB30921; HMDB31029; HMDB31073; HMDB32152; HMDB32321; HMDB34561; HMDB37188; HMDB37189; HMDB37227; HMDB37228; HMDB37369; HMDB37633; HMDB38056; HMDB40228; HMDB62243; HMDB62248; HMDB94671			
531	226,0880727	11213,43484	Koenoline	C03621; C04081; C10679; HMDB0033452; HMDB0041444; HMDB33452; HMDB41444	C14H13NO2	-H(-)	100
532	226,9944909	6323,808727	3,5-Dinitrosalicylic acid; Thiolutin	C11319; HMDB0034228; HMDB34228	C7H4N2O7; C8H8N2O2S2	-H(-); -H(-)	100
533	227,0439161	7398,527826	L-2-Aminoethyl	C03872; CHEBI:15916; HMDB0031950; HMDB31950	C5H13N2O6P	-H(-)	100

			seryl phosphate				
534	227,0553897	8375,927162	2-(2,3,5-trihydroxy-4-methoxyphenyl)propanoic acid	C06581; HMDB0125034; HMDB0125049; HMDB0125592; HMDB0125596; HMDB0141334; HMDB0142089	C10H12O6	-H(-)	100
535	227,069193	4716,619861	Pemirolast	CHEBI:775149; HMDB0015023; HMDB15023	C10H8N6O	-H(-)	100
536	227,092469	6054,423764	Propyl propane thiosulfonate	HMDB0032496; HMDB32496	C11H16O5	-H(-)	100
537	227,1200116	7486,775681	Metyrapol	HMDB0060605; HMDB60605	C14H16N2O	-H(-)	96
538	227,1288517	9357,371091	Traumatic acid	C16308; CHEBI:545687; HMDB0000933; HMDB0030994; HMDB00933; HMDB30994	C12H20O4	-H(-)	100
539	227,165518	4639,840653	11-Hydroxy-9-	HMDB0035881; HMDB0036139; HMDB0037212; HMDB0040004; HMDB35881; HMDB36139;	C13H24O3	-H(-)	100

			tridecenoic acid	HMDB37212; HMDB40004			
540	227,2017578	219079,1912	C14:0	C06424; C13798; CHEBI:23580; CHEBI:28875; CHEBI:34491; CHEBI:43722; CHEBI:542954; CHEBI:87427; CHEBI:87570; CHEBI:90062; HMDB0000806; HMDB0002221; HMDB0031072; HMDB0032318; HMDB0032548; HMDB0033788; HMDB0034461; HMDB0036216; HMDB0037312; HMDB0037495; HMDB0038034; HMDB0038969; HMDB0059865; HMDB0061781; HMDB00806; HMDB02221; HMDB31072; HMDB32318; HMDB32548; HMDB33788; HMDB34461; HMDB36216; HMDB37312; HMDB37495; HMDB38034; HMDB38969; HMDB59865; HMDB61781	C14H28O2	-H(-)	100
541	228,1608353	4678,789575	N-Decanoylglycine	CHEBI:74430; HMDB0013267; HMDB13267	C12H23NO3	-H(-)	100
542	229,05415	10900,43089	Thymol	CHEBI:82911; HMDB0062720; HMDB0133674;	C10H14O4	-H(-)	100

	18		Sulfate	HMDB62720	S		
543	229,097472	9726,892813	(1xi,3xi)-1,2,3,4-Tetrahydro-1-methyl-beta-carboline-3-carboxylic acid	HMDB0037942; HMDB0060811; HMDB37942; HMDB60811	C13H14N2O2	-H(-)	100
544	229,119978	4830,788963	Hydroxyprolyl-Valine	HMDB0028876; HMDB0029128; HMDB28876; HMDB29128	C10H18N2O4	-H(-)	100
545	229,180181	3511,086644	N1,N8-Diacetylspermidine; 3-[[5-Methyl-2-(1-methylethyl) cyclohexyl]oxy]-1,2...	HMDB0036133; HMDB0041947; HMDB0061655; HMDB36133; HMDB41947; HMDB61655	C11H24N3O2; C13H26O3	-H(-); -H(-)	100

546	230,0134096	267307,4382	Paracetamol sulfate	CHEBI:32635; CHEBI:88751; HMDB0059911; HMDB0059994; HMDB59911; HMDB59994	C8H9NO5S	-H(-)	100
547	230,9974284	208208,6038	2,4-Dihydroxyacetophenone 5-sulfate	HMDB0041646; HMDB0041789; HMDB0125163; HMDB0128010; HMDB0132500; HMDB41646; HMDB41789	C8H8O6S	-H(-)	100
548	231,0224019	48894,04804	Cyclobrassinone	HMDB0034209; HMDB34209	C11H8N2O2S	-H(-)	100
549	232,0291761	18922,96332	Dopamine 4-sulfate	C07770; C13690; C13691; CHEBI:37946; HMDB0004148; HMDB0006275; HMDB04148; HMDB06275	C8H11NO5S	-H(-)	100
550	232,1374551	2404,451203	Hexahomomethionine	C17233	C11H23NO2S	-H(-)	100
551	232,9773392	2503,006957	4-hydroxy-3-(sulfooxy)benzoic acid	HMDB0124993; HMDB0134105	C7H6O7S	-H(-)	73
552	233,1286395	3416,694276	4-Coumaroylp	C11200; C18326; HMDB0033461; HMDB0139874; HMDB33461	C13H18N2O2	-H(-)	100

			utrescine				
553	234,9843195	11017,67052	1,3-Benzenedisulfonamide	C14182	C6H8N2O4S2	-H(-)	100
554	235,0252057	3092,978467	2-Carboxy-2-hydroxy-8-carboxychromene	C14094; C14095	C11H8O6	-H(-)	100
555	235,0614034	3605,019747	Dillapional	C09313; C09958; HMDB0030582; HMDB0030858; HMDB0033096; HMDB0040407; HMDB0128676; HMDB0137293; HMDB30582; HMDB30858; HMDB33096; HMDB40407	C12H12O5	-H(-)	100
556	235,13361	4005,746876	Heptyl 4-hydroxybenzoate	C14274; C14718; CHEBI:17879; HMDB0034462; HMDB0040778; HMDB34462; HMDB40778	C14H20O3	-H(-)	100
557	235,1449726	2180,213161	Procaine	C07375; C07894; C17723; CHEBI:8430; HMDB0014859; HMDB0139525; HMDB14859	C13H20N2O2	-H(-)	100
558	235,16993	3300,393103	Capsidiol	C02293; C09627; C09678; C09681; C09700;	C15H24O2	-H(-)	100

	97			C09733; C16502; C16946; C17493; C17604; CHEBI:28283; CHEBI:545749; HMDB0002352; HMDB0030891; HMDB0030916; HMDB0030920; HMDB0031348; HMDB0032048; HMDB0032292; HMDB0032681; HMDB0033083; HMDB0033104; HMDB0034714; HMDB0034722; HMDB0035032; HMDB0035040; HMDB0035127; HMDB0035147; HMDB0035301; HMDB0035648; HMDB0035827; HMDB0036446; HMDB0036549; HMDB0036668; HMDB0036680; HMDB0036687; HMDB0037393; HMDB0037906; HMDB0038027; HMDB0038122; HMDB0038144; HMDB0038178; HMDB0039525; HMDB0039688; HMDB0040712; HMDB02352; HMDB30891; HMDB30916; HMDB30920; HMDB31348; HMDB32048; HMDB32292; HMDB32681; HMDB33083; HMDB33104; HMDB34714; HMDB34722; HMDB35032; HMDB35040; HMDB35127; HMDB35147; HMDB35301; HMDB35648; HMDB35827; HMDB36446; HMDB36549; HMDB36668;			

				HMDB36680; HMDB36687; HMDB37393; HMDB37906; HMDB38027; HMDB38122; HMDB38144; HMDB38178; HMDB39525; HMDB39688; HMDB40712			
559	236,0697756	2077,194597	Dicrotophos	C18656	C8H16NO5P	-H(-)	100
560	236,0928296	5574,289591	Salsoline-1-carboxylate	HMDB0013067; HMDB0032775; HMDB0062175; HMDB0139939; HMDB13067; HMDB32775; HMDB62175	C12H15NO4	-H(-)	100
561	237,0338578	2808,470271	6-(2-amino-2-carboxyethyl)-4-hydroxybenzothiazole	CHEBI:84343; HMDB0062793; HMDB62793	C10H10N2O3S	-H(-)	100
562	237,0438249	14620,34723	1-Propenyl 1-(propylsulfinyl)propyl	HMDB0033073; HMDB0033074; HMDB0036370; HMDB0036375; HMDB33073; HMDB33074; HMDB36370; HMDB36375	C9H18OS3	-H(-)	100

			disulfide				
563	237,0770261	34119,40664	3,4,5-Trimethoxycinnamic acid	HMDB0002511; HMDB0011721; HMDB0031771; HMDB0124869; HMDB0128658; HMDB0128659; HMDB0128697; HMDB02511; HMDB11721; HMDB31771	C12H14O5	-H(-)	100
564	237,0920897	31557,88762	15(R)-hydroperoxy-EPE; Cinnamyl benzoate	CHEBI:42334; CHEBI:724725; HMDB0029700; HMDB0032585; HMDB0040286; HMDB0062295; HMDB29700; HMDB32585; HMDB40286; HMDB62295	C16H14O2; C8H18N2O4S	-H(-); -H(-)	100
565	237,1862937	4531,918756	Geranyl 3-methylbutanoate	C09632; C09652; C09653; C09722; C16773; C16774; C16920; C17427; CHEBI:80720; HMDB0029350; HMDB0030428; HMDB0031383; HMDB0031384; HMDB0032054; HMDB0032209; HMDB0032291; HMDB0032343; HMDB0033228; HMDB0034673; HMDB0035287; HMDB0035887; HMDB0036032; HMDB0036730; HMDB0036880; HMDB0037195; HMDB0037279; HMDB0037284; HMDB0038136; HMDB0038138; HMDB0038196;	C15H26O2	-H(-)	100

				HMDB0038197; HMDB0038247; HMDB0038248; HMDB0038250; HMDB0039130; HMDB0039745; HMDB0040273; HMDB0040281; HMDB0041589; HMDB29350; HMDB30428; HMDB31383; HMDB31384; HMDB32054; HMDB32209; HMDB32291; HMDB32343; HMDB33228; HMDB34673; HMDB35287; HMDB35887; HMDB36032; HMDB36730; HMDB36880; HMDB37195; HMDB37279; HMDB37284; HMDB38136; HMDB38138; HMDB38196; HMDB38197; HMDB38247; HMDB38248; HMDB38250; HMDB39130; HMDB39745; HMDB40273; HMDB40281; HMDB41589			
566	238,0506721	6729,410492	Marcanine A	C08477; C10583; HMDB0033757; HMDB33757	C14H9NO3	-H(-)	100
567	238,0941853	8657,909878	N-Gluconyl ethanolamine; Dihydrobiop	C00268; C02953; C04244; C20263; CHEBI:17248; CHEBI:64277; HMDB0000038; HMDB0002065; HMDB0002215; HMDB00038; HMDB0013031; HMDB0013642; HMDB0032293; HMDB02065;	C8H17NO7; C9H13N5O3	-H(-); -H(-)	100

			terin	HMDB02215; HMDB13031; HMDB13642; HMDB32293			
568	239,0019209	2844,377483	1,2-Dihydroxynaphthalene-6-sulfonate	C16196	C10H8O5S	-H(-)	100
569	239,059923	52649,8086	Propyl 1-(propylsulfinyl)propyl disulfide	HMDB0033071; HMDB33071	C9H20OS3	-H(-)	100
570	239,092207	77119,04924	3-(3,4,5-Trimethoxyphenyl)propanoic acid	CHEBI:41254; CHEBI:583580; HMDB0030254; HMDB0038627; HMDB0041756; HMDB0061112; HMDB0062776; HMDB0125802; HMDB0125804; HMDB0127748; HMDB0127826; HMDB0128672; HMDB0128705; HMDB0128721; HMDB0142074; HMDB30254; HMDB38627; HMDB41756; HMDB61112; HMDB62776	C12H16O5	-H(-)	100
571	239,1649945	6843,49488	L-Menthyl acetoacetat	HMDB0032369; HMDB32369	C14H24O3	-H(-)	100

			e				
572	239,2013639	8315,681713	C15:1	C17676; CHEBI:46643; HMDB0029765; HMDB0032347; HMDB0034455; HMDB0036426; HMDB0037190; HMDB0037211; HMDB0037229; HMDB0038954; HMDB0039715; HMDB0040997; HMDB29765; HMDB32347; HMDB34455; HMDB36426; HMDB37190; HMDB37211; HMDB37229; HMDB38954; HMDB39715; HMDB40997	C15H28O2	-H(-)	100
573	239,9980257	2842,559169	Indole-3-carboxilic acid-O-sulphate	CHEBI:89621; HMDB0060002; HMDB60002	C9H7NO5S	-H(-)	100
574	241,1442134	7537,959261	2-Carboxy-4-dodecanolide	HMDB0030987; HMDB0038736; HMDB30987; HMDB38736	C13H22O4	-H(-)	100
575	241,1805851	9095,885755	3-Oxotetradec	CHEBI:37270; HMDB0010730; HMDB0030982; HMDB0032370; HMDB10730; HMDB30982;	C14H26O3	-H(-)	100

			anoic acid	HMDB32370			
576	241,2173254	50943,74766	C15:0	C16537; C16665; CHEBI:32361; CHEBI:39250; CHEBI:447965; HMDB0000826; HMDB0030469; HMDB0032250; HMDB0032328; HMDB0036218; HMDB0036220; HMDB0037306; HMDB0038907; HMDB0040998; HMDB0041588; HMDB0059820; HMDB0059833; HMDB0061707; HMDB00826; HMDB30469; HMDB32250; HMDB32328; HMDB36218; HMDB36220; HMDB37306; HMDB38907; HMDB40998; HMDB41588; HMDB59820; HMDB59833; HMDB61707	C15H30O2	-H(-)	100
577	242,1764592	11589,9174	N-Undecanoylglycine	CHEBI:74438; HMDB0013286; HMDB13286	C13H25NO3	-H(-)	100
578	242,1881034	5012,829979	3-Hydroxymyristate	CHEBI:84197; HMDB0094672; HMDB94672	C14H27O3	-H(-)	100
579	242,997017	5002,550469	(2E)-3-[3-(sulfooxy)ph	HMDB0124975; HMDB0125166; HMDB0127985; HMDB0128093; HMDB0134054	C9H8O6S	-H(-)	100

			enyl]prop-2-enoic acid				
580	243,0625245	53428,6321	Uridine	C00299; C02067; C16745; CHEBI:16704; CHEBI:17802; HMDB0000296; HMDB0000767; HMDB00296; HMDB00767; HMDB06075	C9H12N2O6	-H(-)	100
581	243,1244089	7401,779355	Polyethylene, oxidized	HMDB0032472; HMDB32472	C12H20O5	-H(-)	100
582	243,1348251	9955,477273	Hydroxyprolyl-Isoleucine	HMDB0028866; HMDB0028867; HMDB0028908; HMDB0028930; HMDB28866; HMDB28867; HMDB28908; HMDB28930	C11H20N2O4	-H(-)	100
583	243,1597293	6594,669735	1,11-Undecanedicarboxylic acid	CHEBI:73718; HMDB0002327; HMDB0036141; HMDB0037184; HMDB02327; HMDB36141; HMDB37184	C13H24O4	-H(-)	100
584	243,1709314	6108,067083	Isoleucyl-Isoleucine	C01255; C11332; CHEBI:6418; HMDB0028910; HMDB0028911; HMDB0028932; HMDB0028933; HMDB28910; HMDB28911; HMDB28932; HMDB28933	C12H24N2O3	-H(-)	100
585	243,19572	5092,632612	2-	C13790; CHEBI:42539; CHEBI:59270;	C14H28O3	-H(-)	100

	38		Hydroxymyristic acid	CHEBI:85148; HMDB0002261; HMDB0010731; HMDB0032417; HMDB0059850; HMDB0061656; HMDB02261; HMDB10731; HMDB32417; HMDB59850; HMDB61656			
586	244,0944462	4956,933909	Asparaginyl-Hydroxyproline	HMDB0028732; HMDB0028858; HMDB28732; HMDB28858	C9H15N3O5	-H(-)	100
587	244,145672	2903,334643	Desmethylfrovatriptan	HMDB0060815; HMDB60815	C14H19N3O	-H(-)	100
588	245,0930961	13350,56192	N-acetyltryptophan	C03137; C07829; CHEBI:6758; CHEBI:74640; HMDB0013713; HMDB0014987; HMDB0030269; HMDB0060810; HMDB13713; HMDB14987; HMDB30269; HMDB60810	C13H14N2O3	-H(-)	100
589	245,136504	6302,803589	2-Deoxystreptidine	C02628	C8H18N6O3	-H(-)	100
590	245,19042	3102,179687	Avocadienofuran	CHEBI:977231; HMDB0030926; HMDB0030927; HMDB0030933; HMDB0040373; HMDB30926; HMDB30927; HMDB30933; HMDB40373	C17H26O	-H(-)	100

591	246,00805 35	67927,05701	2- Hydroxyacet aminophen sulfate	CHEBI:82942; HMDB0062547; HMDB62547	C8H9NO6 S	-H(-)	100
592	247,05076 09	12262,84888	Tryptanthrin e	C10742	C15H8N2 O2	-H(-)	100
593	247,09353 47	111604,8107	Glutamylthr eonine	CHEBI:133747; CHEBI:73510; HMDB0028829; HMDB0029159; HMDB28829; HMDB29159	C9H16N2 O6	-H(-)	100
594	247,17039 5	5343,859043	C16:4	HMDB0032228; HMDB0036221; HMDB0036640; HMDB0037713; HMDB0037719; HMDB32228; HMDB36221; HMDB36640; HMDB37713; HMDB37719	C16H24O2	-H(-)	100
595	248,02369 66	4876,495599	Norepinephr ine sulfate	HMDB0002062; HMDB02062; HMDB06346	C8H11NO 6S	-H(-)	100
596	248,05014 33	4395,542322	Sulfapyridin e	CHEBI:132842; HMDB0015028; HMDB15028	C11H11N3 O2S	-H(-)	100
597	248,14434 8	2137,199615	Desmethyln ortriptyline	HMDB0060531; HMDB60531	C18H19N	-H(-)	100
598	248,16619	1984,473042	Alprenolol	C09571; C17463; CHEBI:51211; CHEBI:83529;	C15H23N	-H(-)	100

	13			HMDB0015004; HMDB0060852; HMDB0060997; HMDB0061007; HMDB15004; HMDB60852; HMDB60997; HMDB61007	O2		
599	248,94812	4547,079682	(2R)-O-Phospho-3-sulfolactate	C11536	C3H7O9PS	-H(-)	100
600	249,1127165	4765,58204	Ubiquinone-1	C00399; C14468; C14469; CHEBI:16389; CHEBI:82625; HMDB0002012; HMDB0032116; HMDB0038804; HMDB0094669; HMDB0133182; HMDB0134155; HMDB0135907; HMDB02012; HMDB32116; HMDB38804; HMDB94669	C14H18O4	-H(-)	100
601	249,1241482	2815,36073	Heptabarbital	C03002; C17725; CHEBI:588074; HMDB0015443; HMDB0029876; HMDB0033462; HMDB0060742; HMDB0139529; HMDB0139530; HMDB0139613; HMDB0139973; HMDB15443; HMDB29876; HMDB33462; HMDB60742	C13H18N2O3	-H(-)	100
602	249,1492656	4520,693285	Gemfibrozil	C07020; C09295; C09689; C09711; C09748; C13453; C13456; C14716; C20403; C20405; CHEBI:5296; HMDB0015371; HMDB0030917;	C15H22O3	-H(-)	100

				HMDB0031901; HMDB0034721; HMDB0035117; HMDB0035137; HMDB0035148; HMDB0035358; HMDB0035760; HMDB0035798; HMDB0036036; HMDB0036037; HMDB0036550; HMDB0036563; HMDB0036664; HMDB0037064; HMDB0037529; HMDB0037559; HMDB0039156; HMDB0039635; HMDB0039644; HMDB0040754; HMDB0061839; HMDB15371; HMDB30917; HMDB31901; HMDB34721; HMDB35117; HMDB35137; HMDB35148; HMDB35358; HMDB35760; HMDB35798; HMDB36036; HMDB36037; HMDB36550; HMDB36563; HMDB36664; HMDB37064; HMDB37529; HMDB37559; HMDB39156; HMDB39635; HMDB39644; HMDB40754; HMDB61839			
603	249,1858426	7241,626975	C16:3	C16503; HMDB0035293; HMDB0037631; HMDB0037712; HMDB35293; HMDB37631; HMDB37712	C16H26O2	-H(-)	100
604	249,22252	2233,620869	(Z)-9-	C15464; HMDB0031336; HMDB0041334;	C17H30O	-H(-)	100

	54		Cycloheptadecen-1-one	HMDB31336; HMDB41334			
605	250,1448323	5104,088977	Furmecyclox	C18912	C14H21NO3	-H(-)	100
606	250,9944307	3872,746054	Pyrithione zinc	C13427	(C5H4NOS)2.	-H(-)	99
607	251,083003	4090,062887	Phenytoin	C07443; C07492; C07496; C16601; C16602; CHEBI:3388; CHEBI:7824; CHEBI:8107; HMDB0014397; HMDB0014914; HMDB0038571; HMDB0060651; HMDB0060653; HMDB0060658; HMDB14397; HMDB14914; HMDB38571; HMDB60651; HMDB60653; HMDB60658; HMDB60978	C15H12N2O2	-H(-)	100
608	251,114108	7686,939223	2,3-Butanediol glucoside; Histidinyl-Proline	HMDB0028893; HMDB0029019; HMDB0040822; HMDB28893; HMDB29019; HMDB40822	C10H20O7; C11H16N4O3	-H(-); -H(-)	100
609	251,16451	3369,734653	1-	C09645; C16504; C17502; C17605; C17607;	C15H24O3	-H(-)	100

	64		Hydroxyepia corone	C17612; HMDB0030918; HMDB0030919; HMDB0032122; HMDB0033149; HMDB0034574; HMDB0035309; HMDB0035597; HMDB0035613; HMDB0035729; HMDB0035767; HMDB0036448; HMDB0036663; HMDB0037063; HMDB0037969; HMDB0038502; HMDB0040685; HMDB0112086; HMDB0112094; HMDB30918; HMDB30919; HMDB32122; HMDB33149; HMDB34574; HMDB35309; HMDB35597; HMDB35613; HMDB35729; HMDB35767; HMDB36448; HMDB36663; HMDB37063; HMDB37969; HMDB38502; HMDB40685			
610	251,2013282	13817,21541	C16:2	C16795; CHEBI:86147; HMDB0000477; HMDB0029351; HMDB0030429; HMDB0031086; HMDB0032340; HMDB0037805; HMDB0038255; HMDB0039131; HMDB00477; HMDB29351; HMDB30429; HMDB31086; HMDB32340; HMDB37805; HMDB38255; HMDB39131	C16H28O2	-H(-)	100
611	251,23797	2730,364105	13-	C17815; HMDB0013813; HMDB0041335;	C17H32O	-H(-)	100

	38		Heptadecyn-1-ol	HMDB13813; HMDB41335			
612	252,0449921	33204,68552	Sulfamethoxazole	C07315; C17718; CHEBI:9332; HMDB0015150; HMDB15150	C10H11N3O3S	-H(-)	100
613	253,2175682	451174,1063	Hypogeic acid	C08362; CHEBI:28716; CHEBI:35465; CHEBI:37252; CHEBI:59265; HMDB0002186; HMDB0003229; HMDB0010735; HMDB0012328; HMDB0031053; HMDB0031145; HMDB0031711; HMDB0032638; HMDB0033791; HMDB0035877; HMDB0037647; HMDB0038958; HMDB0041422; HMDB02186; HMDB03229; HMDB10735; HMDB12328; HMDB31053; HMDB31145; HMDB31711; HMDB32638; HMDB33791; HMDB35877; HMDB37647; HMDB38958; HMDB41422; HMDB60082	C16H30O2	-H(-)	100
614	254,2484529	15965,85799	Palmitic amide	CHEBI:147265; HMDB0012273; HMDB12273	C16H33NO	-H(-)	100
615	255,0867491	36027,66089	3-hydroxy-3-(3,4,5-	C02578; C03097; C11611; HMDB0141328; HMDB0141330; HMDB0142079; HMDB0142082	C12H16O6	-H(-)	100

			trimethoxyphenyl)propanoic acid				
616	255,0988494	14035,44193	1-(beta-D-Ribofuranosyl)-1,4-dihydronicotinamide	C15497; CHEBI:55458; HMDB0011648; HMDB11648	C11H16N2O5	-H(-)	100
617	256,0980426	14370,41859	Tolmetin	C07149; C12181; CHEBI:218617; HMDB0014643; HMDB14643	C15H15NO3	-H(-)	100
618	257,0768187	13907,93412	Ribothymidine	C05131; C16744; CHEBI:30821; CHEBI:89487; HMDB0000884; HMDB0002331; HMDB0004813; HMDB00884; HMDB02331; HMDB04813	C10H14N2O6	-H(-)	86
619	257,1291465	9170,224119	Cyclo[(Z)-alpha,beta-didehydrophenylalanyl-L-leucyl]	C20521	C15H18N2O2	-H(-)	100
620	257,17610	10901,90524	Tetradecan	C11002; C14253; C14260; CHEBI:76308;	C14H26O4	-H(-)	100

	19		edioic acid	HMDB0000872; HMDB0040429; HMDB0041618; HMDB0059946; HMDB0059947; HMDB00872; HMDB40429; HMDB41618; HMDB59946; HMDB59947			
621	257,212631	6354,557386	10-Hydroxymyristic acid methyl ester	CHEBI:87428; HMDB0031061; HMDB0059866; HMDB0061657; HMDB31061; HMDB59866; HMDB61657	C15H30O3	-H(-)	100
622	258,1447366	5465,494977	Glutaminylisoleucine	HMDB0028800; HMDB0028801; HMDB0028868; HMDB0028905; HMDB0028921; HMDB0028927; HMDB0028943; HMDB0028952; HMDB28800; HMDB28801; HMDB28868; HMDB28905; HMDB28921; HMDB28927; HMDB28943; HMDB28952	C11H21N3O4	-H(-)	73
623	258,9917315	7954,058087	Caffeic acid 3-sulfate	CHEBI:90242; HMDB0041706; HMDB0041708; HMDB0125409; HMDB0125831; HMDB0127962; HMDB0134087; HMDB0135272; HMDB41706; HMDB41708	C9H8O7S	-H(-)	100
624	259,02781	8209,212425	[2-hydroxy-	HMDB0135261; HMDB0135264; HMDB0135659;	C10H12O6	-H(-)	100

	3		6-methoxy-4-(prop-2-en-1-yl)phenyl]oxidanesulfonic acid	HMDB0135663; HMDB0135705; HMDB0135744; HMDB0135746	S		
625	259,1300973	8781,083812	gamma-Glutamylisoleucine	CHEBI:68433; CHEBI:68434; CHEBI:73506; HMDB0011170; HMDB0011171; HMDB0028822; HMDB0028823; HMDB0029152; HMDB0029153; HMDB11170; HMDB11171; HMDB28822; HMDB28823; HMDB29152; HMDB29153	C11H20N2O5	-H(-)	100
626	259,1698515	3411,973114	Falcarindiol	C08449; C19993; CHEBI:66471; HMDB0033941; HMDB0034000; HMDB0038781; HMDB0060355; HMDB33941; HMDB34000; HMDB38781; HMDB60355	C17H24O2	-H(-)	100
627	260,0237447	46897,31459	2-Methoxyacetaminophen sulfate	CHEBI:82944; HMDB0062550; HMDB62550	C9H11NO6S	-H(-)	100

628	260,140624	4776,396179	Hydroxyl frovatriptan	HMDB0061150; HMDB61150	C14H19N3O2	-H(-)	100
629	261,088818	5577,293709	L-cis-Cyclo(aspartylphenylalanyl)	HMDB0031360; HMDB31360	C13H14N2O4	-H(-)	100
630	261,108757 8	5127,571616	Nopalinic acid	C01683; HMDB0029437; HMDB29437	C10H18N2O6	-H(-)	100
631	261,160428 9	2670,005746	Argyrolobine	C10754	C15H22N2O2	-H(-)	100
632	262,039238 4	6557,329338	Epinephrine sulfate	CHEBI:89878; HMDB0001876; HMDB0002194; HMDB01876; HMDB02194	C9H13NO6S	-H(-)	100
633	262,159843 3	2120,330236	Protriptyline	C07274; C07408; C16660; CHEBI:7640; CHEBI:80646; CHEBI:8597; HMDB0014488; HMDB0014680; HMDB0060672; HMDB0060993; HMDB14488; HMDB14680; HMDB60672; HMDB60993	C19H21N	-H(-)	100
634	262,181189 3	2013,200165	N-Desmethylv	C07153; C09851; C09864; C09943; C18949; CHEBI:238661; CHEBI:261281; CHEBI:261282;	C16H25NO2	-H(-)	100

			enlafaxine	HMDB0013892; HMDB0014339; HMDB0015646; HMDB0029567; HMDB0060532; HMDB13892; HMDB14339; HMDB15646; HMDB29567; HMDB60532			
635	263,0236632	9324,727565	3-Methoxy-4-hydroxyphenylethyleneglycol sulfate	CHEBI:1091015; HMDB0000559; HMDB0003332; HMDB00559; HMDB01985; HMDB03332	C9H12O7S	-H(-)	100
636	263,0388823	8187,863604	(1R,2R)-3-[(1,2-Dihydro-2-hydroxy-1-naphthalenyl)thio]-2-oxopropanoic acid	C14799	C13H12O4S	-H(-)	100
637	263,10369	114518,4999	Acetyl-N-	C04148; C05642; CHEBI:17884; HMDB0004259;	C13H16N2	-H(-)	100

	66		formyl-5-methoxykynurenamine	HMDB0006344; HMDB0061136; HMDB04259; HMDB06344; HMDB61136	O4		
638	263,237465 3	3180,511713	(±)-(Z)-2-(5-Tetradecenyl)cyclobutanone	HMDB0037543; HMDB37543	C18H32O	-H(-)	100
639	264,952720 4	2154,044553	Glyceric acid 1,3-biphosphate	C00236; C01159; C03339; CHEBI:17720; HMDB0001270; HMDB0001294; HMDB01270; HMDB01294	C3H8O10P2	-H(-)	100
640	265,093279 3	4908,077968	8-Oxodeoxycoformycin	C02957	C11H14N4O4	-H(-)	100
641	265,252935 8	2906,019717	9-Octadecenal	CHEBI:417823; HMDB0030965; HMDB0037517; HMDB30965; HMDB37517	C18H34O	-H(-)	100
642	266,093323 6	2960,963154	Prinomide	C10958	C15H13N3O2	-H(-)	100
643	267,07446	8414,860784	Inosine	C00294; CHEBI:17596; CHEBI:705435;	C10H12N4	-H(-)	100

	91			CHEBI:74074; HMDB0000195; HMDB0000481; HMDB0003040; HMDB00195; HMDB00481; HMDB03040	O5		
644	267,1238126	24494,54394	Kamahine C	HMDB0038935; HMDB0061643; HMDB38935; HMDB61643	C14H20O5	-H(-)	100
645	267,1597308	5813,74842	4,11,13,15-Tetrahydroridentin B	HMDB0036150; HMDB0038153; HMDB0038154; HMDB0038165; HMDB0038503; HMDB0060570; HMDB0240213; HMDB36150; HMDB38153; HMDB38154; HMDB38165; HMDB38503; HMDB60570	C15H24O4	-H(-)	100
646	267,2330921	40381,38851	Cyclohexaneundecanoic acid	C12100; C16536; CHEBI:75094; CHEBI:84328; HMDB0030997; HMDB0031046; HMDB0040888; HMDB0060038; HMDB0061858; HMDB0062437; HMDB30997; HMDB31046; HMDB40888; HMDB60038; HMDB61858; HMDB62437	C17H32O2	-H(-)	100
647	268,0396123	4073,350453	Sulfamethoxazole N4-hydroxylamine	CHEBI:53016; HMDB0013852; HMDB0060529; HMDB0060985; HMDB13852; HMDB60529; HMDB60985	C10H11N3O4S	-H(-)	100

648	268,0621787	9778,549353	Evoxanthidine	C10668	C15H11NO4	-H(-)	100
649	269,0876345	43844,23407	D-erythro-L-galacto-Nonulose	HMDB0029955; HMDB29955	C9H18O9	-H(-)	100
650	269,2117184	29188,08128	3-Oxohexadecanoic acid	C19614; CHEBI:37251; HMDB0010733; HMDB0030972; HMDB0030973; HMDB0030978; HMDB10733; HMDB30972; HMDB30973; HMDB30978	C16H30O3	-H(-)	100
651	269,2483923	84945,59538	Heptadecanoic acid	C16995; CHEBI:32365; CHEBI:84874; CHEBI:87343; HMDB0002259; HMDB0031067; HMDB0034131; HMDB0037372; HMDB0040392; HMDB0040598; HMDB0059870; HMDB0061859; HMDB02259; HMDB31067; HMDB34131; HMDB37372; HMDB40392; HMDB40598; HMDB59870; HMDB61859	C17H34O2	-H(-)	100
652	270,0774152	14197,81721	Koeniginequinone B	C04208; C15457; HMDB0032109; HMDB0040382; HMDB0060647; HMDB32109; HMDB40382; HMDB60647	C15H13NO4	-H(-)	100

653	270,1865156	2413,637602	Dextromethorphan	C06947; C08396; CHEBI:4470; HMDB0001920; HMDB01920; HMDB14655	C18H25NO	-H(-)	100
654	270,992093	5813,565623	[(7-hydroxy-1-oxo-1H-isochromen-3-yl)methoxy] sulfonic acid	C16198; HMDB0128634; HMDB0128636; HMDB0128638	C10H8O7S	-H(-)	100
655	271,0620271	15321,24049	Naringenin	C00509; C01263; C01592; C03567; C06561; C08578; C09047; C09614; C09751; C09826; C12087; C14458; C15567; C16232; C17673; CHEBI:15413; CHEBI:15649; CHEBI:16035; CHEBI:17846; CHEBI:78029; HMDB0002670; HMDB0005897; HMDB0029631; HMDB0030873; HMDB0031824; HMDB0033308; HMDB0033928; HMDB0034002; HMDB0034105; HMDB0037254; HMDB0038549; HMDB0041656; HMDB0041698; HMDB0041704; HMDB0125364; HMDB0125365; HMDB0126021; HMDB0126022; HMDB0128074;	C15H12O5	-H(-)	100

				HMDB0128075; HMDB0129341; HMDB0129965; HMDB0130173; HMDB0130182; HMDB0133545; HMDB0133993; HMDB0133999; HMDB0134891; HMDB0134892; HMDB0137525; HMDB0137528; HMDB0137531; HMDB0138088; HMDB0138618; HMDB02670; HMDB05897; HMDB29631; HMDB30873; HMDB31824; HMDB33308; HMDB33928; HMDB34002; HMDB34105; HMDB37254; HMDB38549; HMDB41656; HMDB41698; HMDB41704			
656	271,1696004	3857,576082	Estradiol	C00951; C02537; C14500; C15129; C15261; CHEBI:16469; CHEBI:17160; HMDB0000151; HMDB0000429; HMDB00151; HMDB0037216; HMDB0038257; HMDB00429; HMDB04481; HMDB37216; HMDB38257	C18H24O2	-H(-)	100
657	271,1914951	4592,406828	7(14)-Bisabolene-2,3,10,11-tetrol	HMDB0035918; HMDB35918	C15H28O4	-H(-)	100

658	271,2065953	3289,024167	5a-Androst-3-en-17-one	C00619; C01034; C02941; CHEBI:1151650; CHEBI:37894; HMDB0006046; HMDB0034406; HMDB06046; HMDB34406	C19H28O	-H(-)	100
659	271,2274903	38134,39096	(R)-3-Hydroxy-hexadecanoic acid	C18218; CHEBI:37248; CHEBI:38247; CHEBI:65101; HMDB0010734; HMDB0031057; HMDB0061658; HMDB0112184; HMDB0112185; HMDB0112186; HMDB0112187; HMDB0112188; HMDB0112189; HMDB0112190; HMDB0112191; HMDB0112192; HMDB10734; HMDB31057; HMDB61658	C16H32O3	-H(-)	100
660	272,1877954	2401,918201	Heptanoylcarnitine	CHEBI:74303; HMDB0013238; HMDB13238	C14H27NO4	-H(-)	90
661	273,0808092	228998,0628	{[1-(4-methoxyphenyl)pentan-3-yl]oxy}sulfonic acid	HMDB0133010	C12H18O5S	-H(-)	100
662	273,22141	3759,592826	Androstenol	C01876; C01881; C02797; C02940; C03836;	C19H30O	-H(-)	100

	17			C15298; CHEBI:40933; HMDB0005935; HMDB05935; HMDB06571			
663	274,1412055	6223,709976	Epsilon-(gamma-Glutamyl)-lysine	CHEBI:73521; CHEBI:88494; HMDB0003869; HMDB0004207; HMDB0028824; HMDB0029154; HMDB03869; HMDB04207; HMDB28824; HMDB29154	C11H21N3O5	-H(-)	100
664	275,0773505	14388,17482	3,4,5-trihydroxy-6-[(3-methylbut-2-enoyl)oxy]oxane-2-carboxylic acid	C08512; HMDB0128920; HMDB0129102	C11H16O8	-H(-)	100
665	275,104928	6435,13382	N-lactoyl-Tryptophan	HMDB0062178; HMDB62178	C14H16N2O4	-H(-)	73
666	275,2013502	10003,27674	19-Norandrosterone	C16300; C19042; CHEBI:32389; CHEBI:36412; CHEBI:529214; CHEBI:87333; HMDB0002697; HMDB0004590; HMDB0005886; HMDB0006547;	C18H28O2	-H(-)	100

				HMDB0032464; HMDB0032672; HMDB0034382; HMDB0062677; HMDB02697; HMDB04590; HMDB05886; HMDB06547; HMDB32464; HMDB32672; HMDB34382; HMDB62677			
667	276,1143298	3859,327387	Arginyl-Cysteine	HMDB0028706; HMDB0028769; HMDB28706; HMDB28769	C9H19N5O3S	-H(-)	100
668	276,9871694	4127,419417	2-C-Methyl-D-erythritol 2,4-cyclodiphosphate	C11453	C5H12O9P2	-H(-)	72
669	277,087075	6293,654691	Glutamylmethionine	CHEBI:73507; CHEBI:82965; HMDB0028825; HMDB0029155; HMDB0034367; HMDB28825; HMDB29155; HMDB34367	C10H18N2O5S	-H(-)	100
670	277,1296688	3901,567701	Pentoxifylline	C03001; C07424; CHEBI:127029; HMDB0014944; HMDB14944	C13H18N4O3	-H(-)	100
671	277,1444858	7664,578658	Alpha-CEHC	C03343; C14214; C15205; CHEBI:17243; CHEBI:535597; CHEBI:626842; CHEBI:894546; HMDB0001518; HMDB0013248; HMDB0013835;	C16H22O4	-H(-)	100

				HMDB0033244; HMDB0133045; HMDB0133047; HMDB0133048; HMDB0133084; HMDB0133085; HMDB0133086; HMDB0133087; HMDB0133088; HMDB0133089; HMDB0133090; HMDB0133091; HMDB01518; HMDB13248; HMDB13835; HMDB33244			
672	277,1558921	7099,806118	Leucyl-phenylalanine	C11221; CHEBI:111173; CHEBI:383437; HMDB0013243; HMDB0028914; HMDB0028998; HMDB0062483; HMDB13243; HMDB28914; HMDB28936; HMDB28998; HMDB62483	C15H22N2O3	-H(-)	100
673	277,1831491	5269,850549	2-ethyl-1,5-dimethyl-3,3-diphenylpyrrolinium (EDDP)	HMDB0060931; HMDB60931	C20H24N	-H(-)	100
674	277,2171928	201715,2539	Alpha-Linolenic acid	C06426; C06427; C07289; C08315; C08364; C15201; CHEBI:27432; CHEBI:28661; CHEBI:38383; CHEBI:86148; HMDB0001388;	C18H30O2	-H(-)	100

				HMDB0003073; HMDB0030962; HMDB0030963; HMDB0030964; HMDB01388; HMDB03073; HMDB30962; HMDB30963; HMDB30964			
675	278,054635	5092,803013	Cidofovir	C06909; CHEBI:3696; HMDB0014513; HMDB14513	C8H14N3O6P	-H(-)	100
676	278,1592583	4644,363434	Tiocarbazil	C18898	C16H25NOS	-H(-)	100
677	278,9902071	4406,973954	Photinus luciferin	C02740	C11H8N2O3S2	-H(-)	100
678	279,103562	20033,98035	Phenprocoumon	C08485; C15191; CHEBI:31719; CHEBI:50438; HMDB0015081; HMDB0032987; HMDB0041304; HMDB15081; HMDB32987; HMDB41304	C18H16O3	-H(-)	100
679	280,1557735	31577,81694	Cycloheximide	C06685	C15H23NO4	-H(-)	100
680	281,0870198	8353,605559	Arabinopyranobiose	C01630; C20568; C20570; HMDB0029619; HMDB0029894; HMDB0029918; HMDB0038855; HMDB0038880; HMDB0038881; HMDB0038882; HMDB29619; HMDB29894; HMDB29918; HMDB38855; HMDB38880; HMDB38881;	C10H18O9	-H(-)	100

				HMDB38882			
681	283,0252059	21921,11815	Rhein	C10401; HMDB0032876; HMDB0034042; HMDB0034138; HMDB0037921; HMDB0128435; HMDB0140295; HMDB0140296; HMDB32876; HMDB34042; HMDB34138; HMDB37921	C15H8O6	-H(-)	100
682	283,1547163	16121,3551	Alpha-dihydroartemisinin	HMDB0060593; HMDB0061088; HMDB60593; HMDB61088	C15H24O5	-H(-)	100
683	283,1912839	15274,6665	(10S)-Juvenile hormone III diol	C16505	C16H28O4	-H(-)	100
684	283,2070687	13891,71551	Retinal	C00376; C02110; C13037; C14655; C15016; C15170; C15262; C16681; CHEBI:1260188; CHEBI:16066; CHEBI:17898; CHEBI:45487; CHEBI:527124; HMDB0001358; HMDB0002152; HMDB0006218; HMDB0006220; HMDB0013117; HMDB0035151; HMDB01358; HMDB02152; HMDB06218; HMDB06220; HMDB13117;	C20H28O	-H(-)	100

				HMDB35151			
685	283,2281732	21060,97395	Avocadyne	C13792; C13946; C14996; HMDB0035473; HMDB0038685; HMDB35473; HMDB38685	C17H32O3	-H(-)	100
686	284,0326703	54205,75811	Riccionidin A	C08728	C15H9O6	-H(-)	100
687	284,0884457	10823,95108	N4-Acetylcytidine	CHEBI:70989; HMDB0005923; HMDB05923	C11H15N3O6	-H(-)	100
688	284,1224237	10135,61684	Isothipendyl	HMDB0015692; HMDB15692	C16H19N3S	-H(-)	100
689	285,0498471	21414,91223	Glycineamide ribotide	C03838; CHEBI:18349; HMDB0002022; HMDB02022	C7H15N2O8P	-H(-)	100
690	285,123826	10252,3714	Pilosine	C10610; C11697; C11819; C19076	C16H18N2O3	-H(-)	100
691	285,1857588	6219,807834	Androstenedione	C00280; C14483; C14502; C15293; C15315; C20217; C20252; CHEBI:16422; CHEBI:83865; HMDB0000053; HMDB00053; HMDB0038957; HMDB0062415; HMDB38957; HMDB62415	C19H26O2	-H(-)	100
692	285,20726	13700,45013	Hexadecan	C14987; C19615; CHEBI:73722; HMDB0000672;	C16H30O4	-H(-)	100

	48		edioic acid	HMDB0041287; HMDB0059777; HMDB00672; HMDB41287; HMDB59777			
693	285,2222724	9682,236908	Vitamin A	C00473; C00899; C09092; C11873; C11885; C11886; C11887; C16682; C17276; C18220; C18222; C19962; C20148; CHEBI:16302; CHEBI:17336; CHEBI:29509; CHEBI:45479; HMDB0000305; HMDB0006216; HMDB0006217; HMDB0006221; HMDB0030403; HMDB00305; HMDB0034735; HMDB0036728; HMDB0036841; HMDB0038709; HMDB03439; HMDB06216; HMDB06217; HMDB06221; HMDB30403; HMDB34735; HMDB36728; HMDB36841; HMDB38709	C20H30O	-H(-)	100
694	285,2434996	7724,198426	Avocadene	C11849; C13947; CHEBI:582699; HMDB0031042; HMDB0061663; HMDB31042; HMDB61663	C17H34O3	-H(-)	100
695	287,0231297	8742,281297	5''-(3'',4''-Dihydroxyphenyl)-gamma-	CHEBI:134254; HMDB0029191; HMDB0135678; HMDB0135688; HMDB0135693; HMDB0135695; HMDB0135696; HMDB29191	C11H12O7S	-H(-)	100

			valerolactone sulfate				
696	287,0528876	7752,896122	Orotidine	C01103; CHEBI:25722; HMDB0000788; HMDB00788	C10H12N2O8	-H(-)	100
697	287,1722247	4739,963829	Sakacin A	HMDB0034554; HMDB34554	C12H24N4O4	-H(-)	100
698	287,202033	4493,2972	Dehydroepiandrosterone	C00535; C00674; C01227; C03772; C14491; C14682; C15258; C15335; C15377; C15395; CHEBI:15994; CHEBI:16985; CHEBI:17347; CHEBI:220467; CHEBI:42534; CHEBI:87331; HMDB0000077; HMDB0000234; HMDB0000628; HMDB0000899; HMDB0003769; HMDB0005962; HMDB0006035; HMDB00077; HMDB00234; HMDB0036205; HMDB00628; HMDB00899; HMDB03769; HMDB05962; HMDB06035; HMDB11608; HMDB36205	C19H28O2	-H(-)	100
699	290,175568	6317,526334	Cyclopentolate	C04883; C06932; C07914; C08228; C09225; C09881; C12905; CHEBI:4024; CHEBI:6438; HMDB0015114; HMDB0015341; HMDB0036327;	C17H25NO3	-H(-)	100

				HMDB15114; HMDB15341; HMDB36327			
700	291,084548	3525003,07	Edetic Acid	C00284; HMDB0015109; HMDB15109	C10H16N2O8	-H(-)	100
701	293,0881347	85657,42169	Tuliposide B; Edetic Acid	C00284; C08570; HMDB0015109; HMDB15109	C10H16N2O8; C11H18O9	-H(-) [+2]; -H(-)	100
702	293,1499407	11126,64951	Isoleucyl-Tyrosine	HMDB0028919; HMDB0028941; HMDB0029108; HMDB0029109; HMDB0033464; HMDB0139646; HMDB28919; HMDB28941; HMDB29108; HMDB29109; HMDB33464	C15H22N2O4	-H(-)	100
703	293,1865356	7495,311408	Proparacaine	C07383; C07895; CHEBI:309007; HMDB0014945; HMDB14945	C16H26N2O3	-H(-)	100
704	293,2117529	12346,03713	13-OxoODE	C04594; C04780; C13798; C14765; C14766; C16316; C16326; C16342; C16346; C19613; C19827; CHEBI:60956; CHEBI:72641; CHEBI:88438; CHEBI:89388; CHEBI:902350; HMDB0004668; HMDB0004669; HMDB0010200; HMDB0010203; HMDB0010206; HMDB0010220; HMDB0010224; HMDB0011108; HMDB0029786;	C18H30O3	-H(-)	100

				HMDB0029969; HMDB0030950; HMDB0030995; HMDB0031088; HMDB0031103; HMDB0031934; HMDB0034586; HMDB0036832; HMDB0039603; HMDB0061644; HMDB0062288; HMDB0112093; HMDB0112099; HMDB0112102; HMDB0112103; HMDB04668; HMDB04669; HMDB10200; HMDB10203; HMDB10206; HMDB10220; HMDB10224; HMDB11108; HMDB29786; HMDB29969; HMDB30950; HMDB30995; HMDB31088; HMDB31103; HMDB31934; HMDB34586; HMDB36832; HMDB39603; HMDB61644; HMDB62288			
705	293,2476269	6675,879192	C19:2	C08366; CHEBI:69080; HMDB0034381; HMDB34381	C19H34O2	-H(-)	100
706	294,0562885	109507,757	N4-Acetylsulfamethoxazole	C13061; CHEBI:116400; HMDB0013854; HMDB13854	C12H13N3O4S	-H(-)	100
707	295,02834	4595,843595	{[(3E)-4-(1-	HMDB0130036; HMDB0130043	C13H12O6	-H(-)	100

	16		oxo-1H-isochromen-3-yl)but-3-en-2-yl]oxy}sulfonic acid		S		
708	295,058659	22198,56192	N-Methoxyspirobrassinol methyl ether	HMDB0041059; HMDB41059	C13H16N2O2S2	-H(-)	100
709	295,097302 9	7130,420858	Demethoxyegonol	C10035; C10054; C14720; CHEBI:582938; HMDB0030772; HMDB0038518; HMDB0040873; HMDB0040931; HMDB0060885; HMDB0060886; HMDB0060887; HMDB0060888; HMDB30772; HMDB38518; HMDB40873; HMDB40931; HMDB60885; HMDB60886; HMDB60887; HMDB60888	C18H16O4	-H(-)	100
710	295,227552 3	34868,40889	13S-hydroxyocta	C08318; C08368; C14762; C14767; C14825; C14826; C19617; CHEBI:34154; CHEBI:34496;	C18H32O3	-H(-)	100

			decadienoic acid	CHEBI:38299; CHEBI:595882; CHEBI:72651; HMDB0004667; HMDB0004670; HMDB0004701; HMDB0004702; HMDB0010223; HMDB0029796; HMDB0029978; HMDB0029998; HMDB0061708; HMDB0062652; HMDB0112194; HMDB04667; HMDB04670; HMDB04701; HMDB04702; HMDB06939; HMDB10223; HMDB29796; HMDB29978; HMDB29998; HMDB61708; HMDB62652			
711	295,2635358	20771,02333	Nonadeca-10(Z)-enoic acid	C00174; C03425; C13787; C13838; CHEBI:37527; HMDB0013622; HMDB0035575; HMDB13622; HMDB35575	C19H36O2	-H(-)	100
712	297,047146	10352,73134	Quinalphos	C11030; C18757	C12H15N2O3PS	-H(-)	100
713	297,0886402	4250,044895	Amlexanox	CHEBI:31205; HMDB0015160; HMDB15160	C16H14N2O4	-H(-)	100
714	297,1717584	5634,315313	Minaprine	CHEBI:51038; HMDB0014943; HMDB0061061; HMDB14943; HMDB61061	C17H22N4O	-H(-)	100
715	297,18481	4326,909907	4-Oxoretinal	C05028; C14249; C15114; C15142; C15219;	C20H26O2	-H(-)	73

				C15277; CHEBI:133794; CHEBI:7627; HMDB0012794; HMDB0014855; HMDB0040644; HMDB0060092; HMDB12794; HMDB14855; HMDB40644; HMDB60092			
716	297,2427562	65815,29206	3-Oxooctadecanoic acid	C00869; C08365; C13791; C19418; C19616; CHEBI:28592; CHEBI:50576; CHEBI:85661; HMDB0010736; HMDB0030979; HMDB0030980; HMDB0030981; HMDB0031127; HMDB0034074; HMDB0034297; HMDB0061650; HMDB10736; HMDB30979; HMDB30980; HMDB30981; HMDB31127; HMDB34074; HMDB34297; HMDB61650	C18H34O3	-H(-)	100
717	298,0722484	3801,69277	Avenanthramide 1c	C08472; CHEBI:2939; CHEBI:710546; HMDB0029284; HMDB0038577; HMDB0041141; HMDB0041516; HMDB29284; HMDB38577; HMDB41141; HMDB41516	C16H13NO5	-H(-)	100
718	299,0459636	16476,40057	Tazobactam	C07771; CHEBI:100207; HMDB0015544; HMDB15544	C10H12N4O5S	-H(-)	100
719	299,07147	5399,913534	Carboxytolb	HMDB0041849; HMDB41849	C12H16N2	-H(-)	100

	72		utamide		O5S		
720	299,2012854	6687,78453	All-trans-retinoic acid	C00777; C07058; C09188; C12078; C14489; C14652; C14684; C14925; C15263; C15307; C15353; C15493; C16683; C18195; C18196; C20428; C20429; CHEBI:15367; CHEBI:50648; CHEBI:6067; D00348; HMDB0001852; HMDB0002369; HMDB0006219; HMDB0012329; HMDB0012788; HMDB0012874; HMDB0036564; HMDB0036697; HMDB0036710; HMDB0036711; HMDB0038702; HMDB0041925; HMDB0061925; HMDB01852; HMDB02369; HMDB06219; HMDB12329; HMDB12788; HMDB12874; HMDB36564; HMDB36697; HMDB36710; HMDB36711; HMDB38702; HMDB41925; HMDB61925	C20H28O2	-H(-)	100
721	299,2583522	23781,79847	(R)-3-Hydroxy-Octadecanoic acid	C03042; C03045; C03195; CHEBI:136406; CHEBI:136638; CHEBI:19660; CHEBI:85208; HMDB0010737; HMDB0037396; HMDB0061661; HMDB0061662; HMDB0061706; HMDB0062549;	C18H36O3	-H(-)	100

				HMDB0112180; HMDB0112181; HMDB0112182; HMDB0112183; HMDB0112193; HMDB10737; HMDB37396; HMDB61661; HMDB61662; HMDB61706; HMDB62549			
722	300,0482116	11285,1892	Acetylglucosamine P	C00357; C04256; C04257; C04501; C06376; C18055; C18060; CHEBI:15784; CHEBI:44313; CHEBI:55404; CHEBI:62165; CHEBI:7125; HMDB0001062; HMDB0001121; HMDB0001367; HMDB0002817; HMDB0006480; HMDB0059626; HMDB01062; HMDB01121; HMDB01367; HMDB02817; HMDB06480; HMDB59626	C8H16NO9P	-H(-)	100
723	300,1573102	2700,192295	(Ac)2-L-Lys-D-Ala	C02487	C13H23N3O5	-H(-)	100
724	301,18138	5341,263561	2-Hydroxyestradiol-3-methyl ether	C04676; C05140; C05284; C05290; C05295; C05296; C05302; C14256; C14269; C14337; C14593; C14907; C15072; C15103; C15216; C20693; CHEBI:17347; CHEBI:27576; CHEBI:27582; CHEBI:27768; CHEBI:27967; CHEBI:28955; HMDB0000380; HMDB0000405;	C19H26O3	-H(-)	100

				HMDB0003955; HMDB0003959; HMDB0006771; HMDB0006773; HMDB0006774; HMDB0012782; HMDB0031038; HMDB0033125; HMDB0034028; HMDB0034167; HMDB0036696; HMDB00380; HMDB0039568; HMDB00405; HMDB0040927; HMDB0041204; HMDB03955; HMDB03959; HMDB06771; HMDB06773; HMDB06774; HMDB12782; HMDB31038; HMDB33125; HMDB34028; HMDB34167; HMDB36696; HMDB39568; HMDB40927; HMDB41204			
725	301,2022851	4547,93862	xi-7-Hydroxyhexadecanedioic acid	HMDB0037830; HMDB0037831; HMDB37830; HMDB37831	C16H30O5	-H(-)	100
726	301,2173122	31500,32017	Eicosapentaenoic acid	C02075; C06087; C06428; C07198; C09118; C09148; C09159; C11874; C11888; C11889; C12077; C12083; C14255; C14490; C14588; C14890; C15003; C15008; C15017; C15036; C15070; C15184; C15188; C15259; C15318;	C20H30O2	-H(-)	100

				C15412; C15460; C20149; C20208; CHEBI:27436; CHEBI:28364; CHEBI:545914; CHEBI:6039; HMDB0001999; HMDB0003598; HMDB0015655; HMDB0035692; HMDB0036703; HMDB0036709; HMDB0036775; HMDB0036805; HMDB0036811; HMDB0036826; HMDB0038172; HMDB0038687; HMDB0039486; HMDB0041928; HMDB01999; HMDB03598; HMDB15655; HMDB35692; HMDB36703; HMDB36709; HMDB36775; HMDB36805; HMDB36811; HMDB36826; HMDB38172; HMDB38687; HMDB39486; HMDB41928			
727	302,1509218	3505,27484	Tryptophyl-Valine	C04211; HMDB0029096; HMDB0029138; HMDB29096; HMDB29138	C16H21N3O3	-H(-)	100
728	303,0516677	4044,73453	Pratenol B	C01617; C05911; C12316; HMDB0040631; HMDB0125017; HMDB0125208; HMDB0125211; HMDB0125220; HMDB0125366; HMDB0125368; HMDB0125371; HMDB0125372; HMDB0126023; HMDB0126025; HMDB0126029; HMDB0126030;	C15H12O7	-H(-)	100

				HMDB0126033; HMDB0126035; HMDB0126039; HMDB0126040; HMDB0126565; HMDB0128217; HMDB0129344; HMDB0129353; HMDB0129359; HMDB0130177; HMDB0130180; HMDB0130332; HMDB0131756; HMDB0131926; HMDB0133541; HMDB0133542; HMDB0133543; HMDB0137814; HMDB40631			
729	303,0986952	3317,439736	L-N-(1H-Indol-3-ylacetyl)glutamic acid	CHEBI:136547; HMDB0038665; HMDB38665	C15H16N2O5	-H(-)	100
730	303,1609738	5915,367266	2-Polyprenyl-3-methyl-5-hydroxy-6-methoxy-1,4-benzoquinone	C19933; HMDB0060352; HMDB0060379; HMDB60352; HMDB60379	C18H24O4	-H(-)	100

731	303,232918	177037,6894	Arachidonic acid	C00219; C09057; C09124; C11897; C14493; C14605; C14956; C15176; C15252; C15367; C17920; C20329; CHEBI:15843; CHEBI:34838; CHEBI:529213; CHEBI:71488; CHEBI:78259; D04947; HMDB0001043; HMDB0002177; HMDB0006036; HMDB0014996; HMDB0036702; HMDB0036721; HMDB0036754; HMDB0036829; HMDB0036830; HMDB0037824; HMDB0039687; HMDB0039702; HMDB0060102; HMDB01043; HMDB02177; HMDB06036; HMDB14996; HMDB36702; HMDB36721; HMDB36754; HMDB36829; HMDB36830; HMDB37824; HMDB39687; HMDB39702; HMDB60102	C20H32O2	-H(-)	100
732	304,021340 7	2578,011008	2,4-Dinitro-1-(3-nitrophenoxy)benzene	C15297	C12H7N3O7	-H(-)	100
733	304,094720 4	7574,991282	Entacapone	C07943; CHEBI:4798; HMDB0012226; HMDB12226	C14H15N3O5	-H(-)	100

734	305,1307593	4163,734771	O-Isopentenylhalfordinol	HMDB0030308; HMDB0039105; HMDB0041518; HMDB0041543; HMDB30308; HMDB39105; HMDB41518; HMDB41543	C19H18N2O2	-H(-)	71
735	305,1604823	4210,683575	1-(beta-D-Glucopyranosyloxy)-3-octanone	HMDB0031315; HMDB31315	C14H26O7	-H(-)	100
736	305,1746917	4719,27356	5''-Carboxy-gamma-chromanol	C14183; C14300; C20203; HMDB0012799; HMDB0034780; HMDB12799; HMDB34780	C18H26O4	-H(-)	80
737	305,2483049	60600,46484	8,11,14-Eicosatrienoic acid	C03242; C09072; C13273; C14882; C15058; C15376; C15399; C16522; CHEBI:1306412; CHEBI:53460; CHEBI:53486; HMDB0002925; HMDB0010378; HMDB0031058; HMDB0036835; HMDB0060039; HMDB02925; HMDB06735; HMDB10378; HMDB31058; HMDB36835; HMDB60039	C20H34O2	-H(-)	100
738	306,1094303	4265,117112	2-cyano-3-(3,4-	HMDB0142220	C14H17N3O5	-H(-)	100

			dihydroxy-5-nitrophenyl)-N,N-diethylpropanamide				
739	306,1142316	3610,263771	N-Acetylanonaine	C10655; C10738; C15195; CHEBI:8917; HMDB0030349; HMDB0033852; HMDB30349; HMDB33852	C19H17NO3	-H(-)	100
740	307,1450885	4359,974596	Phenylbutazone	C07440; C19905; CHEBI:48574; HMDB0014950; HMDB14950	C19H20N2O2	-H(-)	100
741	307,1918486	5953,38203	Methylgingerol	C10373; C15818; CHEBI:65842; HMDB0029852; HMDB0031471; HMDB0032664; HMDB0033243; HMDB0034781; HMDB0040867; HMDB29852; HMDB31471; HMDB32664; HMDB33243; HMDB34781; HMDB40867	C18H28O4	-H(-)	100
742	307,2272509	3277,48962	Obtusilactone A	HMDB0030960; HMDB0031091; HMDB0031379; HMDB0061646; HMDB0094643; HMDB0112070; HMDB0112090; HMDB0112096; HMDB0112100; HMDB30960; HMDB31091; HMDB31379;	C19H32O3	-H(-)	100

				HMDB61646; HMDB94643			
743	307,2641724	44240,95098	Eicosadienoic acid	C09183; C16525; CHEBI:603631; CHEBI:78706; CHEBI:9053; HMDB0005060; HMDB0036827; HMDB0061864; HMDB0062432; HMDB05060; HMDB36827; HMDB61864; HMDB62432	C20H36O2	-H(-)	100
744	308,0775484	3607,473982	Inodxyl glucuronide	C03033; C08494; C12255; HMDB0010319; HMDB0040830; HMDB0059804; HMDB10319; HMDB40830; HMDB59804	C14H15NO7	-H(-)	100
745	308,0987692	8685,062654	N-Acetylneuraminic acid	C00270; C03525; C19909; C19910; CHEBI:45744; CHEBI:61599; HMDB0000230; HMDB0000773; HMDB00230; HMDB00773; HMDB00800	C11H19NO9	-H(-)	100
746	308,1472643	3975,885443	Metixene	CHEBI:51024; HMDB0014484; HMDB14484	C20H23NS	-H(-)	100
747	309,0409524	13586,09211	De-O-methylsterigmatocystin	C03683; CHEBI:18236; HMDB0033657; HMDB0035230; HMDB33657; HMDB35230	C17H10O6	-H(-)	100
748	309,0779058	4883,945932	Sulpyrine	C13229	C13H16N3O4S.	-H(-)	100
749	309,20697	16005,14204	12(13)Ep-9-	C04785; C07357; C15753; C16321; C16341;	C18H30O4	-H(-)	100

	33		KODE	C19936; C20704; HMDB0013623; HMDB0033505; HMDB0035337; HMDB0038484; HMDB13623; HMDB33505; HMDB35337; HMDB38484			
750	309,279706	65345,21044	C20:1	C02064; C03425; C16526; CHEBI:134474; CHEBI:134475; CHEBI:134479; CHEBI:32419; CHEBI:32425; HMDB0002231; HMDB0034296; HMDB0034451; HMDB0035159; HMDB0035572; HMDB0035573; HMDB0035574; HMDB0037127; HMDB0062436; HMDB02231; HMDB34296; HMDB34451; HMDB35159; HMDB35572; HMDB35573; HMDB35574; HMDB37127; HMDB62436	C20H38O2	-H(-)	100
751	311,071037	16222,95317	Epithienamycin B	C17396; C17398	C13H16N2O5S	-H(-)	100
752	311,098216 4	13115,65042	Galactose-beta-1,4-xylose	C01625; C07285; C07560; C08245; C11535; HMDB0011677; HMDB0029883; HMDB0029897; HMDB0038854; HMDB0038863; HMDB0038864; HMDB0140855; HMDB11677; HMDB29883; HMDB29897; HMDB38854; HMDB38863;	C11H20O10	-H(-)	100

				HMDB38864			
753	311,1681768	33585,70576	N-Undecylbenzenesulfonic acid	HMDB0032549; HMDB32549	C17H28O3S	-H(-)	100
754	311,2011256	12093,92404	16-Dehydroprogesterone	C03207; C04084; C08149; C08153; C14487; C14646; C14677; C14892; C15167; C15388; CHEBI:18204; CHEBI:31527; CHEBI:34749; CHEBI:6443; HMDB0000995; HMDB0004626; HMDB0014511; HMDB0014522; HMDB0060580; HMDB00995; HMDB04626; HMDB14511; HMDB14522; HMDB60580	C21H28O2	-H(-)	100
755	311,222997	63244,5514	13-L-Hydroperoxylinoleic acid	C04717; C07338; C07354; C14827; C14831; C14832; C14834; C14836; C19618; C19937; C20186; C20703; CHEBI:15655; CHEBI:15657; CHEBI:34485; CHEBI:34498; HMDB0003871; HMDB0004706; HMDB0006940; HMDB0010201; HMDB0010208; HMDB0010221; HMDB0040900; HMDB0062281; HMDB0062434; HMDB03871;	C18H32O4	-H(-)	100

				HMDB04706; HMDB06940; HMDB10201; HMDB10208; HMDB10221; HMDB40900; HMDB62281; HMDB62434			
756	311,294811	40401,31138	3D,7D,11D-Phytanic acid	C01607; C06425; CHEBI:16285; CHEBI:28822; CHEBI:84936; HMDB0000417; HMDB0000553; HMDB0000801; HMDB0002212; HMDB0031318; HMDB0034156; HMDB0035672; HMDB0035673; HMDB00417; HMDB00553; HMDB0062520; HMDB00801; HMDB02212; HMDB31318; HMDB34156; HMDB35672; HMDB35673; HMDB62520	C20H40O2	-H(-)	100
757	312,108835	5436,399436	Tyramine glucuronide	C03033; HMDB0010328; HMDB10328	C14H19NO7	-H(-)	100
758	312,2543268	5662,863075	Palmitoylglycine	C10167; CHEBI:479285; HMDB0013034; HMDB13034	C18H35NO3	-H(-)	100
759	313,0538697	308153,0824	Rofecoxib	C07590	C17H14O4S	-H(-)	100
760	313,0772812	454379,5983	Sulfaphenazole	CHEBI:253330; HMDB0015667; HMDB15667	C15H14N4O2S	-H(-)	100

761	313,1913994	99004,99125	Rhazidigenine Nb-oxide	HMDB0030263; HMDB30263	C19H26N2O2	-H(-)	100
762	313,2379951	26419,29948	Octadecanedioic acid	C07355; C14828; C14829; C19620; C20702; CHEBI:133086; HMDB0000782; HMDB0004704; HMDB0004705; HMDB0031679; HMDB0041220; HMDB00782; HMDB04704; HMDB04705; HMDB31679; HMDB41220	C18H34O4	-H(-)	100
763	314,1225289	18818,66527	Neosaxitoxin	C17208; HMDB0029369; HMDB0033664; HMDB29369; HMDB33664	C10H17N7O5	-H(-)	100
764	314,2697938	4147,75431	Dehydrophytosphingosine	HMDB0038057; HMDB38057	C18H37NO3	-H(-)	100
765	315,0510864	45181,07562	Isorhamnetin	C04443; C08999; C10022; C10084; C10119; C10120; C10176; C10185; C10188; C19739; CHEBI:448850; CHEBI:563477; CHEBI:7947; HMDB0002655; HMDB0030547; HMDB0030804; HMDB0038572; HMDB0039210; HMDB0124865; HMDB0124868; HMDB0124999; HMDB0125000; HMDB0126043; HMDB0126503; HMDB0126507;	C16H12O7	-H(-)	100

				HMDB0127497; HMDB0128208; HMDB0128757; HMDB0129288; HMDB0129333; HMDB0129334; HMDB0129335; HMDB0130165; HMDB0130318; HMDB0130661; HMDB0130662; HMDB0132127; HMDB0132128; HMDB0133823; HMDB0136017; HMDB0136018; HMDB0136019; HMDB02655; HMDB30547; HMDB30804; HMDB38572; HMDB39210			
766	315,1598761	5633,526567	Isopulegone caffeate	C04793; C11863; C14347; C14946; C15456; C17789; C17795; HMDB0029566; HMDB0134704; HMDB29566	C19H24O4	-H(-)	100
767	315,2319608	6253,159018	C21:5	C01953; C03681; C04042; C05479; C10839; C14475; C14962; C15012; C15108; C15156; C15199; C15334; C15339; C20219; CHEBI:16581; CHEBI:28952; CHEBI:36729; CHEBI:507454; CHEBI:529021; CHEBI:554295; D05204; HMDB0000253; HMDB0003069; HMDB0003759; HMDB0004627; HMDB0006002; HMDB0006026; HMDB0006048; HMDB00253; HMDB0034369;	C21H32O2	-H(-)	100

				HMDB0035580; HMDB0036729; HMDB0038534; HMDB0059652; HMDB03069; HMDB03759; HMDB04627; HMDB06002; HMDB06026; HMDB06048; HMDB34369; HMDB35580; HMDB36729; HMDB38534; HMDB59652			
768	315,2539273	17185,24675	MG(0:0/15:0/0:0)	C08314; C15988; C19622; CHEBI:49254; CHEBI:710856; HMDB0011532; HMDB0011563; HMDB0031008; HMDB0059633; HMDB0072849; HMDB0072862; HMDB0072865; HMDB0072878; HMDB11532; HMDB11563; HMDB31008; HMDB59633; HMDB72849; HMDB72862; HMDB72865; HMDB72878	C18H36O4	-H(-)	100
769	316,2124271	4236,456871	3-hydroxynonanoyl carnitine	HMDB0061635; HMDB61635	C16H31NO5	-H(-)	100
770	317,1757316	3668,631156	Ubiquinone-2	C00399; C14983; C15151; C15351; CHEBI:46372; HMDB0006709; HMDB0030064; HMDB0031373; HMDB0035500; HMDB0039277; HMDB0134951;	C19H26O4	-H(-)	100

				HMDB06709; HMDB30064; HMDB31373; HMDB35500; HMDB39277			
771	317,2120351	7858,953594	Leukotriene A4	C00909; C02645; C04577; C09079; C09110; C11875; C13843; C14555; C14628; C14665; C14683; C14732; C14807; C14891; C14929; C14945; C14980; C15354; C15434; C17498; C17956; C18177; C20212; CHEBI:1263761; CHEBI:137269; CHEBI:15559; CHEBI:15651; CHEBI:34151; CHEBI:52449; CHEBI:5920; CHEBI:72801; CHEBI:81563; CHEBI:88347; CHEBI:91140; CHEBI:91264; HMDB0001337; HMDB0005081; HMDB0006027; HMDB0010202; HMDB0010205; HMDB0010209; HMDB0010210; HMDB0010212; HMDB0010217; HMDB0012534; HMDB0012611; HMDB0013633; HMDB0030101; HMDB0035116; HMDB0035311; HMDB0036698; HMDB0036706; HMDB0036712; HMDB0036713; HMDB0036724; HMDB0036752; HMDB0036776; HMDB0036806; HMDB0036839; HMDB0036930;	C20H30O3	-H(-)	100

				HMDB0037523; HMDB0038521; HMDB0039012; HMDB0039716; HMDB0041058; HMDB0060053; HMDB0061114; HMDB0062222; HMDB0062293; HMDB0062296; HMDB0062408; HMDB01337; HMDB0137419; HMDB05081; HMDB06027; HMDB10202; HMDB10205; HMDB10209; HMDB10210; HMDB10212; HMDB10217; HMDB12534; HMDB12611; HMDB13633; HMDB30101; HMDB35116; HMDB35311; HMDB36698; HMDB36706; HMDB36712; HMDB36713; HMDB36724; HMDB36752; HMDB36776; HMDB36806; HMDB36839; HMDB36930; HMDB37523; HMDB38521; HMDB39012; HMDB39716; HMDB41058; HMDB60053; HMDB61114; HMDB62222; HMDB62293; HMDB62296; HMDB62408			
772	318,1096393	3796,277929	Aspartyl-Tryptophan	HMDB0028764; HMDB0029079; HMDB0142237; HMDB28764; HMDB29079	C15H17N3O5	-H(-)	100
773	319,11872	4191,403848	Mycophenol	C06079; C09298; C09373; C20380; CHEBI:168396;	C17H20O6	-H(-)	100

	18		ic acid	CHEBI:475114; HMDB0015159; HMDB0030742; HMDB0037321; HMDB0130121; HMDB0130122; HMDB0130123; HMDB0130124; HMDB15159; HMDB30742; HMDB37321			
774	319,1401808	6529,566936	Valproic acid glucuronide	C03033; HMDB0000901; HMDB0010347; HMDB00901; HMDB10347	C14H24O8	-H(-)	100
775	319,2278713	15070,16585	5,6-Epoxy-8,11,14-eicosatrienoic acid	C04742; C04805; C14748; C14749; C14768; C14769; C14770; C14771; C14776; C14777; C14778; C14779; C14780; C14822; C14824; C14961; C15035; C15041; C15138; C15349; CHEBI:134453; CHEBI:137345; CHEBI:15558; CHEBI:28209; CHEBI:34126; CHEBI:34157; CHEBI:34162; CHEBI:34185; CHEBI:34306; CHEBI:34450; CHEBI:34486; CHEBI:34490; CHEBI:63579; CHEBI:63989; CHEBI:63995; CHEBI:654549; CHEBI:72643; CHEBI:72785; CHEBI:91132; HMDB0002190; HMDB0002232; HMDB0002283; HMDB0003876; HMDB0004264;	C20H32O3	-H(-)	100

				HMDB0004673; HMDB0004679; HMDB0004680; HMDB0004682; HMDB0005998; HMDB0006111; HMDB0006245; HMDB0010222; HMDB0010409; HMDB0011134; HMDB0011136; HMDB0012508; HMDB0012567; HMDB0012598; HMDB0036262; HMDB0036705; HMDB0036810; HMDB0038520; HMDB0038688; HMDB0038689; HMDB0038694; HMDB0060101; HMDB0062287; HMDB0062294; HMDB0062302; HMDB0062431; HMDB0062433; HMDB0112068; HMDB0112071; HMDB02110; HMDB02190; HMDB02218; HMDB02232; HMDB02283; HMDB03876; HMDB03978; HMDB04264; HMDB04672; HMDB04673; HMDB04679; HMDB04680; HMDB04682; HMDB04698; HMDB05080; HMDB05998; HMDB06111; HMDB06245; HMDB10222; HMDB10409; HMDB11134; HMDB11136; HMDB11138; HMDB11642; HMDB12508; HMDB12567; HMDB12598; HMDB36262; HMDB36705; HMDB36810; HMDB38520;			

				HMDB38688; HMDB38689; HMDB38694; HMDB60101; HMDB62287; HMDB62294; HMDB62302; HMDB62431; HMDB62433			
776	320,0853041	5761,407691	2-Amino-4-oxo-4-alpha-hydroxy-6-(erythro-1'',2'',3''-trihydroxypropyl)-5,6,...	C05252; HMDB0012143; HMDB12143	C9H15N5O8	-H(-)	100
777	320,1433245	3038,794716	N-desmethylalmotriptan	HMDB0061011; HMDB61011	C16H23N3O2S	-H(-)	100
778	321,1552092	4469,818763	Butyl (S)-3-hydroxybutyrate glucoside	HMDB0031694; HMDB31694	C14H26O8	-H(-)	100
779	321,24271	12747,60935	15(S)-	C14970; C15285; CHEBI:17897; CHEBI:90995;	C20H34O3	-H(-)	100

	34		Hydroxyeicosatrienoic acid	HMDB0005045; HMDB0036802; HMDB0060052; HMDB0061645; HMDB0061647; HMDB0062290; HMDB0062747; HMDB0112091; HMDB0112104; HMDB05045; HMDB36802; HMDB60052; HMDB61645; HMDB61647; HMDB62290; HMDB62747			
780	322,0439868	2756,854658	CMP	C00055; C03104; C05822; CHEBI:17361; HMDB0000095; HMDB00095; HMDB0011692; HMDB11692	C9H14N3O8P	-H(-)	100
781	322,0610654	3206,634101	a-Methyldopa mono-O-sulfate	HMDB0060806; HMDB60806	C11H17NO8S	-H(-)	100
782	322,1229787	5130,996839	Gliclazide	CHEBI:31654; HMDB0015252; HMDB15252	C15H21N3O3S	-H(-)	100
783	322,2740862	2299,539498	Linoleoyl ethanolamide	CHEBI:64032; HMDB0012252; HMDB12252	C20H37NO2	-H(-)	90
784	323,12592	3969,14999	DHAP(10:0)	HMDB0011675; HMDB11675	C13H25O7	-H(-)	100

	3				P		
785	323,2012318	3703,843021	Etonogestrel	CHEBI:50777; HMDB0014439; HMDB14439	C22H28O2	-H(-)	100
786	323,2945814	5944,203649	C21:1	HMDB0035570; HMDB0035571; HMDB35570; HMDB35571	C21H40O2	-H(-)	100
787	324,2188599	2821,241437	10-Nitrolinoleic acid; Dapiprazole	C06852; C11845; C13800; C13958; CHEBI:3127; CHEBI:51066; HMDB0005049; HMDB0014443; HMDB0014750; HMDB0033503; HMDB0041248; HMDB05049; HMDB14443; HMDB14750; HMDB33503; HMDB41248	C18H31NO4; C19H27N5	-H(-); -H(-)	100
788	325,0630903	3188,162015	Triphenyl phosphate	C14235	C18H15O4P	-H(-)	100
789	325,1052411	3586,693891	Humilixanthin	C08548; C18721; HMDB0039123; HMDB39123	C14H18N2O7	-H(-)	83
790	325,1836066	22255,48357	2-Dodecylbenzenesulfonic acid	HMDB0031031; HMDB0059915; HMDB31031; HMDB59915	C18H30O3S	-H(-)	100
791	325,21636	5832,87144	15beta-	C14208; C15190; HMDB0060707; HMDB0060719;	C22H30O2	-H(-)	100

	74		Hydroxydesogestrel	HMDB0060755; HMDB0060756; HMDB60707; HMDB60719; HMDB60755; HMDB60756			
792	325,2386722	8366,711296	1-Acetoxy-2-hydroxy-16-heptadecen-4-one	CHEBI:920054; HMDB0031006; HMDB0031047; HMDB0031048; HMDB0031049; HMDB31006; HMDB31047; HMDB31048; HMDB31049	C19H34O4	-H(-)	100
793	326,0369388	3440,749503	CI Acid Orange 20	C19371	C16H11N2O4S.	-H(-)	100
794	326,0885099	69074,9689	Acetaminophen glucuronide	CHEBI:32636; HMDB0010316; HMDB0029344; HMDB10316; HMDB29344	C14H17NO8	-H(-)	100
795	326,3063287	2614,655588	Stearoylethanolamide	C13914; CHEBI:277963; CHEBI:386359; HMDB0013078; HMDB0013645; HMDB13078; HMDB13645	C20H41NO2	-H(-)	100
796	327,1601969	8702,448098	5-Hydroxy-7-(4-hydroxy-3-methoxyphe	C08588; C09578; C15174; C15618; CHEBI:1030794; CHEBI:3918; CHEBI:546235; HMDB0029524; HMDB0030645; HMDB0030728; HMDB0030841; HMDB0032954; HMDB0034178;	C20H24O4	-H(-)	796

			nyl)-1-phenyl-3-heptanone	HMDB0035098; HMDB0036459; HMDB0036720; HMDB0040760; HMDB0135889; HMDB0138162; HMDB29524; HMDB30645; HMDB30728; HMDB30841; HMDB32954; HMDB34178; HMDB35098; HMDB36459; HMDB36720; HMDB40760			
797	327,1711353	7021,486194	Labetalol	C06494; C07063; CHEBI:6343; HMDB0014736; HMDB14736	C19H24N2O3	-H(-)	797
798	327,2183399	10819,44496	Corchorifatty acid F	C14795; CHEBI:91218; HMDB0035919; HMDB0038483; HMDB0040611; HMDB35919; HMDB38483; HMDB40611	C18H32O5	-H(-)	798
799	327,2326661	88354,08641	C22:6	C06429; C14586; C15116; C15265; C15299; CHEBI:28125; CHEBI:32095; CHEBI:544843; HMDB0002183; HMDB0030053; HMDB0030446; HMDB0035185; HMDB0038908; HMDB02183; HMDB30053; HMDB30446; HMDB35185; HMDB38908	C22H32O2	-H(-)	799
800	327,2896334	9351,86698	Polyoxyethylene 40	C02982; CHEBI:37258; CHEBI:52347; CHEBI:76992; HMDB0032477; HMDB0061659;	C20H40O3	-H(-)	800

			monostearate	HMDB0061664; HMDB0061665; HMDB0061666; HMDB0062566; HMDB32477; HMDB61659; HMDB61664; HMDB61665; HMDB61666; HMDB62566			
801	328,0440019	3352,955835	Mecarbam	C18661; CHEBI:38718; HMDB0031800; HMDB31800	C10H20NO5PS2	-H(-)	801
802	328,0858953	6691,303708	Desulfoglucotropeolin	C01069	C14H19NO6S	-H(-)	802
803	328,1616517	12907,93306	Hydroxyethylpromethazine	CHEBI:135995; HMDB0240229	C19H25N2OS	-H(-)	803
804	328,1906084	4188,692491	Trilostane	C08687; C12580; C18769; CHEBI:32260; HMDB0015240; HMDB0033448; HMDB0038646; HMDB0039808; HMDB0061042; HMDB15240; HMDB33448; HMDB38646; HMDB39808; HMDB61042	C20H27NO3	-H(-)	804
805	328,2129108	3935,758254	6-Keto-decanoylcarnitine	HMDB0013202; HMDB13202	C17H31NO5	-H(-)	805

806	329,1763952	18318,71718	Carnosol	C09069; C14162; C14529; C20632; CHEBI:468005; HMDB0002121; HMDB0036749; HMDB0036753; HMDB0036755; HMDB0039613; HMDB02121; HMDB36749; HMDB36753; HMDB36755; HMDB39613	C20H26O4	-H(-)	806
807	329,2064284	7065,074314	Arginyl-Arginine	HMDB0028703; HMDB28703	C12H26N8O3	-H(-)	807
808	329,2341666	13182,30225	9,12,13-TriHOME	C14833; C14835; C14837; HMDB0004708; HMDB0004710; HMDB0030936; HMDB0038555; HMDB04708; HMDB04710; HMDB30936; HMDB38555	C18H34O5	-H(-)	808
809	329,2482712	48029,7952	C22:5	C11896; C13364; C15413; C15421; C16184; C16513; CHEBI:53488; CHEBI:546104; CHEBI:65136; CHEBI:84883; HMDB0001976; HMDB0006528; HMDB0032257; HMDB0035024; HMDB0035581; HMDB0038909; HMDB0039133; HMDB0039530; HMDB01976; HMDB06528; HMDB32257; HMDB35024; HMDB35581; HMDB38909; HMDB39133; HMDB39530;	C22H34O2	-H(-)	809

				HMDB60113			
810	330,0556633	21151,16198	Piroxicam	C01608; CHEBI:8249; HMDB0014694; HMDB14694	C15H13N3O4S	-H(-)	810
811	330,0920818	36324,95141	5''-O-Desmethylomeprazole	HMDB0014011; HMDB14011	C16H17N3O3S	-H(-)	811
812	330,2035207	4493,197298	Marimastat	CHEBI:50662; HMDB0014924; HMDB14924	C15H29N3O5	-H(-)	812
813	331,1912044	10898,21302	Carnosic acid	C05498; C09067; C09081; C09128; C09177; C11853; C11857; C11905; C15068; C15459; C18175; CHEBI:134353; CHEBI:81561; HMDB0002358; HMDB0004031; HMDB0012851; HMDB0030103; HMDB0030136; HMDB0031374; HMDB0031375; HMDB0035637; HMDB0036146; HMDB0036623; HMDB0036700; HMDB0036726; HMDB0036761; HMDB0038966; HMDB0062410; HMDB02358; HMDB04031; HMDB12851; HMDB13594; HMDB30103; HMDB30136; HMDB31374; HMDB31375; HMDB35637;	C20H28O4	-H(-)	813

				HMDB36146; HMDB36623; HMDB36700; HMDB36726; HMDB36761; HMDB38966; HMDB62410			
814	331,2638987	27723,20516	C22:4	C15373; C16527; CHEBI:53487; CHEBI:84873; HMDB0002226; HMDB0035676; HMDB0035677; HMDB0038910; HMDB0062725; HMDB02226; HMDB35676; HMDB35677; HMDB38910; HMDB62725	C22H36O2	-H(-)	814
815	333,0068809	6718,916175	[3-(7-hydroxy-4-oxo-4H-chromen-2-yl)phenyl]oxidanesulfonic acid	HMDB0133344; HMDB0134560; HMDB0137537	C15H10O7S	-H(-)	815
816	333,0912321	7196,076437	Penicillin G	C05551; CHEBI:18208; HMDB0015186; HMDB15186	C16H18N2O4S	-H(-)	816
817	333,1196135	7034,491695	Mitomycin	C06681; CHEBI:27504; HMDB0014450; HMDB14450	C15H18N4O5	-H(-)	817

818	333,1703757	6928,285764	3-(2-Methylpropanoyloxy)-8-(2-methylbutanoyloxy)-9,10-epoxy-p-mentha-1,3,5-...	HMDB0032699; HMDB0032700; HMDB0134962; HMDB0134963; HMDB0134964; HMDB0134965; HMDB0134966; HMDB0134967; HMDB0134968; HMDB0134969; HMDB0134970; HMDB0134971; HMDB0134972; HMDB32699; HMDB32700	C19H26O5	-H(-)	818
819	333,2066057	20335,23241	15-Keto-13,14-dihydroprostaglandin A2	C05949; C05953; C05954; C05955; C05957; C05958; C09125; C09150; C11876; C14504; C14815; C14913; C15159; C18173; CHEBI:27485; CHEBI:27555; CHEBI:27814; CHEBI:27820; CHEBI:28099; CHEBI:28130; CHEBI:88493; HMDB0001244; HMDB0002710; HMDB0002752; HMDB0004234; HMDB0004236; HMDB0004238; HMDB0005073; HMDB0012824; HMDB0012850; HMDB0035286; HMDB0035878; HMDB0036760; HMDB0036763; HMDB0036828; HMDB0041055;	C20H30O4	-H(-)	819

				HMDB0060046; HMDB0060054; HMDB0060095; HMDB0062298; HMDB0062423; HMDB0062486; HMDB0062524; HMDB01244; HMDB02710; HMDB02752; HMDB04234; HMDB04236; HMDB04238; HMDB05073; HMDB05078; HMDB05086; HMDB12824; HMDB12825; HMDB12850; HMDB35286; HMDB35878; HMDB36760; HMDB36763; HMDB36828; HMDB41055; HMDB60046; HMDB60054; HMDB60095; HMDB62298; HMDB62423; HMDB62486; HMDB62524			
820	333,2787936	8234,049981	Docosatrienoic acid	C16534; CHEBI:1038735; HMDB0002823; HMDB0031099; HMDB02823; HMDB31099	C22H38O2	-H(-)	820
821	334,1251438	4592,660311	Aspartylglycosamine	C04540; CHEBI:17261; HMDB0000489; HMDB00489; HMDB01515	C12H21N3O8	-H(-)	821
822	335,1392948	42360,66112	Nb-Feruloyltryptamine	C03032; HMDB0041519; HMDB41519	C20H20N2O3	-H(-)	822
823	335,22252	18215,20861	Leukotriene	C00959; C02165; C04685; C04686; C04822;	C20H32O4	-H(-)	823

	16		B4	C04849; C04853; C05356; C05965; C05966; C09087; C09175; C14781; C14808; C14810; C14812; C14813; C14820; C14821; C14823; CHEBI:1221367; CHEBI:1263764; CHEBI:15545; CHEBI:15546; CHEBI:15626; CHEBI:15628; CHEBI:15631; CHEBI:15632; CHEBI:15647; CHEBI:27624; CHEBI:34127; CHEBI:34145; CHEBI:34487; CHEBI:34784; CHEBI:63981; CHEBI:63982; CHEBI:90982; CHEBI:90990; CHEBI:91136; CHEBI:91138; CHEBI:91271; CHEBI:91286; HMDB0001085; HMDB0001193; HMDB0002236; HMDB0002656; HMDB0002982; HMDB0004243; HMDB0004244; HMDB0004688; HMDB0004690; HMDB0004692; HMDB0004693; HMDB0004696; HMDB0004699; HMDB0005050; HMDB0005087; HMDB0005088; HMDB0005089; HMDB0010204; HMDB0010211; HMDB0010216; HMDB0010219; HMDB0011135; HMDB0012498; HMDB0012839; HMDB0034686; HMDB0039171; HMDB0039441; HMDB0060103; HMDB0060104;			

				HMDB0060105; HMDB0062409; HMDB0062479; HMDB0062614; HMDB0062615; HMDB0062619; HMDB0062687; HMDB0062688; HMDB0062749; HMDB01085; HMDB01193; HMDB02236; HMDB02656; HMDB02982; HMDB04243; HMDB04244; HMDB04683; HMDB04688; HMDB04690; HMDB04692; HMDB04693; HMDB04696; HMDB04699; HMDB05050; HMDB05072; HMDB05087; HMDB05088; HMDB05089; HMDB06501; HMDB10204; HMDB10211; HMDB10216; HMDB10218; HMDB10219; HMDB11135; HMDB12498; HMDB12839; HMDB12840; HMDB34686; HMDB39171; HMDB39441; HMDB60103; HMDB60104; HMDB60105; HMDB62409; HMDB62479; HMDB62614; HMDB62615; HMDB62619; HMDB62687; HMDB62688; HMDB62749			
824	335,29485	9234,738195	Docosadien	C16533; CHEBI:75117; HMDB0061714;	C22H40O2	-H(-)	824

	53		oate (22:2n6)	HMDB0062219; HMDB61714; HMDB62219			
825	336,0117625	8324,082219	Tenoxicam	CHEBI:553047; HMDB0014612; HMDB14612	C13H11N3O4S2	-H(-)	825
826	336,0382196	118237,8156	Famotidine	C00025; CHEBI:4975; HMDB0001919; HMDB01919	C8H15N7O2S3	-H(-)	826
827	336,178009	5955,140112	Istamycin AO	C17982	C13H27N3O7	-H(-)	827
828	337,1914648	61459,08786	Aspidospermatine	C09019; C09041; C09139; C10940; HMDB0030358; HMDB30358	C21H26N2O2	-H(-)	828
829	337,2378537	13925,55828	14,15-DiHETrE	C02165; C06088; C09205; C14772; C14773; C14774; C14775; CHEBI:15647; CHEBI:63966; CHEBI:63969; CHEBI:63970; CHEBI:63974; HMDB0002265; HMDB0002311; HMDB0002314; HMDB0002343; HMDB0002995; HMDB0012504; HMDB0012838; HMDB0035379; HMDB0060106; HMDB02265; HMDB02311; HMDB02314; HMDB02330; HMDB02342; HMDB02343; HMDB02351; HMDB02995; HMDB04675;	C20H34O4	-H(-)	829

				HMDB04676; HMDB11139; HMDB12504; HMDB12838; HMDB35379; HMDB60106			
830	337,3107823	10686,78311	Erucic acid	C08316; CHEBI:28792; CHEBI:32428; CHEBI:82946; HMDB0002068; HMDB0002884; HMDB0031013; HMDB0032470; HMDB0035566; HMDB0035567; HMDB0035568; HMDB0035569; HMDB0062659; HMDB02068; HMDB02884; HMDB31013; HMDB32470; HMDB35566; HMDB35567; HMDB35568; HMDB35569; HMDB62659	C22H42O2	-H(-)	830
831	338,0875512	4611,55312	6-Hydroxy-5-methoxyindole glucuronide	C03033; HMDB0010362; HMDB0010363; HMDB10362; HMDB10363	C15H17NO8	-H(-)	831
832	338,1254895	3944,610713	5-Hydroxytryptophol glucuronide	CHEBI:32649; HMDB0013200; HMDB13200	C16H21NO7	-H(-)	832

833	338,1719014	3900,010004	Xamoterol	C11775	C16H25N3O5	-H(-)	833
834	338,1768197	3845,485164	Dehydropiperonaline	C08027; C15014; HMDB0040811; HMDB40811	C21H25NO3	-H(-)	834
835	339,0542915	4284,122134	{3-[2-(3,4-dihydroxy-5-methoxyphenyl)ethyl]phenyl}oxidanesulfonic acid	HMDB0129929; HMDB0129934; HMDB0129939; HMDB0129944; HMDB0129955; HMDB0132706; HMDB0135767; HMDB0135781; HMDB0135784	C15H16O7S	-H(-)	835
836	339,0923174	4633,133795	3''-Ketolactose	C01093; C05403; C05731; HMDB0001030; HMDB0029917; HMDB0039725; HMDB0039888; HMDB0039889; HMDB0040159; HMDB01030; HMDB0124752; HMDB29917; HMDB39725; HMDB39888; HMDB39889; HMDB40159	C12H20O11	-H(-)	836
837	339,1083926	3821,270688	Linocinnamarin	CHEBI:89553; HMDB0030678; HMDB0035441; HMDB0060021; HMDB0133636; HMDB0133639; HMDB0133641; HMDB0133643; HMDB0133645;	C16H20O8	-H(-)	837

				HMDB0133647; HMDB0133650; HMDB0133653; HMDB0133657; HMDB0133675; HMDB0133732; HMDB0133733; HMDB0133736; HMDB0133739; HMDB0133742; HMDB0133767; HMDB0133769; HMDB0133771; HMDB0133773; HMDB0135244; HMDB0135652; HMDB30678; HMDB35441; HMDB60021			
838	339,207165	153071,7151	14,19-Dihydroaspidospermatine	HMDB0030359; HMDB30359	C21H28N2O2	-H(-)	838
839	339,2324687	35438,56855	Plastoquinone 3	C07628; C15186; HMDB0033786; HMDB0039762; HMDB33786; HMDB39762	C23H32O2	-H(-)	839
840	339,2895116	6509,646863	Polyoxyethylene (600) monoricinoleate	C19427; HMDB0032476; HMDB32476	C21H40O3	-H(-)	840
841	339,3262603	16649,14567	C22:0	C08281; CHEBI:28941; CHEBI:85983; HMDB0000944; HMDB0035651; HMDB0035655;	C22H44O2	-H(-)	841

				HMDB0035660; HMDB0035667; HMDB0040290; HMDB00944; HMDB35651; HMDB35655; HMDB35660; HMDB35667; HMDB40290			
842	340,1255764	3394,749919	Lactosamine	C00203; C15658; C19702; CHEBI:25001; CHEBI:44230; HMDB0006591; HMDB0011668; HMDB06591; HMDB11668	C12H23NO10	-H(-)	842
843	340,1327212	3306,595765	Sulpiride	C12766; CHEBI:31444; CHEBI:32168; HMDB0014535; HMDB0015135; HMDB14535; HMDB15135	C15H23N3O4S	-H(-)	843
844	340,1402143	3328,619976	Mycotoxin T2	HMDB0032864; HMDB32864	C16H23NO7	-H(-)	844
845	340,192814	7812,098223	Propafenone	C07381; CHEBI:534822; CHEBI:63619; HMDB0015313; HMDB0030339; HMDB0033450; HMDB15313; HMDB30339; HMDB33450	C21H27NO3	-H(-)	845
846	341,0867061	4589,759969	Glucocaffeic acid	C10431; C10433; CHEBI:89555; HMDB0034313; HMDB0036937; HMDB0060024; HMDB0124982; HMDB0124983; HMDB0125114; HMDB0125169; HMDB0125170; HMDB0127999; HMDB0128000; HMDB0128038; HMDB0128039; HMDB0128049;	C15H18O9	-H(-)	846

				HMDB0128050; HMDB0130014; HMDB0130015; HMDB0134062; HMDB0134063; HMDB0134066; HMDB0134067; HMDB0134070; HMDB0134072; HMDB0134073; HMDB0134077; HMDB0134081; HMDB0134082; HMDB34313; HMDB36937; HMDB60024			
847	341,1093283	8295,980721	Disaccharide	C00089; C00185; C00208; C00243; C00252; C00897; C01083; C01235; C01518; C01711; C01725; C01728; C01742; C01970; C01971; C02048; C02964; C03323; C03857; C04147; C04219; C05400; C05402; C06421; C06422; C07064; C08240; C08250; C15548; C18068; C19632; C19633; C19634; C19636; C19773; C20236; CHEBI:16551; CHEBI:16751; CHEBI:17505; CHEBI:17992; CHEBI:18167; CHEBI:27554; CHEBI:28053; CHEBI:28085; CHEBI:28189; CHEBI:32528; CHEBI:33020; CHEBI:36217; CHEBI:36218; CHEBI:36219; CHEBI:47937; CHEBI:4808; CHEBI:6359;	C12H22O11	-H(-)	847

				CHEBI:7570; HMDB0000048; HMDB0000055; HMDB0000163; HMDB0000186; HMDB0000258; HMDB0000740; HMDB0000975; HMDB0002923; HMDB00048; HMDB00055; HMDB0005826; HMDB0006603; HMDB0006792; HMDB0011740; HMDB0011742; HMDB00163; HMDB00186; HMDB00258; HMDB0029880; HMDB0029882; HMDB0029898; HMDB0029902; HMDB0029919; HMDB0029933; HMDB0033368; HMDB0037138; HMDB0038489; HMDB0039237; HMDB0039727; HMDB0039876; HMDB0041627; HMDB0060068; HMDB00740; HMDB00975; HMDB0125600; HMDB0133305; HMDB02923; HMDB05761; HMDB05826; HMDB06603; HMDB06792; HMDB11740; HMDB11742; HMDB14719; HMDB29880; HMDB29882; HMDB29898; HMDB29902; HMDB29919; HMDB29933; HMDB33368; HMDB37138; HMDB38489; HMDB39237; HMDB39727; HMDB39876; HMDB41627; HMDB60068			

848	341,17611 79	5342,937272	7-(4- Hydroxy-3- methoxyphe nyl)-5- methoxy-1- phenyl-3- heptanone	CHEBI:66032; HMDB0029525; HMDB29525	C21H26O4	-H(-)	848
849	341,30541 05	4452,459997	MG(P- 18:0e/0:0/0: 0)	C13860; CHEBI:1075550; HMDB0011153; HMDB0029764; HMDB11153; HMDB29764	C21H42O3	-H(-)	849
850	342,20779 33	10728,41095	Piperolein B	CHEBI:534866; HMDB0030340; HMDB0033959; HMDB30340; HMDB33959	C21H29N O3	-H(-)	850
851	343,03184 19	35604,13022	Molybdopter in precursor Z	HMDB0011683; HMDB11683	C10H11N5 O7P	-H(-)	851
852	343,12498 8	5028,307308	Maltitol	C05399; C08254; C13542; CHEBI:203534; CHEBI:27527; HMDB0002928; HMDB0006791; HMDB0029911; HMDB0040937; HMDB02928; HMDB06791; HMDB29911; HMDB40937	C12H24O1 1	-H(-)	852

853	343,1913467	3829,426541	11-Dehydrocorticosterone	C05490; C14478; C15135; C15208; HMDB0004029; HMDB0004631; HMDB0012614; HMDB0030743; HMDB0031096; HMDB0062770; HMDB04029; HMDB04631; HMDB12614; HMDB30743; HMDB31096; HMDB62770	C21H28O4	-H(-)	853
854	343,2277852	12928,67368	Medroxyprogesterone	C07119; C08158; C14643; C14934; C14954; C14964; C15001; C15064; C15273; C20855; CHEBI:290629; CHEBI:6715; CHEBI:72637; CHEBI:72653; CHEBI:72855; CHEBI:775124; HMDB0001939; HMDB0010213; HMDB0013620; HMDB0013621; HMDB0014398; HMDB0015489; HMDB0033896; HMDB0039885; HMDB0060037; HMDB0060040; HMDB0060047; HMDB0060048; HMDB0060049; HMDB0060050; HMDB0060051; HMDB0060112; HMDB01939; HMDB10213; HMDB13620; HMDB13621; HMDB14398; HMDB15489; HMDB33896; HMDB39885; HMDB60037; HMDB60040; HMDB60047; HMDB60048; HMDB60049; HMDB60050;	C22H32O3	-H(-)	854

				HMDB60051; HMDB60112			
855	343,3222721	2245,73076	MG(18:0e/0:0/0:0)	C13858; HMDB0011143; HMDB11143	C21H44O3	-H(-)	855
856	344,1072275	6238,807704	Omeprazole	C07324; CHEBI:50275; CHEBI:775271; CHEBI:7772; HMDB0001913; HMDB0005009; HMDB0014874; HMDB01913; HMDB05009; HMDB14874	C17H19N3O3S	-H(-)	856
857	344,2436854	3584,418312	3-hydroxyundecanoyl carnitine	HMDB0061637; HMDB61637	C18H35NO5	-H(-)	857
858	345,2433546	5837,326233	Methyl-[10]-shogaol	C10794; C11898; C14976; HMDB0031465; HMDB0033897; HMDB0034944; HMDB0036722; HMDB0041001; HMDB0041302; HMDB31465; HMDB33897; HMDB34944; HMDB36722; HMDB41001; HMDB41302	C22H34O3	-H(-)	858
859	346,0504649	6776,064996	5''-Hydroxypiroxicam	CHEBI:320793; HMDB0014096; HMDB14096	C15H13N3O5S	-H(-)	859

860	346,0550607	6544,241046	AMP	C00020; C00362; C00946; C01367; C04378; C19970; CHEBI:16027; CHEBI:16192; CHEBI:28223; CHEBI:28931; CHEBI:63211; HMDB0000045; HMDB0001044; HMDB0003540; HMDB00045; HMDB0011617; HMDB0059594; HMDB01044; HMDB03540; HMDB06550; HMDB11617; HMDB59594	C10H14N5O7P	-H(-)	860
861	347,1348542	3640,442743	Leonuridine	C17011	C15H24O9	-H(-)	861
862	347,1857729	5122,076111	Gibberellin A110	C06094; C09112; C11858; C11860; CHEBI:134520; CHEBI:27433; HMDB0032010; HMDB0032011; HMDB0032895; HMDB0033981; HMDB0034999; HMDB0036895; HMDB0040989; HMDB0060094; HMDB32010; HMDB32011; HMDB32895; HMDB33981; HMDB34999; HMDB36895; HMDB40989; HMDB60094	C20H28O5	-H(-)	862
863	347,258638	5453,139625	2-Hydroxy-6-pentadecylb	C10759; C14919; HMDB0029683; HMDB0035477; HMDB0036801; HMDB0112069; HMDB0112073; HMDB29683; HMDB35477; HMDB36801	C22H36O3	-H(-)	863

			enzoic acid				
864	347,2945642	6329,300983	5-Heptadecyl-1,3-benzenediol	HMDB0038530; HMDB38530	C23H40O2	-H(-)	864
865	348,1023291	9159,863715	Ampicillin	C06574; C06897; C11749; CHEBI:28971; CHEBI:3547; HMDB0014559; HMDB0015428; HMDB14559; HMDB15428; HMDB30484	C16H19N3O4S	-H(-)	865
866	349,1082919	9203,896893	4''-O-Methylkanzonol W	HMDB0032602; HMDB32602	C21H18O5	-H(-)	866
867	349,2015477	7712,003228	8-iso-15-keto-PGE2	C00427; C04707; C04758; C04835; C06439; C13802; C18171; C18176; C18848; C20214; CHEBI:15547; CHEBI:15554; CHEBI:15557; CHEBI:28031; CHEBI:34939; CHEBI:63979; CHEBI:63992; CHEBI:91287; HMDB0002341; HMDB0002664; HMDB0003034; HMDB0003175; HMDB0010410; HMDB0012552; HMDB0012588; HMDB0012590; HMDB0012641; HMDB0013040;	C20H30O5	-H(-)	867

				HMDB0036701; HMDB0037593; HMDB0038693; HMDB0060096; HMDB0062297; HMDB0062300; HMDB0062616; HMDB02341; HMDB02664; HMDB03034; HMDB03175; HMDB10410; HMDB12552; HMDB12588; HMDB12590; HMDB12641; HMDB13040; HMDB36701; HMDB37593; HMDB38693; HMDB60096; HMDB62297; HMDB62300; HMDB62616			
868	349,2756455	13538,15551	3,4-Dimethyl-5-pentyl-2-furanundecanoic acid	HMDB0031126; HMDB0112078; HMDB31126	C22H38O3	-H(-)	868
869	350,0276532	5479,499104	Meloxicam	C08169; CHEBI:120496; HMDB0014952; HMDB14952	C14H13N3O4S2	-H(-)	869
870	350,0473556	5406,393827	3''-O-Methyl-(-)-epicatechin-5-O-	HMDB0029176; HMDB0029182; HMDB0029184; HMDB0127793; HMDB0127798; HMDB0127800; HMDB0127820; HMDB0127870; HMDB0127892; HMDB0127904; HMDB29176; HMDB29182;	C16H15O7S	-H(-)	870

			sulphate	HMDB29184			
871	351,2174893	13641,41141	Prostaglandin E2	C00427; C00584; C00696; C01312; C02198; C04654; C04671; C04853; C05960; C06314; C06315; C06476; C11997; C13807; C13808; C17652; C17656; CHEBI:131888; CHEBI:15548; CHEBI:15550; CHEBI:15551; CHEBI:15552; CHEBI:15554; CHEBI:15555; CHEBI:15627; CHEBI:15646; CHEBI:28442; CHEBI:34820; CHEBI:34821; CHEBI:36075; CHEBI:63993; CHEBI:6498; CHEBI:6499; CHEBI:90833; HMDB0001220; HMDB0001320; HMDB0001335; HMDB0001381; HMDB0001403; HMDB0001452; HMDB0001509; HMDB0002122; HMDB0002132; HMDB0002363; HMDB0002400; HMDB0002776; HMDB0004240; HMDB0004385; HMDB0005077; HMDB0005082; HMDB0005844; HMDB0012481; HMDB0012564; HMDB0012587; HMDB0034676; HMDB0035064; HMDB0035338; HMDB0035339; HMDB0036756; HMDB0060041; HMDB0060042;	C20H32O5	-H(-)	871

				HMDB0062291; HMDB0062798; HMDB01220; HMDB01320; HMDB01335; HMDB01381; HMDB01403; HMDB01452; HMDB01509; HMDB02122; HMDB02132; HMDB02363; HMDB02400; HMDB02776; HMDB04240; HMDB04385; HMDB05077; HMDB05082; HMDB05092; HMDB05844; HMDB11598; HMDB11650; HMDB12481; HMDB12564; HMDB12587; HMDB34676; HMDB35064; HMDB35338; HMDB35339; HMDB36756; HMDB60041; HMDB60042; HMDB62291; HMDB62798			
872	352,0669082	17729,63336	2,5-Diamino-6-(5-phospho-D-ribosylamino)pyrimidin-4(3H)-one;	C01304; HMDB0134940; HMDB0134941; HMDB0134943; HMDB0134944; HMDB0134946; HMDB0134947; HMDB0134950	C15H15N9O9; C9H16N5O8P	-H(-); -H(-)	872

			5-[(6-carboxy-...				
873	352,0820364	14665,85661	Acenocoumarol	C09634; CHEBI:53766; HMDB0015487; HMDB15487	C19H15NO6	-H(-)	873
874	354,0224007	53255,74999	Succinyl sulfathiazole	C11745	C13H13N3O5S2	-H(-)	874
875	355,0884166	8098,530983	Acaciabiuronic acid	HMDB0029938; HMDB0039722; HMDB0039724; HMDB0039726; HMDB0125609; HMDB0125610; HMDB0125611; HMDB0125612; HMDB29938; HMDB39722; HMDB39724; HMDB39726	C12H20O12	-H(-)	875
876	355,1790352	39579,94867	Xanthoplanine	HMDB0033356; HMDB33356	C21H26NO4	-H(-)	876
877	355,3216053	5714,392953	2(R)-hydroxydocosanoic acid	C03049; C19623; CHEBI:76980; HMDB0061660; HMDB61660	C22H44O3	-H(-)	877
878	356,0988001	9565,004514	Cyclodopa glucoside	C17751; CHEBI:133005; CHEBI:134458; HMDB0029833; HMDB0037263; HMDB0240215; HMDB29833; HMDB37263	C15H19NO9	-H(-)	878
879	356,11814	5148,284288	Niazimicin A	HMDB0031944; HMDB31944	C16H23N	-H(-)	879

	54				O6S		
880	357,1489307	11819,72214	Cilastatin; 2-{4-[(1E)-1,2-diphenylbut-1-en-1-yl]phenoxy} acetic acid	C01675; CHEBI:3697; HMDB0015535; HMDB0142451; HMDB15535	C16H26N2O5S; C24H22O3	-H(-); -H(-)	880
881	357,2791123	8849,110181	C24:5	C19660; CHEBI:77360; CHEBI:77527; HMDB0006322; HMDB0006323; HMDB0035583; HMDB06322; HMDB06323; HMDB12841; HMDB13637; HMDB35583	C24H38O2	-H(-)	881
882	359,1341086	6506,888834	1-(3,4-Dimethoxyphenyl)-1,2-ethanediol 1-O-b-D-glucoside	C11636; C11647; C11649; HMDB0034626; HMDB0034627; HMDB0037028; HMDB0038381; HMDB0039473; HMDB34626; HMDB34627; HMDB37028; HMDB38381; HMDB39473	C16H24O9	-H(-)	882
883	359,222352	9641,499357	Neuroprotectin D1	C14939; C15314; C15469; C20406; HMDB0003689; HMDB0004038; HMDB0030454;	C22H32O4	-H(-)	883

				HMDB0031848; HMDB0061063; HMDB0061064; HMDB0061065; HMDB03689; HMDB04038; HMDB30454; HMDB31848; HMDB61063; HMDB61064; HMDB61065			
884	359,294847	5117,399243	C24:4	C19642; CHEBI:77526; HMDB0006246; HMDB0035679; HMDB0035680; HMDB06246; HMDB35679; HMDB35680	C24H40O2	-H(-)	884
885	360,1022882	10815,33716	5-Hydroxyomeprazole	CHEBI:388428; CHEBI:63840; HMDB0014010; HMDB0014012; HMDB0014013; HMDB0061091; HMDB14010; HMDB14012; HMDB14013; HMDB61091	C17H19N3O4S	-H(-)	885
886	361,0181226	4324,320809	5''-xanthylate(2-)	CHEBI:57464; HMDB0062755; HMDB62755	C10H11N4O9P	-H(-)	886
887	362,0513539	4699,89048	GMP	C00144; C06193; C18239; C19968; CHEBI:17345; CHEBI:60210; HMDB0001397; HMDB0011670; HMDB0059639; HMDB01397; HMDB11670; HMDB59639	C10H14N5O8P	-H(-)	887
888	362,11554	4335,130738	9-	C16822	C20H17N3	-H(-)	888

	97		Aminocamptothecin		O4		
889	362,1384748	3217,630557	delta-(L-2-Aminoadipyl)-L-cysteinyl-D-valine	C05556	C14H25N3O6S	-H(-)	889
890	362,2486197	2921,805266	Aurachin D	C10641; C15128	C25H33NO	-H(-)	890
891	363,0541631	3402,406352	(4-{[2-methoxy-4-(prop-2-en-1-yl)phenoxy]carbonyl}phenyl)oxidanesulfonic acid	HMDB0135252	C17H16O7S	-H(-)	891
892	363,10083	3473,326452	Bumetanide	CHEBI:3213; HMDB0015024; HMDB15024	C17H20N2	-H(-)	892

	23				O5S		
893	364,097446	3251,560382	Amoxicillin	C06827; C12979; CHEBI:2676; CHEBI:323183; HMDB0015193; HMDB0030500; HMDB15193; HMDB30500	C16H19N3O5S	-H(-)	893
894	365,1357651	5522,158894	Tetrahydropentoxyline	HMDB0029992; HMDB0033108; HMDB29992; HMDB33108	C17H22N2O7	-H(-)	894
895	365,1971531	5273,029794	20-Carboxy-leukotriene B4	C05950; C08758; C15438; CHEBI:27562; HMDB0006059; HMDB0012549; HMDB0012551; HMDB0036863; HMDB0037062; HMDB04235; HMDB06059; HMDB12549; HMDB12551; HMDB36863; HMDB37062	C20H30O6	-H(-)	100
896	365,342049	19304,05374	C24:1	C08323; C15398; CHEBI:44247; HMDB0002368; HMDB0029799; HMDB0035559; HMDB0035560; HMDB0035561; HMDB0035562; HMDB0035563; HMDB02368; HMDB29799; HMDB35559; HMDB35560; HMDB35561; HMDB35562; HMDB35563	C24H46O2	-H(-)	100
897	366,0491851	3334,490015	Tetraphyllin B sulfate	HMDB0038486; HMDB38486	C12H17NO10S	-H(-)	100

898	367,1396686	12409,76088	4-Hydroxy-3-prenylbenzoic acid glucoside	HMDB0039891; HMDB0040895; HMDB0132962; HMDB0132997; HMDB39891; HMDB40895	C18H24O8	-H(-)	100
899	367,1582016	174283,2225	Dehydroepiandrosterone sulfate	C04555; CHEBI:16814; CHEBI:84094; HMDB0001032; HMDB0002833; HMDB0013230; HMDB01032; HMDB02833; HMDB13230	C19H28O5S	-H(-)	100
900	367,1893134	21343,97675	LPA(a-13:0/0:0)	HMDB0114760; HMDB0114764	C16H33O7P	-H(-)	100
901	367,2846646	7920,58767	Octadecyl fumarate	HMDB0038073; HMDB38073	C22H40O4	-H(-)	100
902	367,3574257	17761,16272	C24:0	C08320; CHEBI:28866; HMDB0002003; HMDB0035633; HMDB0035636; HMDB0040887; HMDB02003; HMDB35633; HMDB35636; HMDB40887	C24H48O2	-H(-)	100
903	368,1613462	41188,32015	Epanolol	C11773	C20H23N3O4	-H(-)	100
904	369,15604	292503,7245	3,4,5-	HMDB0133009	C18H26O8	-H(-)	100

	75		trihydroxy-6-{[1-(4-methoxyphenyl)pentan-3-yl]oxy}oxane-2-carboxylic ...				
905	371,0408883	5475,968155	Gomphidic acid	C10334; HMDB0033542; HMDB33542	C18H12O9	-H(-)	100
906	371,2582804	4689,124733	Cervonoyl ethanolamide	C13828; C15057; CHEBI:189797; CHEBI:34488; HMDB0013627; HMDB0014629; HMDB0041301; HMDB13627; HMDB14629; HMDB41301	C24H36O3	-H(-)	100
907	372,2326529	2842,463344	Androsta-5,16-dieno[17,16-b]quinolin-3beta-ol	C15370	C26H31NO	-H(-)	100
908	373,20157	5122,137735	11beta,20-	C16781; CHEBI:6888; HMDB0011651;	C22H30O5	-H(-)	100

	32		Dihydroxy-3-oxopregn-4-en-21-oic acid	HMDB0015094; HMDB0030456; HMDB0040525; HMDB11651; HMDB15094; HMDB30456; HMDB40525			
909	373,2755065	11454,93603	3b-Hydroxy-5-cholenoic acid	C03070; C14991; C15345; CHEBI:384794; HMDB0000308; HMDB00308; HMDB0038522; HMDB0041453; HMDB38522; HMDB41453	C24H38O3	-H(-)	100
910	375,0905161	4616,118199	{4-[(E)-2-{3,5-dihydroxy-4-[(1E)-3-methylbut-1-en-1-yl]phenyl}ethenyl]pheny...	HMDB0128996	C19H20O6S	-H(-)	100
911	375,1820665	5955,296601	18-Oxocortisol	C09714; C17050; HMDB0000332; HMDB0031932; HMDB00332; HMDB0039557; HMDB0061016; HMDB31932; HMDB39557; HMDB61016	C21H28O6	-H(-)	100

912	375,2174106	5972,404601	Resolvin D2	C00584; C18178; C18179; HMDB0002294; HMDB0003733; HMDB0011652; HMDB0012580; HMDB0012601; HMDB0012638; HMDB0012777; HMDB0012855; HMDB0030147; HMDB0030455; HMDB0040955; HMDB0040956; HMDB02294; HMDB03733; HMDB11652; HMDB12580; HMDB12601; HMDB12638; HMDB12777; HMDB12855; HMDB30147; HMDB30455; HMDB40955; HMDB40956	C22H32O5	-H(-)	100
913	375,2913503	18487,71357	Allolithocholic acid	C03990; C17658; CHEBI:16325; CHEBI:542339; HMDB0000381; HMDB0000713; HMDB0000717; HMDB0000761; HMDB0002431; HMDB0002492; HMDB00381; HMDB00713; HMDB00717; HMDB00761; HMDB02431; HMDB02492	C24H40O3	-H(-)	100
914	377,1602082	10570,49875	Carinol	C08757; C09362; C09433; C09517; CHEBI:24236; HMDB0030657; HMDB0034474; HMDB0035053; HMDB0036694; HMDB0036897; HMDB0036900; HMDB0036945; HMDB0041002; HMDB0041231; HMDB0041349; HMDB30657; HMDB34474;	C20H26O7	-H(-)	100

				HMDB35053; HMDB36694; HMDB36897; HMDB36900; HMDB36945; HMDB41002; HMDB41231; HMDB41349			
915	377,2329619	6404,830278	Annoglabasin F	C09169; C10320; C13818; C13819; HMDB0035508; HMDB35508	C22H34O5	-H(-)	100
916	377,2692129	7952,878594	2-Arachidonylglycerol	C13856; C13857; CHEBI:34071; CHEBI:52392; CHEBI:66735; HMDB0004666; HMDB0011549; HMDB0011578; HMDB0011579; HMDB0035273; HMDB0036356; HMDB0036568; HMDB04666; HMDB11548; HMDB11549; HMDB11578; HMDB11579; HMDB35273; HMDB36356; HMDB36568	C23H38O4	-H(-)	100
917	377,3066444	11426,9162	3,4-Dimethyl-5-pentyl-2-furantridecanoic acid	HMDB0061649; HMDB0112080; HMDB61649	C24H42O3	-H(-)	100
918	378,0890684	9321,995585	Methicillin sodium	C13973	C17H19N2O6S.	-H(-)	100

919	379,0832918	14684,64034	Diphyllin	C10559; C12373	C21H16O7	-H(-)	100
920	379,1606544	4203,049206	3-Methyl-3-butenyl apiosyl-(1->6)-glucoside	HMDB0031954; HMDB0031956; HMDB0041360; HMDB31954; HMDB31956; HMDB41360	C16H28O10	-H(-)	100
921	379,2132637	5315,243515	[6]-Gingerdiol 3,5-diacetate	HMDB0040568; HMDB40568	C21H32O6	-H(-)	100
922	379,2478543	6313,018311	Bisnorcholic acid	HMDB0002082; HMDB02082	C22H36O5	-H(-)	80
923	379,2842327	5545,041165	MG(0:0/20:3(11Z,14Z,17Z)/0:0)	HMDB0011545; HMDB0011546; HMDB0011547; HMDB0011575; HMDB0011576; HMDB0011577; HMDB0032735; HMDB0039403; HMDB0041103; HMDB11545; HMDB11546; HMDB11547; HMDB11575; HMDB11576; HMDB11577; HMDB32735; HMDB39403; HMDB41103	C23H40O4	-H(-)	79

924	380,29129	2604,839074	Cannabisativine	C10576	C21H39N3O3	-H(-)	100
925	381,1553005	3666,146166	1-(alpha-Methyl-4-(2-methylpropyl)benzeneacetate)-beta-D-Glucopyranuronic acid	C03033; HMDB0010343; HMDB0035201; HMDB0038916; HMDB0039811; HMDB0060919; HMDB0132958; HMDB0140970; HMDB10343; HMDB35201; HMDB38916; HMDB39811; HMDB60919	C19H26O8	-H(-)	100
926	381,2789751	3880,173019	(R)-3,4-Dihydro-2-methyl-2-(4,8,12-trimethyl-3,7,11-tridecatrienyl)-2H-1-be...	HMDB0036368; HMDB36368	C26H38O2	-H(-)	100
927	381,31532	3689,802124	5a-	C05107; C15357; CHEBI:205734; CHEBI:27910;	C27H42O	-H(-)	100

	66		Cholesta-8,24-dien-3-one	HMDB0001093; HMDB0002394; HMDB0003896; HMDB01093; HMDB02394; HMDB03896			
928	381,3727347	7674,37683	C25:0	CHEBI:39420; HMDB0002361; HMDB0035629; HMDB0035630; HMDB0035632; HMDB0036843; HMDB02361; HMDB35629; HMDB35630; HMDB35632; HMDB36843	C25H50O2	-H(-)	90
929	382,0284824	3473,951097	Ceftizoxime	C06890; CHEBI:553473; HMDB0015427; HMDB15427	C13H13N5O5S2	-H(-)	100
930	383,0461643	4596,676246	Piperazine citrate	C13660	(C6H8O7)2.	-H(-)	100
931	383,3522168	4895,375747	Cerebronic acid	C17873; CHEBI:61302; HMDB0039540; HMDB39540	C24H48O3	-H(-)	100
932	384,0978586	3035,159275	S-Inosyl-L-homocysteine	C03431	C14H19N5O6S	-H(-)	100
933	384,2506376	2729,439758	Actinonin	C12056	C19H35N3O5	-H(-)	100
934	385,09268	2936,954841	8-8"-	C03503; C09922; C09924; C10446; C17958;	C20H18O8	-H(-)	100

	29		Dehydrodiferulic acid	C20502; C20504; HMDB0029277; HMDB0033876; HMDB0041277; HMDB0127227; HMDB29277; HMDB33876; HMDB41277			
935	385,1501649	14370,23165	Methylsyringin	HMDB0039570; HMDB39570	C18H26O9	-H(-)	100
936	385,1665198	30255,6422	Porson	C10547; C10561; HMDB0030810; HMDB0035404; HMDB0035405; HMDB30810; HMDB35404; HMDB35405	C22H26O6	-H(-)	100
937	385,2029809	12527,06753	Euglobal Ia1	C09927; C09966; C14651; C15185; CHEBI:87820; CHEBI:87821; HMDB0030032; HMDB0030033; HMDB0030034; HMDB0030036; HMDB0062612; HMDB0062679; HMDB30032; HMDB30033; HMDB30034; HMDB30036; HMDB62612; HMDB62679	C23H30O5	-H(-)	100
938	385,2231227	6869,645921	10,11-dihydro-20-trihydroxy-leukotriene B4	C11990; HMDB0012503; HMDB12503	C20H34O7	-H(-)	100

939	385,2589613	4526,668458	Glycerol trihexanoate	C03240; CHEBI:77386; HMDB0031125; HMDB0036015; HMDB0038018; HMDB31125; HMDB36015; HMDB38018	C21H38O6	-H(-)	100
940	385,3467144	4066,56409	Cholesterol	C00187; C01189; C03091; C03238; C03845; C05417; C05423; C15337; C19663; CHEBI:1307929; CHEBI:16074; CHEBI:16113; CHEBI:16608; CHEBI:17168; CHEBI:17762; HMDB0000067; HMDB0000871; HMDB0001170; HMDB00067; HMDB0006841; HMDB0011182; HMDB0029815; HMDB00507; HMDB0059604; HMDB0062453; HMDB00871; HMDB01170; HMDB06541; HMDB06841; HMDB11182; HMDB29815; HMDB59604; HMDB59618; HMDB62453	C27H46O	-H(-)	100
941	386,1240067	2950,604696	Dihydroxycitracridone I	HMDB0031401; HMDB31401	C20H21NO7	-H(-)	100
942	386,3061484	2115,434009	3,5-Didecanoylpyridine	HMDB0035515; HMDB35515	C25H41NO2	-H(-)	100

943	386,9991327	6215,490843	dUDP	C01346; CHEBI:28850; HMDB0001000; HMDB01000	C9H14N2O11P2	-H(-)	100
944	387,0724106	2940,245525	Urolithin B 3-O-glucuronide	CHEBI:88848; HMDB0041787; HMDB41787	C19H16O9	-H(-)	100
945	387,2532134	6304,705298	Cavipetin C	CHEBI:88109; HMDB0030366; HMDB0062744; HMDB30366; HMDB62744	C24H36O4	-H(-)	100
946	387,3263601	3329,370998	3-Hydroxy-1-phenyl-1-eicosanone	HMDB0036371; HMDB36371	C26H44O2	-H(-)	100
947	388,1867127	3313,757335	Cilazaprilat	C17309	C20H27N3O5	-H(-)	86
948	388,1991384	2663,990734	Alfuzosin	CHEBI:51141; HMDB0014490; HMDB14490	C19H27N5O4	-H(-)	100
949	389,1243333	4326,396381	trans-Piceid	C10275; C10823; CHEBI:336507; CHEBI:76155; HMDB0030564; HMDB0030565; HMDB0031422; HMDB0036294; HMDB0135201; HMDB30564; HMDB30565; HMDB31422; HMDB36294	C20H22O8	-H(-)	100
950	389,26951	13157,35661	12-	C03690; C11637; C14227; C14577; C15375;	C24H38O4	-H(-)	100

	13		Ketodeoxycholic acid	CHEBI:803536; CHEBI:88104; HMDB0000328; HMDB0000460; HMDB0000467; HMDB0000503; HMDB0012866; HMDB00328; HMDB0041454; HMDB00460; HMDB00467; HMDB00503; HMDB0062742; HMDB12866; HMDB41454; HMDB62742			
951	390,1404461	4721,624137	Proacaciberin	C08337	C16H25NO10	-H(-)	100
952	391,1757215	11261,97531	Viguiestenin	C09586; C17054	C21H28O7	-H(-)	100
953	391,213079	7439,14521	Dihydrofukinolide	C09115; C17013; HMDB0034662; HMDB34662	C22H32O6	-H(-)	100
954	391,2849422	71941,50281	3b,12a-Dihydroxy-5a-cholanoic acid	C02528; C04483; C07880; C15515; C15517; C17646; C17660; C17661; C17662; C17664; C17687; CHEBI:16755; CHEBI:28834; CHEBI:43419; CHEBI:473574; CHEBI:52030; CHEBI:542045; CHEBI:9907; HMDB0000348; HMDB0000361; HMDB0000384; HMDB0000411; HMDB0000438; HMDB0000478; HMDB0000514;	C24H40O4	-H(-)	100

				HMDB0000518; HMDB0000626; HMDB0000664; HMDB0000686; HMDB0000733; HMDB0000811; HMDB0000946; HMDB0002451; HMDB0002488; HMDB0002536; HMDB0002585; HMDB00348; HMDB00361; HMDB00384; HMDB00411; HMDB00438; HMDB00478; HMDB00514; HMDB00518; HMDB00626; HMDB00664; HMDB00686; HMDB00733; HMDB00811; HMDB00946; HMDB02451; HMDB02488; HMDB02536; HMDB02585; HMDB15525			
955	391,3935727	3107,576864	1-Cyclohexyl-11-heneicosanone	HMDB0029802; HMDB29802	C27H52O	-H(-)	100
956	393,1549794	9886,297463	Gibberellin A39	C08764; C09799; HMDB0035045; HMDB0035046; HMDB35045; HMDB35046	C20H26O8	-H(-)	100
957	393,2275821	6784,179085	(3b,6b,8b,12a)-8,12-	HMDB0031964; HMDB0040569; HMDB31964; HMDB40569	C22H34O6	-H(-)	100

			Epoxy-7(11)-eremophilene-6-angeloyloxy-8,12-dimethoxy-3-ol				
958	393,2417902	6163,310171	LPA(P-16:0e/0:0)	C15646; HMDB0011154; HMDB11154	C19H39O6P	-H(-)	100
959	393,3729733	8134,983621	C26:1	CHEBI:77525; HMDB0035215; HMDB0035549; HMDB0035550; HMDB0035551; HMDB0035552; HMDB0035553; HMDB0035554; HMDB0062452; HMDB35215; HMDB35549; HMDB35550; HMDB35551; HMDB35552; HMDB35553; HMDB35554; HMDB62452	C26H50O2	-H(-)	100
960	395,2066178	7660,69386	Isopetasoside	HMDB0029622; HMDB29622	C21H32O7	-H(-)	100
961	395,29508	4604,796236	d-	C14156; C20737; CHEBI:33276; HMDB0030008;	C27H40O2	-H(-)	100

	62		Tocotrienol	HMDB0034192; HMDB0034421; HMDB0038504; HMDB0038505; HMDB30008; HMDB34192; HMDB34421; HMDB38504; HMDB38505			
962	395,3885069	9206,37499	C26:0	CHEBI:31009; HMDB0002356; HMDB0035628; HMDB02356; HMDB35628; HMDB60125	C26H52O2	-H(-)	100
963	396,2030687	4171,207738	Echimidine	C10299; C10319	C20H31NO7	-H(-)	100
964	396,274328	3624,820731	PGF2a ethanolamide	C13828; CHEBI:53081; HMDB0013628; HMDB13628	C22H39NO5	-H(-)	70
965	397,0620634	11744,24941	Sulfasalazine	C07316; CHEBI:9334; HMDB0014933; HMDB14933	C18H14N4O5S	-H(-)	100
966	397,0825591	4803,438008	Ethoxysulfuron	C18440	C15H18N4O7S	-H(-)	100
967	397,0956357	4436,80318	Zearalenone 4-sulfate	HMDB0033623; HMDB33623	C18H22O8S	-H(-)	100
968	397,1504653	8543,858186	Methyl 3,4-dihydroxy-5-prenylbenzo	HMDB0040121; HMDB0040896; HMDB0132960; HMDB0132964; HMDB0132966; HMDB0132967; HMDB40121; HMDB40896	C19H26O9	-H(-)	100

			ate 3-glucoside				
969	397,331427	8854,838293	Lauroyl peroxide	C19438	C24H46O4	-H(-)	100
970	397,3676069	7641,14044	2-Hydroxy-22-methyltetracosanoic acid	HMDB0040909; HMDB40909	C25H50O3	-H(-)	84
971	398,0639255	21110,61651	Vitisidin A	HMDB0041596; HMDB41596	C20H15O9	-H(-)	100
972	399,076655	16448,42809	{1-[5-hydroxy-8-(2-hydroxypropan-2-yl)-2-oxo-2H,8H,9H-furo[2,3-h]chromen-	HMDB0130139; HMDB0130141; HMDB0130143; HMDB0130145	C17H20O9S	-H(-)	81

			4-...				
973	399,1295069	7391,407457	3,4,5-trihydroxy-6-[(4-hydroxy-7-methoxy-2,2-dimethyl-3,4-dihydro-2H-1-benz...	HMDB0125816; HMDB0127783; HMDB0127784; HMDB0127790; HMDB0127791	C18H24O10	-H(-)	100
974	399,2912183	4162,061774	Testosterone enanthate	C08157; C15283; CHEBI:9464; HMDB0005814; HMDB05814	C26H40O3	-H(-)	100
975	401,1137306	2901,384856	Saphenamycin	C12311	C23H18N2O5	-H(-)	100
976	401,2087754	9749,73548	Trandolaprilat	HMDB0060583; HMDB60583	C22H30N2O5	-H(-)	100
977	401,2911757	2929,470676	Sorbitan palmitate	HMDB0029887; HMDB29887	C22H42O6	-H(-)	100
978	401,3065323	3124,630751	Oryzarol	HMDB0029458; HMDB29458	C26H42O3	-H(-)	100

979	402,3009824	2410,998295	N-Palmitoyl phenylalanine	HMDB0062339; HMDB62339	C25H41NO3	-H(-)	100
980	403,284689	4609,109276	MG(0:0/22:5(4Z,7Z,10Z,13Z,16Z)/0:0)	C14624; HMDB0011555; HMDB0011556; HMDB0011585; HMDB0011586; HMDB0012517; HMDB11555; HMDB11556; HMDB11585; HMDB11586; HMDB12517	C25H40O4	-H(-)	100
981	404,1364917	2368,420138	Mazaticol hydrochloride	C12948	C21H27NO3S2.	-H(-)	100
982	405,0435871	2844,317991	4,4',6,6'-Tetranitro-2,2'-azoxytoluene	C16411; C16412; C16413	C14H10N6O9	-H(-)	100
983	405,1711452	169633,3804	Rubraflavone A	C09275; CHEBI:429966; CHEBI:582316; CHEBI:582342; HMDB0030628; HMDB0030778; HMDB0030779; HMDB0030780; HMDB0033099; HMDB0033536; HMDB0033611; HMDB0034269;	C25H26O5	-H(-)	100

				HMDB0034917; HMDB0037444; HMDB0038875; HMDB0038876; HMDB30628; HMDB30778; HMDB30779; HMDB30780; HMDB33099; HMDB33536; HMDB33611; HMDB34269; HMDB34917; HMDB37444; HMDB38875; HMDB38876			
984	405,2642595	12555,32201	7-Ketodeoxycholic acid	C01292; C04643; C10298; CHEBI:16312; CHEBI:16390; CHEBI:88108; HMDB0000391; HMDB0000400; HMDB0000502; HMDB0033399; HMDB0035288; HMDB00391; HMDB00400; HMDB00502; HMDB0062680; HMDB33399; HMDB35288; HMDB62680	C24H38O5	-H(-)	100
985	405,3000226	7789,893588	MG(0:0/22:4(7Z,10Z,13Z,16Z)/0:0)	HMDB0011554; HMDB0011584; HMDB11554; HMDB11584	C25H42O4	-H(-)	99
986	406,0306668	4633,378704	4-Mercaptobutyl glucosinolat	C08412; HMDB0039895; HMDB39895	C11H21NO9S3	-H(-)	100

			e				
987	407,0981287	3191,000347	3,4,5-trihydroxy-6-{[2-oxo-6-(3-oxobutyl)-2H-chromen-7-yl]oxy}oxane-2-carbo...	C09011; HMDB0128977; HMDB0130050; HMDB0130052; HMDB0130053; HMDB0130054; HMDB0130055; HMDB0130056; HMDB0130057; HMDB0130091; HMDB0130092; HMDB0135799; HMDB0135802; HMDB0135803; HMDB0135804	C19H20O10	-H(-)	100
988	407,1311263	5261,261324	Wybutoxine	HMDB0039126; HMDB39126	C16H20N6O7	-H(-)	100
989	407,1459114	4047,174006	Melatonin glucuronide	HMDB0060830; HMDB60830	C19H24N2O8	-H(-)	100
990	407,1708669	10090,56192	3-O-Methylniveusin A	C09579; HMDB0039084; HMDB39084	C21H28O8	-H(-)	100
991	407,2231398	9883,50875	cis-Methylbixin	HMDB0032021; HMDB0039078; HMDB0041126; HMDB32021; HMDB39078; HMDB41126	C26H32O4	-H(-)	100
992	407,27934	20766,35472	Cholate	C00695; C01558; C04661; C17644; C17647;	C24H40O5	-H(-)	100

	05			C17649; C17650; C17654; C17657; C17667; C17668; C17726; C17727; C17737; CHEBI:134216; CHEBI:16359; CHEBI:36240; CHEBI:803879; CHEBI:88105; CHEBI:89219; HMDB0000312; HMDB0000320; HMDB0000326; HMDB0000330; HMDB0000364; HMDB0000371; HMDB0000376; HMDB0000390; HMDB0000395; HMDB0000404; HMDB0000414; HMDB0000415; HMDB0000419; HMDB0000427; HMDB0000432; HMDB0000505; HMDB0000506; HMDB0000527; HMDB0000619; HMDB0000760; HMDB0000865; HMDB0000917; HMDB00312; HMDB00320; HMDB00326; HMDB00330; HMDB00364; HMDB00371; HMDB00376; HMDB00390; HMDB00395; HMDB00404; HMDB00414; HMDB00415; HMDB00419; HMDB00427; HMDB00432; HMDB00505; HMDB00506; HMDB00527; HMDB00619; HMDB00760; HMDB00865; HMDB00917; HMDB06053			

993	409,0819733	6108,701253	Bensulfuron-methyl	C10937	C16H18N4O7S	-H(-)	100
994	409,1141241	3765,697979	3,4,5-trihydroxy-6-[2-hydroxy-1-(1-oxo-1H-isochromen-3-yl)butoxy]oxane-2-ca...	HMDB0130066; HMDB0130067	C19H22O10	-H(-)	100
995	409,2350965	22457,53599	LPA(0:0/16:0)	C00416; C04036; CHEBI:15799; HMDB0007849; HMDB0007853; HMDB00327; HMDB07849; HMDB07853	C19H39O7P	-H(-)	100
996	410,2699849	3231,559342	Fesoterodine	CHEBI:775715; HMDB0015648; HMDB15648	C26H37NO3	-H(-)	100
997	411,0858859	5302,401955	Zileuton O-glucuronide	HMDB0060914; HMDB60914	C17H20N2O8S	-H(-)	100
998	411,18358	6882,002612	GF	C11238	C25H24N4	-H(-)	100

	04		109203X		O2		
999	411,2399939	4526,103473	LysoPC(10:0)	HMDB0003752; HMDB03752	C18H39NO7P	-H(-)	100
1000	411,2899337	3695,024795	Calcipotriol	C08156; CHEBI:50749; HMDB0015567; HMDB0036848; HMDB0036849; HMDB0039022; HMDB0040749; HMDB0040765; HMDB15567; HMDB36848; HMDB36849; HMDB39022; HMDB40749; HMDB40765	C27H40O3	-H(-)	100
1001	412,2853736	6958,02776	N-Docosahexaenoyl GABA	HMDB0062332; HMDB62332	C26H39NO3	-H(-)	100
1002	413,1167297	10665,367	Nafcillin	C07250; CHEBI:7447; HMDB0014745; HMDB14745	C21H22N2O5S	-H(-)	100
1003	413,3260547	5440,015747	DG(8:0/13:0/0:0)	HMDB0092907; HMDB0092908; HMDB0092909; HMDB0092910; HMDB0092911; HMDB0092912; HMDB0093139; HMDB0093140; HMDB0093141; HMDB0093142; HMDB0093143; HMDB0093144; HMDB92907; HMDB92908; HMDB92909; HMDB92910; HMDB92911; HMDB92912;	C24H46O5	-H(-)	73

				HMDB93139; HMDB93140; HMDB93141; HMDB93142; HMDB93143; HMDB93144			
1004	414,1706156	3551,085966	Naltriben	C20166	C26H25NO4	-H(-)	100
1005	414,2655624	3217,671593	Bimatoprost	C07241; CHEBI:51230; CHEBI:64064; HMDB0015041; HMDB0015073; HMDB15041; HMDB15073	C25H37NO4	-H(-)	100
1006	414,3008235	3906,206744	Myxalamid A	C12158	C26H41NO3	-H(-)	100
1007	415,3209985	12301,81705	24,25-Dihydroxyvitamin D	C01673; C03963; C05457; C07712; C08127; C08913; C08914; C12919; C15633; C16493; C16819; C17331; C17332; C17333; C17336; C17339; C19648; C19649; C19650; CHEBI:15578; CHEBI:17823; CHEBI:28477; CHEBI:28933; CHEBI:48701; CHEBI:7931; CHEBI:86115; CHEBI:87476; CHEBI:89079; CHEBI:89324; HMDB0000430; HMDB0001420; HMDB0001903; HMDB0002197; HMDB0006226; HMDB0006720; HMDB0012453; HMDB0012457; HMDB0012459;	C27H44O3	-H(-)	100

				HMDB0015046; HMDB0030024; HMDB0030047; HMDB0030048; HMDB0035300; HMDB00430; HMDB0060133; HMDB0060425; HMDB0060508; HMDB0062401; HMDB0062610; HMDB0062736; HMDB01420; HMDB01903; HMDB02197; HMDB06226; HMDB06720; HMDB12453; HMDB12457; HMDB12459; HMDB15046; HMDB30024; HMDB30047; HMDB30048; HMDB35300; HMDB60133; HMDB60425; HMDB60508; HMDB62401; HMDB62610; HMDB62736			
1008	415,3577171	12343,85364	Gamma-Tocopherol	C02483; C14152; C15789; C15795; C15797; C15883; CHEBI:298402; CHEBI:47771; HMDB0001492; HMDB0006335; HMDB0012112; HMDB0012173; HMDB0034253; HMDB0034401; HMDB01492; HMDB02634; HMDB06335; HMDB12112; HMDB12173; HMDB34253; HMDB34401	C28H48O2	-H(-)	100
1009	416,21906	3808,663515	Cilazapril	CHEBI:553655; HMDB0015433; HMDB15433	C22H31N3	-H(-)	100

	51				O5		
1010	416,2439467	4024,893375	Batrachotoxinin A	C20032	C24H35NO5	-H(-)	100
1011	417,1301693	4542,81358	2-N,6-N-Bis(2,3-dihydroxybenzoyl)-L-lysine	C06446	C20H22N2O8	-H(-)	100
1012	417,154533	5368,098465	Lirioresinol A	C09435; C09493; C10889; CHEBI:49211; HMDB0038928; HMDB0039068; HMDB0135640; HMDB38928; HMDB39068	C22H26O8	-H(-)	100
1013	417,26391	5043,963125	Simvastatin	C15272; CHEBI:9150; HMDB0005007; HMDB0030365; HMDB05007; HMDB14779; HMDB30365	C25H38O5	-H(-)	100
1014	417,3002399	10042,30166	11''-Carboxy-alpha-chromanol	C15221; HMDB0012515; HMDB0039317; HMDB12515; HMDB39317	C26H42O4	-H(-)	100
1015	419,11976	3962,023628	Secogaliosi	C11674	C17H24O1	-H(-)	100

	64		de		2		
1016	420,1565695	2772,064793	Topotecan	C11158; CHEBI:63632; HMDB0015164; HMDB15164	C23H23N3O5	-H(-)	100
1017	421,2256148	7350,063539	2-Methylacetophenone	C07874; HMDB0032386; HMDB32386	C20H38O7S	-H(-)	100
1018	422,0132783	5425,663444	5-Amino-4-hydroxy-3-(phenylazo)-2,7-naphthalene disulfonic acid	HMDB0033381; HMDB33381	C16H13N3O7S2	-H(-)	90
1019	422,0476309	3378,960375	Cephapirin	C06896; CHEBI:554446; CHEBI:742992; HMDB0015270; HMDB0030451; HMDB15270; HMDB30451	C17H17N3O6S2	-H(-)	100
1020	423,0613668	5750,957867	Cefuroxime	C06894; CHEBI:3515; HMDB0015244; HMDB15244	C16H16N4O8S	-H(-)	100
1021	423,27469	5073,981193	1b-	C17651; HMDB0000307; HMDB0000311;	C24H40O6	-H(-)	100

	64		Hydroxycholic acid	HMDB0000316; HMDB0000340; HMDB0000367; HMDB0000377; HMDB0000399; HMDB0000433; HMDB0000437; HMDB0013158; HMDB0013192; HMDB00307; HMDB00311; HMDB00316; HMDB00340; HMDB00342; HMDB00367; HMDB00377; HMDB00399; HMDB00433; HMDB00437; HMDB13158; HMDB13192			
1022	426,0221507	5429,908453	ADP	C00008; C00054; C00361; C03850; CHEBI:16761; CHEBI:17985; CHEBI:28862; HMDB0000061; HMDB0000960; HMDB0001341; HMDB00061; HMDB00960; HMDB01341; HMDB01468	C10H15N5O10P2	-H(-)	100
1023	427,2251722	48416,61114	Irbesartan	C07469; CHEBI:5959; HMDB0015163; HMDB15163	C25H28N6O	-H(-)	100
1024	428,0434324	3790,297733	CI Acid Orange 3	C19370	C18H13N4O7S.	-H(-)	100
1025	428,9697868	6032,103206	DNDS	C13706	C14H10N2O10S2	-H(-)	100
1026	429,3733312	99758,16223	Alpha-Tocopherol	C02477; C04814; CHEBI:18145; CHEBI:87045; HMDB0001893; HMDB0012171; HMDB0030022;	C29H50O2	-H(-)	100

				HMDB0059642; HMDB0062391; HMDB01893; HMDB12171; HMDB30022; HMDB59642; HMDB62391			
1027	431,084343	4308,912595	17-Beta-Estradiol-3,17-beta-sulfate	HMDB0041620; HMDB41620	C18H24O8S2	-H(-)	100
1028	431,3156853	16482,93101	24-Hydroxycalcitriol	C08899; C16494; C17003; C17335; C18231; CHEBI:47799; CHEBI:47803; CHEBI:48714; CHEBI:48833; CHEBI:72727; CHEBI:81015; CHEBI:90970; HMDB0006228; HMDB0012454; HMDB0030702; HMDB0033769; HMDB0060134; HMDB0062211; HMDB0062399; HMDB0062400; HMDB0062686; HMDB0062712; HMDB06228; HMDB12454; HMDB30702; HMDB33769; HMDB60134; HMDB62211; HMDB62399; HMDB62400; HMDB62686; HMDB62712	C27H44O4	-H(-)	100
1029	431,9863316	6645,266719	Quinoline yellow	HMDB0037615; HMDB37615	C18H11NO8S2	-H(-)	100

1030	432,12977 37	3758,679413	Dihydrozeati n riboside monophosp hate; Tolmetin glucuronide	C16445; HMDB0042044; HMDB42044	C15H24N5 O8P; C21H23N O9	-H(-); -H(-)	100
1031	432,21923 89	5065,588798	Hericenone B	C20554; HMDB0036548; HMDB36548	C27H31N O4	-H(-)	72
1032	432,25106 62	3462,415846	N-Formyl-norleucyl-leucyl-phenylalanyl-methylester	C11298	C23H35N3 O5	-H(-)	100
1033	433,15008 9	4437,313878	Vestitone 7-glucoside	C09401; C09469; HMDB0033012; HMDB33012	C22H26O9	-H(-)	100
1034	434,04474 91	7241,386691	Aztreonam	C06840; CHEBI:161680; HMDB0014499; HMDB14499	C13H17N5 O8S2	-H(-)	100
1035	434,21955 81	7092,145971	Valsartan	CHEBI:9927; HMDB0014323; HMDB14323	C24H29N5 O3	-H(-)	100

1036	435,3259297	11469,61298	Demethylphylloquinone	C13309; HMDB0004649; HMDB0030395; HMDB0035983; HMDB04649; HMDB30395; HMDB35983	C30H44O2	-H(-)	100
1037	436,1067543	3565,331903	N-[2-(3,4-dimethoxyphenyl)ethyl]-3-[4-methoxy-3-(sulfooxy)phenyl]prop-2-eni...	HMDB0135494; HMDB0135496; HMDB0135498; HMDB0135500	C20H23NO8S	-H(-)	100
1038	436,1902649	3558,655818	FMLP	C11596	C21H31N3O5S	-H(-)	100
1039	439,1526957	13266,96182	Candesartan	C07468; CHEBI:3347; HMDB0014934; HMDB14934	C24H20N6O3	-H(-)	100
1040	439,2843326	3961,186938	13''-Carboxy-gamma-tocotrienol	HMDB0012558; HMDB0034349; HMDB0040748; HMDB0040764; HMDB12558; HMDB34349; HMDB40748; HMDB40764	C28H40O4	-H(-)	92

1041	440,1555907	4658,936823	Mandelonitrile rutinoside	HMDB0032803; HMDB32803	C20H27NO10	-H(-)	100
1042	441,1306454	4266,430399	Methacycline	C03206; C07654; C08029; HMDB0015066; HMDB15066	C22H22N2O8	-H(-)	100
1043	441,1585008	8923,483304	Cortisol 21-sulfate	C02822; CHEBI:16473; HMDB0062779; HMDB62779	C21H30O8S	-H(-)	100
1044	441,2754242	6208,727309	Bufencarb	C18948	(C13H19NO2)2	-H(-)	100
1045	442,1617513	3625,78818	Thiothixene	CHEBI:309829; HMDB0015560; HMDB15560	C23H29N3O2S2	-H(-)	87
1046	442,9827581	6462,968188	6-Mercaptopurine ribonucleoside 5''-diphosphate	C16616; HMDB0060660; HMDB60660	C10H14N4O10P2S	-H(-)	100
1047	443,1088077	3845,964401	4-Hydroxyphenytoin	HMDB0060769; HMDB60769	C21H20N2O9	-H(-)	100

			glucuronide				
1048	443,1460032	5280,273578	Doxycycline	C06570; C06973; CHEBI:27902; CHEBI:50845; HMDB0014399; HMDB0014897; HMDB14399; HMDB14897	C22H24N2O8	-H(-)	100
1049	443,2563349	4625,909355	3-(O-Geranylgeranyl)-sn-glycerol 1-phosphate	C04590	C23H41O6P	-H(-)	100
1050	445,1514945	3375,135676	Osmanthuside A	HMDB0038748; HMDB38748	C23H26O9	-H(-)	87
1051	445,2346642	5897,38357	SR 49498	C11602; HMDB0013845; HMDB13845	C25H30N6O2	-H(-)	88
1052	445,2970824	8213,734949	Carpipramine maleate	C12896	C28H38N4O.	-H(-)	100
1053	446,2329532	3577,223202	S-Decyl GSH	C11303	C20H37N3O6S	-H(-)	100
1054	447,3114512	11678,18708	Porrigenin A	C08890; C08896; C16495; HMDB0032783; HMDB0034293; HMDB32783; HMDB34293	C27H44O5	-H(-)	100

1055	448,2776159	5513,057088	Gentamicin C1a	C00908	C19H39N5O7	-H(-)	100
1056	448,3074199	90442,52649	Deoxycholic acid glycine conjugate	C05462; C05464; C05466; CHEBI:27471; CHEBI:542261; HMDB0000631; HMDB0000637; HMDB0000708; HMDB0006898; HMDB00631; HMDB00637; HMDB00708; HMDB04012; HMDB04013; HMDB06898	C26H43NO5	-H(-)	100
1057	450,3126425	8145,441259	Teleocidin B-1	C05150	C28H41N3O2	-H(-)	100
1058	451,0700033	7372,274286	Torvanol A	HMDB0038789; HMDB0125974; HMDB38789	C20H20O10S	-H(-)	100
1059	451,1466549	4008,961164	5alpha-Androstan-3alpha,17beta-diol disulfate	CHEBI:133101; HMDB0094682; HMDB94682	C19H32O8S2	-H(-)	100
1060	451,1977006	4811,654278	8-Butanoylneosolaniol	HMDB0038560; HMDB0038561; HMDB38560; HMDB38561	C23H32O9	-H(-)	100

1061	452,1545518	3314,488342	Endoxifen sulfate	HMDB0061140; HMDB61140	C25H27NO5S	-H(-)	100
1062	452,2108418	3825,705015	20-Oxo-leukotriene E4	HMDB0012642; HMDB12642	C23H35NO6S	-H(-)	100
1063	452,243381	4146,208738	Terpendole I	C20543	C27H35NO5	-H(-)	100
1064	452,2774028	31631,73363	LysoPE(0:0/16:0)	CHEBI:131743; CHEBI:73004; HMDB0011473; HMDB0011503; HMDB11473; HMDB11503	C21H44NO7P	-H(-)	100
1065	455,1881218	4088,542452	Delavirdine	C06941; C08087; CHEBI:119573; HMDB0014843; HMDB14843	C22H28N6O3S	-H(-)	94
1066	455,2463518	8258,156963	Sulfolithocholic acid	CHEBI:35421; HMDB0000907; HMDB00907	C24H40O6S	-H(-)	100
1067	455,3162509	4883,408921	Callystatin A	C16891	C29H44O4	-H(-)	100
1068	457,135655	5681,569406	2''-(E)-Feruloyl-3-(arabinosylxylose); 12-	HMDB0030230; HMDB0037088; HMDB0041336; HMDB0060705; HMDB0060720; HMDB0060743; HMDB0061130; HMDB0125488; HMDB0125489; HMDB0125490; HMDB0125496; HMDB0125497;	C20H26O12; C21H22N4O8	-H(-); -H(-)	100

			Hydroxynevirapine glucuronide	HMDB0125498; HMDB0125499; HMDB0125500; HMDB0125501; HMDB0125502; HMDB0125504; HMDB0125505; HMDB0125506; HMDB30230; HMDB37088; HMDB41336; HMDB60705; HMDB60720; HMDB60743; HMDB61130			
1069	457,1709929	3849,302901	Gein	C17058; HMDB0029909; HMDB0037108; HMDB0037603; HMDB0039852; HMDB29909; HMDB37108; HMDB37603; HMDB39852	C21H30O11	-H(-)	100
1070	457,1989812	4496,35548	2-Hydroxy-desipramine glucuronide	HMDB0060716; HMDB60716	C24H30N2O7	-H(-)	100
1071	457,3312775	5548,57369	(3beta,5alpha,9alpha,22E,24R)-3,5,9-Trihydroxy-23-methylergosta-7,22-	HMDB0032669; HMDB0035142; HMDB0035995; HMDB32669; HMDB35142; HMDB35995	C29H46O4	-H(-)	92

			dien-6...				
1072	459,2023773	3974,466364	Aspidin	C10672; C10704; C15429; C20206	C25H32O8	-H(-)	100
1073	461,1664944	3459,149405	Verbasoside	HMDB0039233; HMDB39233	C20H30O12	-H(-)	100
1074	461,2183088	4359,226078	6-Dehydrotestosterone glucuronide	C03033; C12888; CHEBI:32709; HMDB0010337; HMDB10337	C25H34O8	-H(-)	100
1075	461,2662285	6664,557255	1-(11Z,14Z-eicosadienoyl)-glycero-3-phosphate	HMDB0062303; HMDB0114758; HMDB62303	C23H43O7P	-H(-)	81
1076	462,1157528	3723,956464	Peonidin-3-glucoside	C12141; CHEBI:1250938; HMDB0013689; HMDB0041751; HMDB0041752; HMDB0125113; HMDB0125116; HMDB0127935; HMDB13689; HMDB41751; HMDB41752	C22H23O11	-H(-)	99
1077	462,9983862	13190,7715	Carumonam sodium	C13016	C12H12N6O10S2.	-H(-)	100

1078	463,1796576	5405,186478	Eremopetasitenin B2	HMDB0030901; HMDB0041532; HMDB30901; HMDB41532	C24H32O7S	-H(-)	100
1079	464,2188377	3475,183939	Codonocarpine	C10582	C26H31N3O5	-H(-)	100
1080	464,3014292	27670,28253	Cholylglycine	C01921; CHEBI:29746; CHEBI:36273; HMDB0000138; HMDB0000331; HMDB00138; HMDB0032596; HMDB00331; HMDB32596	C26H43NO6	-H(-)	100
1081	465,2487847	9887,179703	Androsterone glucuronide	C11135; C11136; CHEBI:28832; CHEBI:37451; CHEBI:89417; HMDB0002829; HMDB0004484; HMDB0006203; HMDB0010365; HMDB02829; HMDB04484; HMDB06203; HMDB10365	C25H38O8	-H(-)	100
1082	465,3036323	115720,5092	Cholesterol sulfate	C18043; CHEBI:41321; HMDB0000653; HMDB00653	C27H46O4S	-H(-)	100
1083	466,2525598	5005,918563	Tobramycin	C00397; CHEBI:28864; HMDB0014822; HMDB14822	C18H37N5O9	-H(-)	100
1084	466,3066286	38053,01529	Tiropramide	C12552; HMDB0042042; HMDB42042	C28H41N3O3	-H(-)	100
1085	467,1928722	11893,43001	Paucin	C09525	C23H32O10	-H(-)	100

1086	467,2638632	5087,847995	3,17-Androstanediol glucuronide	HMDB0010321; HMDB0010339; HMDB0010359; HMDB10321; HMDB10339; HMDB10359	C25H40O8	-H(-)	75
1087	469,282769	4145,820273	Ceanothine C	HMDB0029340; HMDB29340	C26H38N4O4	-H(-)	100
1088	471,0936337	7533,529644	(-)-Epigallocatechin 3-(3-methyl-gallate)	C06801; HMDB0038363; HMDB0040293; HMDB38363; HMDB40293	C23H20O11	-H(-)	100
1089	471,1720677	4009,351779	alpha-L-Rhamnopyranosyl-(1->3)-alpha-D-galactopyranosyl-(1->3)-L-	HMDB0039741; HMDB0127459; HMDB39741	C18H32O14	-H(-)	100

			fucose				
1090	471,2129713	4323,2455	2-Hydroxy-imipramine glucuronide	HMDB0060717; HMDB60717	C25H32N2O7	-H(-)	100
1091	471,3106567	5584,426975	(3beta,17alpha,23R)-17,23-Epoxy-3,29-dihydroxy-27-norlanost-8-ene-15,24-dione	HMDB0035112; HMDB0035624; HMDB0035843; HMDB35112; HMDB35624; HMDB35843	C29H44O5	-H(-)	100
1092	471,3479927	12369,55836	Maslinic acid	C08808; C08942; C16912; C16939; C17067; C17070; C17460; CHEBI:66682; HMDB0002392; HMDB0033233; HMDB0034523; HMDB0034530; HMDB0034567; HMDB0035106; HMDB0035107; HMDB0035258; HMDB0035260; HMDB0035748; HMDB0035758; HMDB0035962; HMDB0035977;	C30H48O4	-H(-)	100

				HMDB0036001; HMDB0036063; HMDB0036064; HMDB0036638; HMDB0036654; HMDB0037779; HMDB0041043; HMDB02392; HMDB33233; HMDB34523; HMDB34530; HMDB34567; HMDB35106; HMDB35107; HMDB35258; HMDB35260; HMDB35748; HMDB35758; HMDB35962; HMDB35977; HMDB36001; HMDB36063; HMDB36064; HMDB36638; HMDB36654; HMDB37779; HMDB41043			
1093	473,2180726	4687,158871	Austalide B	C10671; C17049; HMDB0030004; HMDB30004	C26H34O8	-H(-)	100
1094	473,3262634	8582,363593	(3beta,17alpha,23S,24S)-17,23-Epoxy-3,24,29-trihydroxy-27-norlanost-8-	HMDB0035144; HMDB0035221; HMDB35144; HMDB35221	C29H46O5	-H(-)	100

			en-15...				
1095	474,0561822	4599,462334	Chondroitin 4-sulfate	C00634; CHEBI:37397; HMDB0000652; HMDB00652	C14H21NO15S	-H(-)	100
1096	474,1912361	3640,817737	OA-6129 D	C17375	C20H33N3O8S	-H(-)	100
1097	475,0894098	5909,098739	Diosmetin 7-O-beta-D-glucuronopyranoside	HMDB0037452; HMDB0124901; HMDB0124902; HMDB0124903; HMDB0126583; HMDB0126584; HMDB0126585; HMDB0127503; HMDB0127504; HMDB0127505; HMDB0128594; HMDB0128595; HMDB0128596; HMDB0128603; HMDB0128604; HMDB0128605; HMDB0129969; HMDB0130184; HMDB0130185; HMDB0133322; HMDB0133323; HMDB0133324; HMDB0133331; HMDB0133332; HMDB0133333; HMDB0133336; HMDB0133337; HMDB0133338; HMDB0133339; HMDB0133340; HMDB0133831; HMDB0133832; HMDB0133833; HMDB0137318; HMDB37452	C22H20O12	-H(-)	71
1098	475,3432221	7956,159271	Homodolichosterone	HMDB0034079; HMDB0039443; HMDB34079; HMDB39443	C29H48O5	-H(-)	100

1099	476,2467211	4049,431179	Epothilone C	C15694	C26H39NO5S	-H(-)	100
1100	476,2777089	36940,9863	LysoPE(0:0/18:2(9Z,12Z))	CHEBI:76090; CHEBI:83058; HMDB0011477; HMDB0011507; HMDB11477; HMDB11507	C23H44NO7P	-H(-)	100
1101	477,1028449	5369,641952	Isorhamnetin 7-glucoside	CHEBI:581221; HMDB0029479; HMDB0030548; HMDB0030805; HMDB0033650; HMDB0036120; HMDB0037332; HMDB0037360; HMDB0039190; HMDB0039211; HMDB0039338; HMDB0040509; HMDB0040510; HMDB0041743; HMDB0041745; HMDB0126054; HMDB0126055; HMDB0126056; HMDB0126057; HMDB0126140; HMDB0126573; HMDB0126590; HMDB0126591; HMDB0126596; HMDB0126597; HMDB0127510; HMDB0127511; HMDB0127513; HMDB0127514; HMDB0128063; HMDB0128064; HMDB0128065; HMDB0128066; HMDB0128067; HMDB0128068; HMDB0128549; HMDB0128597; HMDB0128598; HMDB0128599; HMDB0129310; HMDB0129320; HMDB0129425;	C22H22O12	-H(-)	99

				HMDB0129989; HMDB0129990; HMDB0129991; HMDB0130192; HMDB0130193; HMDB0130194; HMDB0130195; HMDB0130196; HMDB0130197; HMDB0133822; HMDB0133842; HMDB0133844; HMDB0137325; HMDB29479; HMDB30548; HMDB30805; HMDB33650; HMDB36120; HMDB37332; HMDB37360; HMDB39190; HMDB39211; HMDB39338; HMDB40509; HMDB40510; HMDB41743; HMDB41745			
1102	478,1981613	5058,188805	Nicardipine	C07264; CHEBI:507549; HMDB0014760; HMDB14760	C26H29N3O6	-H(-)	100
1103	478,2343979	4779,654075	Fumitremorgin B	C20630; HMDB0030203; HMDB30203	C27H33N3O5	-H(-)	100
1104	478,2930468	36124,95943	LysoPE(0:0/18:1(11Z))	CHEBI:74971; CHEBI:76088; HMDB0011475; HMDB0011476; HMDB0011505; HMDB0011506; HMDB11475; HMDB11476; HMDB11505; HMDB11506	C23H46NO7P	-H(-)	100
1105	480,1255105	6221,325363	Cefepime hydrochlorid	C12557	C19H25N6O5S2.	-H(-)	100

			e				
1106	480,3089967	397698,2209	LysoPC(15:0)	C04230; CHEBI:133144; CHEBI:580912; CHEBI:75036; HMDB0010381; HMDB0011129; HMDB0011130; HMDB10381; HMDB11129; HMDB11130	C23H48NO7P	-H(-)	100
1107	481,2433335	10306,44827	11-beta-Hydroxyandrosterone-3-glucuronide	HMDB0010351; HMDB10351	C25H38O9	-H(-)	100
1108	481,2801583	12594,39598	FusicoccinH	C09093	C26H42O8	-H(-)	100
1109	483,1767243	4965,059345	Nb-trans-p-Coumaroylserotonin glucoside	HMDB0032760; HMDB32760	C25H28N2O8	-H(-)	100
1110	483,2317064	3880,901871	Kanamycin	C01822; C01823; C08046; CHEBI:17630; HMDB0015303; HMDB15303	C18H36N4O11	-H(-)	100
1111	483,3302098	8584,099097	N-tert-Butyloxycar	C11604	C23H44N6O5	-H(-)	100

			bonyl-deacetyl-leupeptin				
1112	484,2157671	3289,327636	6-O-Glc-paromamine	C17999; C20614	C18H35N3O12	-H(-)	100
1113	487,1543939	3555,104755	Dracorubin	C09726	C32H24O5	-H(-)	100
1114	487,2552574	3991,338132	alpha-Ionol O-[arabinosyl-(1->6)-glucoside]	HMDB0038732; HMDB38732	C24H40O10	-H(-)	100
1115	489,1756412	6078,583142	3,4,5-trihydroxy-6-({2-[6-(2-methylbut-3-en-2-yl)-7-oxo-2H,3H,7H-	HMDB0130297	C25H30O10	-H(-)	100

			furo[3,2-g...				
1116	489,197186	4046,629545	Cymorcin diglucoside	HMDB0039386; HMDB39386	C22H34O12	-H(-)	100
1117	489,468825	3472,896495	Lumequoylacetone	HMDB0035956; HMDB35956	C33H62O2	-H(-)	82
1118	491,119936	3604,781441	Tricin 7-glucoside	C10303; HMDB0030553; HMDB0035448; HMDB0037578; HMDB0038825; HMDB0039336; HMDB0040479; HMDB0128567; HMDB0128612; HMDB0128613; HMDB0128614; HMDB30553; HMDB35448; HMDB37578; HMDB38825; HMDB39336; HMDB40479	C23H24O12	-H(-)	100
1119	491,245247	4589,853257	Roxburghine B	C09237	C31H32N4O2	-H(-)	100
1120	491,337842	7458,443278	Homodolicholide	HMDB0033907; HMDB33907	C29H48O6	-H(-)	100
1121	491,483691	4698,608242	10,12-Tritriacontanedione	C08394; HMDB0035578; HMDB35578	C33H64O2	-H(-)	100
1122	492,08946	3887,586041	MK826	C12017	C21H23N3	-H(-)	100

	32				O7S2		
1123	495,1508731	5100,493228	Musabalbisiane A	C20383; CHEBI:64689; HMDB0038680; HMDB0039026; HMDB0039069; HMDB0039070; HMDB0060491; HMDB0060634; HMDB0130138; HMDB0130140; HMDB0130142; HMDB0130144; HMDB38680; HMDB39026; HMDB39069; HMDB39070; HMDB60491; HMDB60634	C23H28O12	-H(-)	100
1124	497,0568108	6325,587848	7,8,8,12,13,21,22-heptahydroxy-19-(hydroxymethyl)-2,17,20,23-tetraoxapentac...	HMDB0126631; HMDB0128326; HMDB0128327; HMDB0128328; HMDB0128329; HMDB0128330	C20H18O15	-H(-)	100
1125	498,2894742	29447,27708	Tauroursodeoxycholic acid	C05463; C05465; C16868; CHEBI:16525; CHEBI:9410; HMDB0000874; HMDB0000896; HMDB0000951; HMDB00874; HMDB00896;	C26H45NO6S	-H(-)	100

				HMDB00951; HMDB04011			
1126	500,2779843	33892,75843	LysoPE(0:0/20:4(5Z,8Z,11Z,14Z))	CHEBI:64395; CHEBI:72741; CHEBI:72742; CHEBI:72746; HMDB0011487; HMDB0011488; HMDB0011517; HMDB0011518; HMDB11487; HMDB11488; HMDB11517; HMDB11518	C25H44NO7P	-H(-)	100
1127	501,1032833	6642,999493	6""-O-Malonyldaidzin	C16191; HMDB0041263; HMDB0128883; HMDB0128896; HMDB0129388; HMDB0129389; HMDB0129390; HMDB41263	C24H22O12	-H(-)	100
1128	501,3228707	7356,275929	Medicagenic acid	HMDB0034551; HMDB0034639; HMDB0034704; HMDB0034705; HMDB0035751; HMDB34551; HMDB34639; HMDB34704; HMDB34705; HMDB35751	C30H46O6	-H(-)	100
1129	503,1607966	4410,175223	Triose	C00420; C00492; C00713; C00721; C00883; C01355; C01835; C02160; C03367; C03661; C03848; C05404; C06219; C07283; C08239; C08243; C08251; CHEBI:16885; CHEBI:27931; CHEBI:28782; CHEBI:397485; CHEBI:61771; CHEBI:6731; CHEBI:7912; CHEBI:9859; HMDB0001262; HMDB0003213; HMDB0003539;	C18H32O16	-H(-)	100

				HMDB0006599; HMDB0006857; HMDB0011729; HMDB0011730; HMDB0029910; HMDB0029921; HMDB0029922; HMDB0029929; HMDB0029930; HMDB0029937; HMDB0033673; HMDB0033748; HMDB0034072; HMDB0035322; HMDB0038851; HMDB0038852; HMDB0038853; HMDB0039703; HMDB0039704; HMDB0039706; HMDB0039707; HMDB0039708; HMDB0040181; HMDB0040984; HMDB0041948; HMDB0060468; HMDB01262; HMDB03213; HMDB03539; HMDB06599; HMDB06857; HMDB11729; HMDB11730; HMDB29910; HMDB29921; HMDB29922; HMDB29929; HMDB29930; HMDB29937; HMDB33673; HMDB33748; HMDB34072; HMDB35322; HMDB38851; HMDB38852; HMDB38853; HMDB39703; HMDB39704; HMDB39706; HMDB39707; HMDB39708; HMDB40181; HMDB40984; HMDB41948; HMDB60468			

1130	503,1919088	3828,194854	Myricatomentoside I	HMDB0031536; HMDB31536	C26H32O10	-H(-)	100
1131	503,3379421	9290,216789	Protobassic acid	HMDB0034500; HMDB0034501; HMDB0034518; HMDB0035487; HMDB0035875; HMDB0035948; HMDB0036670; HMDB0040772; HMDB0040784; HMDB34500; HMDB34501; HMDB34518; HMDB35487; HMDB35875; HMDB35948; HMDB36670; HMDB40772; HMDB40784	C30H48O6	-H(-)	100
1132	507,0560529	4903,493344	Griseorhodin A	C12048	C25H16O12	-H(-)	100
1133	507,0744472	3891,247058	1,4-Dimethoxyglucobrassicin	HMDB0036986; HMDB36986	C18H24N2O11S2	-H(-)	100
1134	508,1372934	3091,878993	NIK250	C11212	C26H27N3O4S2	-H(-)	100
1135	510,0801798	4811,349432	trans-Zeatin riboside diphosphate	C16429	C15H23N5O11P2	-H(-)	100
1136	510,16210	3530,006325	Hygromycin	C17579	C23H29N	-H(-)	100

	85		A		O12		
1137	510,2522643	11209,73465	Sulfoglycolithocholate(2-)	CHEBI:60007; HMDB0062801; HMDB62801	C26H41NO7S	-H(-)	100
1138	510,2854845	5380,320384	Cytochalasin Ppho	HMDB0035368; HMDB35368	C30H41NO6	-H(-)	100
1139	512,197901	3497,704686	ValidamycinB	HMDB0036593; HMDB36593	C20H35NO14	-H(-)	100
1140	512,2260872	3525,546716	N-Acetylpuromycin	C07032	C24H31N7O6	-H(-)	100
1141	512,2681127	8331,618287	Sulfolithocholylglycine	C11301; HMDB0002639; HMDB02639	C26H43NO7S	-H(-)	100
1142	514,1714141	3010,403556	13-Dihydrocarminomycin	C12431	C26H29NO10	-H(-)	100
1143	514,2840051	14076,48635	Taurocholic acid	C05122; C15516; CHEBI:28865; HMDB0000036; HMDB0000889; HMDB0000922; HMDB0000932; HMDB00036; HMDB0011637; HMDB00889;	C26H45NO7S	-H(-)	100

				HMDB00922; HMDB00932; HMDB11637			
1144	516,0975276	35381,3956	4beta-(2-Aminoethylthio)epicatechin 3-gallate	HMDB0037478; HMDB37478	C24H23NO10S	-H(-)	100
1145	516,1555907	31171,2628	Piperacillin	C14034; CHEBI:8232; HMDB0014464; HMDB14464	C23H27N5O7S	-H(-)	100
1146	517,1766568	6134,14967	Ciceritol	HMDB0032777; HMDB32777	C19H34O16	-H(-)	100
1147	518,1660563	4870,972779	Gravacridonetriol glucoside	HMDB0029331; HMDB29331	C25H29NO11	-H(-)	100
1148	519,1880638	4719,350912	(7''S,8''S)-4,7''-Epoxy-3,8''-bilign-7-ene-3'',5-dimethoxy-4'',9,9''-triol ...	C08754; C17529; HMDB0040636; HMDB40636	C26H32O11	-H(-)	100

1149	519,2237713	5907,11237	Myricanol 5-glucoside	HMDB0036525; HMDB0038143; HMDB36525; HMDB38143	C27H36O10	-H(-)	100
1150	519,2592703	5078,28081	Withaperuvin D	C20153; HMDB0030116; HMDB0034191; HMDB0060141; HMDB30116; HMDB34191; HMDB60141	C28H40O9	-H(-)	100
1151	519,3846182	13106,00623	Ginsenoyne A linoleate	HMDB0041203; HMDB41203	C35H52O3	-H(-)	100
1152	521,9842983	7555,005514	GTP	C00044; C19967; CHEBI:15996; HMDB0001273; HMDB0011615; HMDB01273; HMDB11615	C10H16N5O14P3	-H(-)	100
1153	523,2183725	5942,569462	Mascarosside	C09132; HMDB0035603; HMDB0036903; HMDB0037083; HMDB35603; HMDB36903; HMDB37083	C26H36O11	-H(-)	100
1154	524,097053	3751,718679	Cefotiam	CHEBI:355510; HMDB0014374; HMDB14374	C18H23N9O4S3	-H(-)	100
1155	524,2776712	28794,60208	LysoPE(0:0/22:6(4Z,7Z,10Z,13Z,16Z,19Z))	CHEBI:72747; CHEBI:72749; HMDB0011496; HMDB0011526; HMDB11496; HMDB11526	C27H44NO7P	-H(-)	100
1156	526,17883	3441,529236	4-O-(beta-L-	C20705	C20H33N	-H(-)	86

	13		Arabinofuranosyl-(1->2)-beta-L-arabinofuranosyl-(1->2)-beta-L-a...		O15		
1157	527,2130236	8325,208595	16,17-Dihydro-16a,17-dihydroxygibberellin A4 17-glucoside	HMDB0040647; HMDB40647	C25H36O12	-H(-)	100
1158	528,26345	13668,49028	N-[(3a,5b,7b)-7-hydroxy-24-oxo-3-(sulfooxy)ch	C15559; CHEBI:52031; CHEBI:72733; HMDB0002409; HMDB0002496; HMDB0002497; HMDB02409; HMDB02496; HMDB02497	C26H43NO8S	-H(-)	100

			olan-24-yl]-Glycine				
1159	530,1960999	4407,025558	2-amino-4-({1-[(carboxymethyl)-C-hydroxycarbonimidoyl]-2-[(1-hydroxy-2,4-di...	HMDB0135577	C26H33N3O7S	-H(-)	100
1160	533,2762241	5207,237818	Corchoroside A	C08869; C17525; HMDB0033846; HMDB33846	C29H42O9	-H(-)	100
1161	534,087791	5608,026195	Lipoyl-AMP	C16238; CHEBI:55451; HMDB0059635; HMDB59635	C18H26N5O8PS2	-H(-)	100
1162	535,3395648	28435,42224	PA(8:0/16:0)	HMDB0115487; HMDB0115613; HMDB0115689; HMDB0115781	C27H53O8P	-H(-)	100
1163	535,3764931	10693,98949	LPA(a-25:0/0:0)	HMDB0114762	C28H57O7P	-H(-)	100

1164	535,4363947	11239,7575	DG(14:1(9Z)/16:1(9Z)/0:0)	HMDB0007041; HMDB0007125; HMDB0056135; HMDB07041; HMDB07125; HMDB56135	C33H60O5	-H(-)	100
1165	536,0988616	5949,056564	Dynemicin A	C11471	C30H19NO9	-H(-)	100
1166	536,1767056	4575,357452	4-Demethylsimmondsin 2''-(E)-ferulate	HMDB0034773; HMDB0034774; HMDB34773; HMDB34774	C25H31NO12	-H(-)	100
1167	537,08976	14830,60628	6-{[3,7-dihydroxy-2-(1-hydroxy-3-methoxy-4-oxocyclohexa-2,5-dien-1-yl)-6-me...	HMDB0128780; HMDB0128781; HMDB0128782	C23H22O15	-H(-)	76
1168	539,24926	15806,98438	Tetrahydroa	HMDB0010357; HMDB10357	C27H40O1	-H(-)	100

	54		ldosterone-3-glucuronide		1		
1169	539,9941212	5327,982674	Formamidopyrimidine nucleoside triphosphate	C05922; CHEBI:58104; HMDB0006822; HMDB06822	C10H18N5O15P3	-H(-)	100
1170	540,3173635	6067,308764	Novapikromyin	C20740	C28H47NO9	-H(-)	100
1171	541,1357794	6124,947014	Resveratrol 4''-(6-galloylglucoside)	HMDB0034687; HMDB0039341; HMDB0135726; HMDB0135727; HMDB0135730; HMDB0135731; HMDB0135732; HMDB0135735; HMDB34687; HMDB39341	C27H26O12	-H(-)	100
1172	541,2075551	6620,883499	Italidipyrone	HMDB0041308; HMDB41308	C29H34O10	-H(-)	100
1173	541,2647795	22964,50212	Cortolone-3-glucuronide	HMDB0010320; HMDB10320	C27H42O11	-H(-)	100
1174	542,2024487	3977,375053	beta-Rhodomycin	C18642	C28H33NO10	-H(-)	100

1175	544,2580869	4353,492252	N-[(3a,5b,7a,12a)-3,12-dihydroxy-24-oxo-7-(sulfooxy)cholan-24-yl]-Glycine	HMDB0002640; HMDB0002644; HMDB02640; HMDB02644	C26H43NO9S	-H(-)	100
1176	545,0443176	6625,182711	Orange B	HMDB0037522; HMDB37522	C22H18N4O9S2	-H(-)	100
1177	545,1442465	5831,408692	8-[3,7-dihydroxy-2-(3-hydroxyphenyl)-3,4-dihydro-2H-1-benzopyran-4-yl]-2-(3...	C01863; C10209; C10231; HMDB0135061; HMDB0135062	C30H26O10	-H(-)	89

1178	548,1332676	3668,904124	o-O-glucuronide rosiglitazone	HMDB0060857; HMDB0060862; HMDB60857; HMDB60862	C24H27N3O10S	-H(-)	76
1179	550,0983251	4561,661566	11-O-Demethylpradimicinone II	C06778	C27H21NO12	-H(-)	100
1180	550,2455091	9005,752886	Endoxifen O-glucuronide	HMDB0060622; HMDB60622	C31H37NO8	-H(-)	100
1181	551,0974102	9022,090102	Bilobetin	CHEBI:449099; HMDB0030833; HMDB30833	C31H20O10	-H(-)	100
1182	551,2664514	4782,837379	Canthiumine	C10000	C33H36N4O4	-H(-)	100
1183	551,3037603	6328,92692	Arbekacin	CHEBI:37922; HMDB0015642; HMDB15642	C22H44N6O10	-H(-)	100
1184	552,1319505	5074,726477	OA-6129 C	C20814	C20H31N3O11S2	-H(-)	100

1185	553,2826378	5030,489785	Integerressine	C10006	C33H38N4O4	-H(-)	100
1186	553,4422224	9216,28086	1'-Hydroxy-gamma-carotene	C15859; C15898; C19795	C40H58O	-H(-)	100
1187	555,1718225	5124,640943	Cassitorosidе	C11668; C11669; HMDB0041289; HMDB41289	C25H32O14	-H(-)	100
1188	555,2490297	4832,588421	Dipiperamide C	HMDB0039457; HMDB39457	C33H36N2O6	-H(-)	95
1189	555,4051224	6116,702349	Hericene A	HMDB0041179; HMDB41179	C35H56O5	-H(-)	100
1190	558,0639226	5512,371529	ADP-ribose	C00301; C01882; C02741; CHEBI:16960; HMDB0001178; HMDB0012276; HMDB01178; HMDB12276	C15H23N5O14P2	-H(-)	100
1191	559,2667724	5576,452354	Geldanamycin	C11222	C29H40N2O9	-H(-)	100
1192	561,0532675	8563,232647	DTDP-alpha-D-glucose(2-)	CHEBI:57477; HMDB0062805; HMDB62805	C16H24N2O16P2	-H(-)	100

1193	563,1044438	9955,604245	Isorhamnetin 3-(6''''-malonylglucoside)	HMDB0038820; HMDB38820	C25H24O15	-H(-)	100
1194	563,1559935	4360,760981	2-(3,4-dihydroxyphenyl)-8-[1-(2,4-dihydroxyphenyl)-3-(3,4-dihydroxyphenyl)-...	C02879; HMDB0135060	C30H28O11	-H(-)	100
1195	563,2856966	4832,409735	Musaroside	C08875; C08884	C30H44O10	-H(-)	100
1196	565,4058437	6286,128096	3''-Hydroxy-e,e-caroten-3-one	C08593; C15965; C15966; C19920; HMDB0002020; HMDB0003448; HMDB0037122; HMDB0040657; HMDB0040743; HMDB02020; HMDB03448; HMDB37122; HMDB40657; HMDB40743	C40H54O2	-H(-)	100

1197	566,3269252	5301,69876	Penitrem D	C20596	C37H45NO4	-H(-)	100
1198	569,3837727	4202,317906	Hericenone C	HMDB0039138; HMDB0039593; HMDB39138; HMDB39593	C35H54O6	-H(-)	100
1199	571,2879608	5974,664718	1-Palmitoylglycerophosphoinositol	CHEBI:73218; HMDB0061695; HMDB0062714; HMDB61695; HMDB62714	C25H49O12P	-H(-)	100
1200	571,3275224	4621,783102	6,8a-Seco-6,8a-deoxy-5-oxoavermectin "2b" aglycone	C11953	C33H48O8	-H(-)	100
1201	571,4740182	8312,024217	Dieporeticenin	HMDB0029792; HMDB29792	C37H64O4	-H(-)	100
1202	577,3688967	6956,133502	Anhydroamarouciaxanthin B	HMDB0036911; HMDB36911	C40H50O3	-H(-)	100

1203	578,1294295	6236,43039	7-Methoxypradimicinone II	C06781	C29H25NO12	-H(-)	100
1204	578,1771359	4395,003873	N-Acetyl-O-demethylpuromycin-5'-phosphate	C07030	C23H30N7O9P	-H(-)	100
1205	579,0789319	10956,85942	Epitheaflavic acid 3''-gallate	HMDB0040610; HMDB40610	C28H20O14	-H(-)	100
1206	579,2071112	4451,24794	(+)-7-epi-Syringaresinol 4''-glucoside	C10890; HMDB0038261; HMDB38261	C28H36O13	-H(-)	72
1207	580,2571109	4422,021802	Ergotamine	C07544; CHEBI:64318; HMDB0014834; HMDB14834	C33H35N5O5	-H(-)	100
1208	581,181254	5723,280508	Kuwanon Y	HMDB0033296; HMDB33296	C34H30O9	-H(-)	100

1209	582,2718328	4870,52168	Dihydroergotamine	C07798; CHEBI:4562; HMDB0014465; HMDB14465	C33H37N5O5	-H(-)	100
1210	583,1640966	7926,336597	{[8-(2,4-dihydroxyphenyl)-7-(3,7-dimethylocta-2,6-dien-1-yl)-5-hydroxy-2-me...	HMDB0129848; HMDB0129858	C30H32O10S	-H(-)	100
1211	583,2915089	18568,5169	Euphornin	C19991	C33H44O9	-H(-)	100
1212	584,1647338	4776,43462	SN38 glucuronide carboxylate form	C11375	C28H29N2O12	-H(-)	100
1213	585,3064921	5010,200835	5-Oxoavermectin "2b"	C11954	C33H46O9	-H(-)	100

			aglycone				
1214	587,2871628	6517,280508	D-Urobilin	C05795; C19704; HMDB0004161; HMDB04161	C33H40N4O6	-H(-)	100
1215	587,322385	4466,780555	Avermectin B2b aglycone	C11955	C33H48O9	-H(-)	100
1216	588,063034	6952,912346	UDP-2-acetamido-4-dehydro-2,6-dideoxyglucose	C04613; C19823	C17H25N3O16P2	-H(-)	100
1217	591,1366029	10407,61822	Apigenin 7-[rhamnosyl-(1->2)-galacturonide]	HMDB0038847; HMDB0041129; HMDB0041719; HMDB0127121; HMDB0127122; HMDB0127170; HMDB0127171; HMDB0127234; HMDB0127235; HMDB0127275; HMDB0127276; HMDB0127295; HMDB0127296; HMDB38847; HMDB41129; HMDB41719	C27H28O15	-H(-)	91
1218	591,31734	8074,453109	Debromoapl	C05148	C32H48O1	-H(-)	100

	02		ysiatoxin		0		
1219	592,1238662	5247,75907	2-amino-4-({1-[(carboxymethyl)-C-hydroxycarbonimidoyl]-2-({2,3,4,6-tetrahyd...	HMDB0126628	C25H27N3O12S	-H(-)	100
1220	592,2337309	4567,901111	4-Hydroxy-17beta-estradiol-2-S-glutathione	HMDB0060139; HMDB60139	C28H39N3O9S	-H(-)	100
1221	593,1378063	13386,58633	Sultamicillin tosilate	C13129	C25H30N4O9S2.	-H(-)	100
1222	593,3326761	9364,248595	13-Deoxytedanolide	C16861	C32H50O10	-H(-)	100

1223	594,2922118	5449,341184	Kni 102	C15654	C31H41N5O7	-H(-)	82
1224	595,1301655	12644,64508	Quercetin 3-arabinoside 7-glucoside	C12637; HMDB0037355; HMDB0037364; HMDB0037536; HMDB0040488; HMDB0126883; HMDB0132749; HMDB0132750; HMDB0132751; HMDB37355; HMDB37364; HMDB37536; HMDB40488	C26H28O16	-H(-)	100
1225	595,4934261	337972,8226	Glycerol triundecanoate	HMDB0031089; HMDB0071223; HMDB0071277; HMDB0071326; HMDB0071400; HMDB0071439; HMDB0071456; HMDB0071508; HMDB0071616; HMDB0071821; HMDB0071842; HMDB0071845; HMDB0071858; HMDB0071864; HMDB0071893; HMDB0071925; HMDB0071928; HMDB0071972; HMDB0072006; HMDB0072048; HMDB0072121; HMDB0072166; HMDB0072345; HMDB0072420; HMDB0072489; HMDB0072569; HMDB0072572; HMDB0072650; HMDB0072686; HMDB0072725; HMDB0072811; HMDB0094827; HMDB0094828; HMDB0094829; HMDB0094830; HMDB0094831;	C36H68O6	-H(-)	100

				HMDB0094832; HMDB0095052; HMDB0095053; HMDB0095054; HMDB0095055; HMDB0095056; HMDB0095057; HMDB0096565; HMDB0096566; HMDB0096567; HMDB0096568; HMDB0096569; HMDB0096570; HMDB0096652; HMDB0096653; HMDB0096654; HMDB0096739; HMDB0096740; HMDB0096741; HMDB0096742; HMDB0096743; HMDB0096744; HMDB0100887; HMDB0100888; HMDB0100889; HMDB0100974; HMDB0100975; HMDB0100976; HMDB0105194; HMDB0105195; HMDB0105196; HMDB31089; HMDB71223; HMDB71277; HMDB71326; HMDB71400; HMDB71439; HMDB71456; HMDB71508; HMDB71616; HMDB71821; HMDB71842; HMDB71845; HMDB71858; HMDB71864; HMDB71893; HMDB71925; HMDB71928; HMDB71972; HMDB72006; HMDB72048; HMDB72121; HMDB72166; HMDB72345; HMDB72420; HMDB72489; HMDB72569; HMDB72572; HMDB72650; HMDB72686;			

				HMDB72725; HMDB72811; HMDB94827; HMDB94828; HMDB94829; HMDB94830; HMDB94831; HMDB94832; HMDB95052; HMDB95053; HMDB95054; HMDB95055; HMDB95056; HMDB95057; HMDB96565; HMDB96566; HMDB96567; HMDB96568; HMDB96569; HMDB96570; HMDB96652; HMDB96653; HMDB96654; HMDB96739; HMDB96740; HMDB96741; HMDB96742; HMDB96743; HMDB96744			
1226	596,1389797	6698,115772	Delphinidin 3-sambubioside	C20491; HMDB0038003; HMDB38003	C26H29O16	-H(-)	100
1227	597,3917225	5952,27787	3''-N-Acetyl-4''-O-(9-octadecenoyl)fusarochromanone	HMDB0038567; HMDB38567	C35H54N2O6	-H(-)	100

1228	602,055199	6764,641428	GDP-alpha-D-mannose(2-)	CHEBI:57527; HMDB0062759; HMDB62759	C16H23N5O16P2	-H(-)	100
1229	603,1365282	4640,550364	6-{[6-(3,4-dihydroxy-6-methyl-5-oxooxan-2-yl)-5-hydroxy-2-(3-methoxyphenyl)...	HMDB0127336; HMDB0127337	C28H28O15	-H(-)	100
1230	603,441064	6224,99331	Cycloartanyl ferulate	HMDB0036295; HMDB36295	C40H60O4	-H(-)	100
1231	605,2615409	5936,181408	Clerodendrin A	C09074	C31H42O12	-H(-)	77
1232	607,059151 5	5327,141768	C.I. Food Brown 3	HMDB0037512; HMDB37512	C27H20N4O9S2	-H(-)	100

1233	607,1659795	6515,229089	Diosmin	C10039; C10382; C17834; C17837; CHEBI:1188022; CHEBI:27598; HMDB0029548; HMDB0036009; HMDB0037413; HMDB0037414; HMDB0037416; HMDB0037448; HMDB0037453; HMDB0038810; HMDB0038819; HMDB0039856; HMDB0039909; HMDB29548; HMDB36009; HMDB37413; HMDB37414; HMDB37416; HMDB37448; HMDB37453; HMDB38810; HMDB38819; HMDB39856; HMDB39909	C28H32O15	-H(-)	100
1234	609,1832909	4298,302799	Hesperidin	C09755; C09806; CHEBI:28775; CHEBI:59016; HMDB0003265; HMDB0030748; HMDB0036333; HMDB03265; HMDB30748; HMDB36333	C28H34O15	-H(-)	100
1235	609,2968238	3566,81542	Isoliensinine	HMDB0033749; HMDB0033920; HMDB33749; HMDB33920	C37H42N2O6	-H(-)	100
1236	609,437153	5648,380442	Annonisin	HMDB0031394; HMDB0031926; HMDB0033603; HMDB31394; HMDB31926; HMDB33603	C35H62O8	-H(-)	100
1237	610,1316608	3394,396397	Delphinidin 3-(3""-p-coumaroylgl	C16369; C16370; HMDB0030099; HMDB0037089; HMDB0125178; HMDB30099; HMDB37089	C30H27O14	-H(-)	80

			ucoside)				
1238	610,1549341	3853,742055	Cyanidin 3-glucogalactoside	C08639; C16306; C16315; C20469; HMDB0031468; HMDB0037986; HMDB0037991; HMDB0037996; HMDB0038001; HMDB0038002; HMDB0041637; HMDB0125123; HMDB0125129; HMDB31468; HMDB37986; HMDB37991; HMDB37996; HMDB38001; HMDB38002; HMDB41637	C27H31O16	-H(-)	100
1239	610,361299	5694,686857	Zizyphine A	C10015	C33H49N5O6	-H(-)	100
1240	611,1219353	4808,393438	{3-[3-(2,4-dihydroxyphenyl)-2-hydroxy-3-[3,5,7-trihydroxy-2-(3-hydroxypheny...	HMDB0135144; HMDB0135145; HMDB0135146	C30H28O12S	-H(-)	100

1241	611,379004	7265,680586	Cholestane-3,7,12,25-tetrol-3-glucuronide	C03033; HMDB0010355; HMDB10355	C33H56O10	-H(-)	90
1242	614,2981747	7136,824188	Hypaconitine	C08688	C33H45NO10	-H(-)	83
1243	615,389352	4070,154613	12-O-Tetradecanoylphorbol 13-acetate	C05151	C36H56O8	-H(-)	100
1244	615,4261107	4226,141816	Tsugarioside B	HMDB0035509; HMDB35509	C37H60O7	-H(-)	100
1245	617,1886391	3861,169596	3,4,5-trihydroxy-6-{2-[(3-methylbut-2-enoyl)oxy]-2-{9-[(3-methylbut-2-	HMDB0128923	C30H34O14	-H(-)	91

			enoyl...				
1246	617,3157722	4933,378085	BILA 2185BS	C15657	C35H46N4O4S	-H(-)	100
1247	617,5150847	5599,364888	DG(14:1(9Z)/22:2(13Z,16Z)/0:0)	C00165; HMDB0007059; HMDB0007110; HMDB0007111; HMDB0007138; HMDB0007162; HMDB0007163; HMDB0007190; HMDB0007219; HMDB0007246; HMDB0007247; HMDB0007274; HMDB0007303; HMDB0007418; HMDB0007446; HMDB0007475; HMDB0007647; HMDB0056019; HMDB0056025; HMDB0056049; HMDB0056056; HMDB0056147; HMDB0056165; HMDB07059; HMDB07110; HMDB07111; HMDB07138; HMDB07162; HMDB07163; HMDB07190; HMDB07219; HMDB07246; HMDB07247; HMDB07274; HMDB07303; HMDB07418; HMDB07446; HMDB07475; HMDB07647; HMDB56019; HMDB56025; HMDB56049; HMDB56056; HMDB56147; HMDB56165	C39H70O5	-H(-)	100
1248	618,03836	5565,788699	UDP-2-	C20395	C17H23N3	-H(-)	100

	47		acetamido-2-deoxy-alpha-D-ribo-hex-3-uluronate		O18P2		
1249	619,2880305	18629,00599	1-Arachidonoylglycerophosphoinositol	CHEBI:83053; HMDB0061690; HMDB0062722; HMDB61690; HMDB62722	C29H49O12P	-H(-)	100
1250	619,4204755	5364,715323	Fasciculic acid A	HMDB0036439; HMDB0037034; HMDB0039520; HMDB0041534; HMDB36439; HMDB37034; HMDB39520; HMDB41534	C36H60O8	-H(-)	90
1251	619,4569764	4979,78191	Mosinone A	HMDB0031228; HMDB31228	C37H64O7	-H(-)	100
1252	620,1180956	3841,428681	2-amino-4-({1-[(carboxymethyl)-C-hydroxycarb	HMDB0126145	C26H27N3O13S	-H(-)	87

			onimidoyl]-2-({5,11-dihydroxy-1...				
1253	622,2794367	3747,904812	Leukotriene C5	HMDB0012993; HMDB12993	C30H45N3O9S	-H(-)	100
1254	624,1703924	3426,668547	Petunidin 3-rutinoside	HMDB0038098; HMDB0038099; HMDB0041677; HMDB0041766; HMDB0125110; HMDB0125115; HMDB38098; HMDB38099; HMDB41677; HMDB41766	C28H33O16	-H(-)	100
1255	625,1412137	4053,303618	Quercetin 4'',7-diglucoside	C12667; HMDB0037356; HMDB0037363; HMDB0037537; HMDB0038287; HMDB0038824; HMDB0039878; HMDB0039924; HMDB0040371; HMDB0040861; HMDB0041358; HMDB0126974; HMDB0133550; HMDB0133551; HMDB37356; HMDB37363; HMDB37537; HMDB38287; HMDB38824; HMDB39878; HMDB39924; HMDB40371; HMDB40861; HMDB41358	C27H30O17	-H(-)	100
1256	631,09488	9627,170345	Myricetin 7-	HMDB0035463; HMDB0039208; HMDB35463;	C28H24O1	-H(-)	100

	56		(6''''-galloylglucoside)	HMDB39208	7		
1257	631,1067572	7839,259594	UDP-2,4-bis(acetamido)-2,4,6-trideoxy-beta-L-altropyranose	C19971; C20357	C19H30N4O16P2	-H(-)	100
1258	632,4287457	3729,670112	PE(14:0/14:1(9Z))	C00350; HMDB0008822; HMDB0008854; HMDB08822; HMDB08854	C33H64NO8P	-H(-)	100
1259	633,5249918	5000,501183	CE(5D5)	HMDB0112214; HMDB0112217; HMDB0112218; HMDB0112221; HMDB0112226	C43H70O3	-H(-)	100
1260	635,3794214	4914,4848	Madlongiside C	HMDB0037904; HMDB37904	C35H56O10	-H(-)	100
1261	637,0650972	7749,923434	(5-{8-[5,7-dihydroxy-2-(4-	HMDB0129218	C30H22O14S	-H(-)	100

			hydroxyphenyl)-4-oxo-3,4-dihydro-2H-1-benzopyran-...				
1262	637,1046748	4938,535297	Isochesnatin	C12632; CHEBI:60077; HMDB0039266; HMDB0039267; HMDB0040827; HMDB0060297; HMDB39266; HMDB39267; HMDB40827; HMDB60297	C27H26O18	-H(-)	100
1263	637,5353569	12349,88198	2-Octaprenylphenol	C05810	C46H70O	-H(-)	100
1264	638,1725859	3064,323714	CMP-pseudaminic acid	C20083; C20419	C22H34N5O15P	-H(-)	100
1265	639,1929795	3343,691852	Plantamajoside	C10485; C10499; C17528	C29H36O16	-H(-)	100
1266	642,96311	8449,860879	Phosphatidy	C05981; CHEBI:16618; HMDB0004249;	C12H24O2	-H(-)	100

	46		linositol-3,4,5-trisphosphate	HMDB04249	2P4		
1267	643,3331741	4204,921752	Capsianoside IV	HMDB0030736; HMDB0038376; HMDB30736; HMDB38376	C32H52O13	-H(-)	100
1268	646,4821063	4451,259151	PE(14:0/P-16:0)	C00350; HMDB0008850; HMDB0011335; HMDB08850; HMDB11335	C35H70NO7P	-H(-)	100
1269	647,3799258	4870,793919	Phytolaccoside A	HMDB0034642; HMDB0037910; HMDB0041132; HMDB34642; HMDB37910; HMDB41132	C36H56O10	-H(-)	100
1270	647,4892517	6128,843072	Uvaricin	C08572	C39H68O7	-H(-)	100
1271	648,3874987	3923,954562	1-Palmitoyl-2-(5-hydroxy-8-oxo-6-octenoyl)-sn-glycero-3-	C13901	C32H60NO10P	-H(-)	100

			phosphatidylcholine				
1272	649,1398513	25088,16717	6""-Malonylapiin	C05622; HMDB0037601; HMDB0039312; HMDB37601; HMDB39312	C29H30O17	-H(-)	76
1273	649,3947429	4754,024504	Saponin H	HMDB0035607; HMDB0040941; HMDB0041040; HMDB35607; HMDB40941; HMDB41040	C36H58O10	-H(-)	100
1274	649,5921738	4145,442526	CE(18:1(9Z))	C14641; CHEBI:46898; CHEBI:88768; HMDB0000918; HMDB0005189; HMDB0034420; HMDB00918; HMDB05189; HMDB05190; HMDB05191; HMDB34420	C45H78O2	-H(-)	100
1275	650,2599131	4498,066933	Rifamycin Z	C14723	C35H41NO11	-H(-)	100
1276	651,1571151	12021,90792	Tricin 7-[rhamnosyl-(1->2)-galacturonide]	CHEBI:35782; HMDB0037461; HMDB0039374; HMDB0039929; HMDB0040474; HMDB37461; HMDB39374; HMDB39929; HMDB40474	C29H32O17	-H(-)	100
1277	653,2393108	5424,47103	Mezerein	C09134	C38H38O10	-H(-)	100

1278	655,303134	11192,59274	Disinomenine	C16954	C38H44N2O8	-H(-)	100
1279	659,329134	4364,509246	Capsianoside I	HMDB0002318; HMDB02318	C32H52O14	-H(-)	100
1280	661,0810019	6418,540834	UDP-2,3-diacetamido-2,3-dideoxy-alpha-D-glucuronate	C19725; C19745	C19H28N4O18P2	-H(-)	100
1281	662,366615	3830,914783	1-Palmitoyl-2-(5-keto-6-octendioyl)-sn-glycero-3-phosphatidylcholine	C13900	C32H58NO11P	-H(-)	100
1282	663,2668409	4144,831525	2'',7-Dihydroxy-	HMDB0036400; HMDB36400	C33H44O14	-H(-)	98

			4''-methoxy-8-prenylflavan 2'',7-diglucoside				
1283	664,0938163	3903,94417	Nicotinic acid adenine dinucleotide	C00857; C04423; CHEBI:18304; HMDB0001179; HMDB01179	C21H27N6O15P2	-H(-)	100
1284	664,3842335	3916,331601	1-Palmitoyl-2-(5-hydroxy-8-oxo-6-octenedioyl)-sn-glycero-3-phosphatidylcholine	C13898	C32H60NO11P	-H(-)	83
1285	665,21456	5250,626691	Glycogen	C00182; C00464; C01613; C02013; C02052;	C24H42O2	-H(-)	100

	24			C03989; C04861; C08242; C08248; CHEBI:17164; CHEBI:28087; CHEBI:28808; CHEBI:61988; HMDB0000757; HMDB0001296; HMDB0003553; HMDB0029931; HMDB0035323; HMDB0038490; HMDB0038870; HMDB0038871; HMDB0039173; HMDB0039174; HMDB0039176; HMDB0040182; HMDB00757; HMDB01296; HMDB03553; HMDB29931; HMDB35323; HMDB38490; HMDB38870; HMDB38871; HMDB39173; HMDB39174; HMDB39176; HMDB40182	1		
1286	666,3861427	5006,440089	Mycinamicin VI	C15682	C35H57NO11	-H(-)	100
1287	668,0406079	5223,42165	Adenophostin A	C13727	C16H26N5O18P3	-H(-)	100
1288	669,1257351	4497,50578	(R)-Skyrin 2-xyloside	HMDB0036319; HMDB36319	C35H26O14	-H(-)	100
1289	671,5613068	8470,414587	DG(18:0/22:4(7Z,10Z,13Z,16Z)/0:0)	C00165; HMDB0007176; HMDB0007197; HMDB0007262; HMDB0007290; HMDB0007319; HMDB0007347; HMDB0007373; HMDB0007374;	C43H76O5	-H(-)	100

				HMDB0007400; HMDB0007401; HMDB0007428; HMDB0007456; HMDB0007485; HMDB0007513; HMDB0007542; HMDB0007599; HMDB0007626; HMDB0007627; HMDB0007654; HMDB0007680; HMDB0056054; HMDB0056077; HMDB0056083; HMDB0056106; HMDB0056217; HMDB0056223; HMDB0056254; HMDB0056261; HMDB0056309; HMDB07176; HMDB07197; HMDB07262; HMDB07290; HMDB07319; HMDB07347; HMDB07373; HMDB07374; HMDB07400; HMDB07401; HMDB07428; HMDB07456; HMDB07485; HMDB07513; HMDB07542; HMDB07599; HMDB07626; HMDB07627; HMDB07654; HMDB07680; HMDB56054; HMDB56077; HMDB56083; HMDB56106; HMDB56217; HMDB56223; HMDB56254; HMDB56261; HMDB56309			
1290	678,3987266	4690,412018	Telaprevir	CHEBI:494996; HMDB0015616; HMDB15616	C36H53N7O6	-H(-)	100

1291	679,1887793	4451,928124	6-[(2-{[3-(3,4-dimethoxyphenyl)-7-methoxy-8-methyl-4-oxo-4H-chromen-5-yl]ox...	HMDB0129584; HMDB0129585; HMDB0129586; HMDB0129587	C31H36O17	-H(-)	100
1292	683,4649926	7824,361669	PA(15:0/20:3(5Z,8Z,11Z))	HMDB0114820; HMDB0115120; HMDB0115509; HMDB0115563	C38H69O8P	-H(-)	100
1293	689,5115074	7186,501787	PA(15:0/20:0)	HMDB0114819; HMDB0115063; HMDB0115227; HMDB0115239; HMDB0115610; HMDB0115630; HMDB0115637; HMDB0115653; HMDB0115663; HMDB0115669; HMDB0115713; HMDB0115718; HMDB0115735; HMDB0115745; HMDB0115809; HMDB0115834; HMDB0115844; HMDB0115851; HMDB0115863; HMDB0115880; HMDB0115892;	C38H75O8P	-H(-)	76

				HMDB0115903; HMDB0115909			
1294	694,2864497	5154,279571	Rifamycin S	C14540	C37H45NO12	-H(-)	100
1295	696,3025779	5160,864374	Rifamycin	C12044	C37H47NO12	-H(-)	100
1296	698,3569381	4726,131272	Lasiodine A	C10008	C39H49N5O7	-H(-)	93
1297	699,2563419	6467,469159	Catheduline E2	C09935	C38H40N2O11	-H(-)	100
1298	700,3908687	4513,445964	Leucomycin V	C13103	C35H59NO13	-H(-)	100
1299	703,3339674	4348,015279	25-Acetyl-6,7-didehydrofevicordin F 3-glucoside	HMDB0036338; HMDB36338	C37H52O13	-H(-)	100
1300	705,0986099	5927,366302	[(6-{5,7-dihydroxy-4-oxo-6-	HMDB0126993; HMDB0126994; HMDB0126995; HMDB0126996; HMDB0126997; HMDB0126998; HMDB0126999; HMDB0127000	C27H30O20S	-H(-)	100

			[3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]-2-...				
1301	709,0677062	64191,92165	2,3,4,7,8,9,15,22,23,28-decahydroxy-14-(hydroxymethyl)-13,25,32,35-tetraoxa...	HMDB0134686; HMDB0134688	C32H22O19	-H(-)	100
1302	715,2915178	4934,472213	Mulberrofuran T	HMDB0035940; HMDB35940	C44H44O9	-H(-)	100
1303	715,3694547	5330,276234	Spinoside A	C08809	C39H56O12	-H(-)	100
1304	719,2546891	5178,411918	Azadirachtin A	C08748; C11047	C35H44O16	-H(-)	100

1305	719,4651776	7622,155555	PA(16:0/22:6(4Z,7Z,10Z,13Z,16Z,19Z))	HMDB0114849; HMDB0114868; HMDB0114869; HMDB0114911; HMDB0114936; HMDB0114961; HMDB0114962; HMDB0114987; HMDB0115014; HMDB0115127; HMDB0115128; HMDB0115152; HMDB0115179; HMDB0115203; HMDB0115204; HMDB0115353; HMDB0115379; HMDB0115404; HMDB0115523; HMDB0115525; HMDB0115526; HMDB0115542; HMDB0115569; HMDB0115570	C41H69O8P	-H(-)	100
1306	720,4326709	4847,096156	gamma2-Solamarine	HMDB0029371; HMDB0033696; HMDB29371; HMDB33696	C39H63NO11	-H(-)	100
1307	721,2494171	5058,127404	Kansuinine B	C09122	C38H42O14	-H(-)	100
1308	729,474088	6414,296386	(3R,2'S)-Myxol 2'-alpha-L-fucoside	C15941; C16271	C46H66O7	-H(-)	100
1309	734,4764509	7286,922555	PE(14:0/22:6(4Z,7Z,10Z,13Z,16Z,19	C00350; HMDB0008847; HMDB0008878; HMDB0008879; HMDB0008972; HMDB0009096; HMDB0009127; HMDB0009128; HMDB0009160;	C41H70NO8P	-H(-)	100

			Z))	HMDB0009161; HMDB0009192; HMDB0009452; HMDB0009614; HMDB0009647; HMDB0009679; HMDB0113909; HMDB0114382; HMDB08847; HMDB08878; HMDB08879; HMDB08972; HMDB09096; HMDB09127; HMDB09128; HMDB09160; HMDB09161; HMDB09192; HMDB09452; HMDB09614; HMDB09647; HMDB09679			
1310	736,4916496	14183,43934	PE(14:0/22:5(4Z,7Z,10Z,13Z,16Z))	C00350; HMDB0008845; HMDB0008846; HMDB0008877; HMDB0008939; HMDB0008970; HMDB0008971; HMDB0009030; HMDB0009063; HMDB0009094; HMDB0009095; HMDB0009126; HMDB0009159; HMDB0009190; HMDB0009191; HMDB0009386; HMDB0009419; HMDB0009451; HMDB0009581; HMDB0009613; HMDB0009646; HMDB0113030; HMDB0113481; HMDB0113889; HMDB0113907; HMDB0113908; HMDB0113969; HMDB0114156; HMDB0114325; HMDB0114353; HMDB0114381; HMDB08845; HMDB08846;	C41H72NO8P	-H(-)	100

				HMDB08877; HMDB08939; HMDB08970; HMDB08971; HMDB09030; HMDB09063; HMDB09094; HMDB09095; HMDB09126; HMDB09159; HMDB09190; HMDB09191; HMDB09386; HMDB09419; HMDB09451; HMDB09581; HMDB09613; HMDB09646			
1311	736,528233	39759,94636	PC(18:4(6Z,9Z,12Z,15Z)/P-16:0)	C00157; HMDB0008258; HMDB0011214; HMDB08258; HMDB11214	C42H76NO7P	-H(-)	100
1312	738,507242	86601,72504	PC(15:0/18:4(6Z,9Z,12Z,15Z))	C00157; C00350; HMDB0007943; HMDB0008231; HMDB0008844; HMDB0008937; HMDB0008938; HMDB0008968; HMDB0008997; HMDB0009028; HMDB0009029; HMDB0009061; HMDB0009062; HMDB0009093; HMDB0009124; HMDB0009125; HMDB0009157; HMDB0009158; HMDB0009189; HMDB0009320; HMDB0009353; HMDB0009385; HMDB0009418; HMDB0009580; HMDB0113028; HMDB0113029; HMDB0113424; HMDB0113452; HMDB0113887; HMDB0113888; HMDB0113905;	C41H74NO8P	-H(-)	100

				HMDB0113906; HMDB0113946; HMDB0113967; HMDB0113968; HMDB0114098; HMDB0114127; HMDB0114155; HMDB0114269; HMDB0114297; HMDB0114324; HMDB0114352; HMDB05323; HMDB05350; HMDB07943; HMDB08231; HMDB08844; HMDB08937; HMDB08938; HMDB08968; HMDB08997; HMDB09028; HMDB09029; HMDB09061; HMDB09062; HMDB09093; HMDB09124; HMDB09125; HMDB09157; HMDB09158; HMDB09189; HMDB09320; HMDB09353; HMDB09385; HMDB09418; HMDB09580			
1313	740,1802977	5909,154444	Malvidin 3-(6-malonylglucoside) 5-glucoside	HMDB0038822; HMDB38822	C32H37O20	-H(-)	100
1314	740,5231259	90142,20126	PC(15:0/18:3(6Z,9Z,12Z	C00157; C00350; HMDB0007941; HMDB0007942; HMDB0008165; HMDB0008198; HMDB0008876;	C41H76NO8P	-H(-)	100

			))	HMDB0008935; HMDB0008936; HMDB0008967; HMDB0008995; HMDB0008996; HMDB0009027; HMDB0009060; HMDB0009091; HMDB0009092; HMDB0009123; HMDB0009156; HMDB0009287; HMDB0009319; HMDB0009352; HMDB0009548; HMDB0113026; HMDB0113027; HMDB0113368; HMDB0113396; HMDB0113885; HMDB0113886; HMDB0113904; HMDB0113944; HMDB0113945; HMDB0113966; HMDB0114069; HMDB0114097; HMDB0114126; HMDB0114240; HMDB0114268; HMDB0114296; HMDB05349; HMDB07941; HMDB07942; HMDB08165; HMDB08198; HMDB08876; HMDB08935; HMDB08936; HMDB08967; HMDB08995; HMDB08996; HMDB09027; HMDB09060; HMDB09091; HMDB09092; HMDB09123; HMDB09156; HMDB09287; HMDB09319; HMDB09352; HMDB09548			
1315	741,32234	5734,291314	Patellamide	C15734	C35H50N8	-H(-)	100

	28		A		O6S2		
1316	742,4970405	37862,3729	Pseudoargiopinin I	C20096	C36H63N12O5	-H(-)	100
1317	742,5388141	643671,1025	PC(15:0/18:2(9Z,12Z))	C00157; C00350; HMDB0007940; HMDB0008132; HMDB0008843; HMDB0008875; HMDB0008934; HMDB0008966; HMDB0008994; HMDB0009025; HMDB0009026; HMDB0009058; HMDB0009059; HMDB0009090; HMDB0009254; HMDB0009286; HMDB0009515; HMDB0009547; HMDB0113025; HMDB0113339; HMDB0113856; HMDB0113857; HMDB0113858; HMDB0113884; HMDB0113943; HMDB0114015; HMDB0114042; HMDB0114068; HMDB0114211; HMDB0114239; HMDB05332; HMDB05343; HMDB05347; HMDB07940; HMDB08132; HMDB08843; HMDB08875; HMDB08934; HMDB08966; HMDB08994; HMDB09025; HMDB09026; HMDB09058; HMDB09059; HMDB09090; HMDB09254; HMDB09286; HMDB09515; HMDB09547	C41H78NO8P	-H(-)	100

1318	745,1354309	12087,01963	Bisisodiospyrin; Brilliant blue	C19352; C20336; HMDB0030642; HMDB30642	C37H34N2O9S3.; C44H26O12	-H(-); -H(-)	100
1319	746,4697862	9645,332176	Clarithromycin	C06912; CHEBI:3732; HMDB0015342; HMDB15342	C38H69NO13	-H(-)	100
1320	751,1728894	5451,634763	6-[4-(5,7-dihydroxy-6-{4-hydroxy-6-methyl-5-oxo-3-[(3,4,5-trihydroxy-6-meth...	HMDB0127310; HMDB0127311; HMDB0127312; HMDB0127313	C33H36O20	-H(-)	100
1321	752,4027721	5366,183232	Vindesine	CHEBI:36373; HMDB0014454; HMDB14454	C43H55N5O7	-H(-)	100
1322	753,4063797	6462,655505	Alliospirosid e D	HMDB0030915; HMDB0034211; HMDB0036251; HMDB30915; HMDB34211; HMDB36251	C39H62O14	-H(-)	100
1323	756,21172	6720,114989	Pelargonidin	C04787; C12646; HMDB0033687; HMDB0037988;	C33H41O2	-H(-)	100

	54		3-sophoroside 5-glucoside	HMDB0041765; HMDB33687; HMDB37988; HMDB41765	0		
1324	762,4646176	11153,32066	14-hydroxyclarithromycin	HMDB0061019; HMDB61019	C38H69NO14	-H(-)	100
1325	762,5069784	101320,7223	PE(16:0/22:6(4Z,7Z,10Z,13Z,16Z,19Z))	C00350; HMDB0008946; HMDB0008977; HMDB0008978; HMDB0009038; HMDB0009071; HMDB0009102; HMDB0009103; HMDB0009133; HMDB0009134; HMDB0009166; HMDB0009167; HMDB0009198; HMDB0009294; HMDB0009325; HMDB0009326; HMDB0009358; HMDB0009359; HMDB0009390; HMDB0009423; HMDB0009454; HMDB0009455; HMDB0009617; HMDB0009650; HMDB0009682; HMDB0113036; HMDB0113675; HMDB0113896; HMDB0113913; HMDB0113914; HMDB0113975; HMDB0114076; HMDB0114103; HMDB0114104; HMDB0114132; HMDB0114133; HMDB0114160; HMDB0114385; HMDB0114524;	C43H74NO8P	-H(-)	100

				HMDB0114550; HMDB0114576; HMDB05324; HMDB08946; HMDB08977; HMDB08978; HMDB09038; HMDB09071; HMDB09102; HMDB09103; HMDB09133; HMDB09134; HMDB09166; HMDB09167; HMDB09198; HMDB09294; HMDB09325; HMDB09326; HMDB09358; HMDB09359; HMDB09390; HMDB09423; HMDB09454; HMDB09455; HMDB09617; HMDB09650; HMDB09682			
1326	763,5486182	46257,17212	PG(a-13:0/i-22:0)	HMDB0116652; HMDB0116688	C41H81O10P	-H(-)	100
1327	767,4014602	7690,720752	Goniodomin A	C16899	C43H60O12	-H(-)	100
1328	768,4810562	12645,2794	PS(15:0/20:4(5Z,8Z,11Z,14Z))	HMDB0112331; HMDB0112332; HMDB0112636; HMDB0112656	C41H72NO10P	-H(-)	92
1329	772,5278234	31975,31381	PE(22:6(4Z,7Z,10Z,13Z,16Z,19Z)/P-	C00350; HMDB0009710; HMDB0009711; HMDB0011427; HMDB0011460; HMDB09710; HMDB09711; HMDB11427; HMDB11460	C45H76NO7P	-H(-)	100

			18:1(11Z))				
1330	776,5591369	298332,665	PE(22:4(7Z,10Z,13Z,16Z)/P-18:1(11Z))	C00350; HMDB0009611; HMDB0009612; HMDB0009643; HMDB0009676; HMDB0011392; HMDB0011393; HMDB0011424; HMDB0011457; HMDB09611; HMDB09612; HMDB09643; HMDB09676; HMDB11392; HMDB11393; HMDB11424; HMDB11457	C45H80NO7P	-H(-)	100
1331	782,4018334	5184,517034	Beauvericin	C11590	C45H57N3O9	-H(-)	100
1332	782,570054	19912,7691	PC(14:1(9Z)/22:2(13Z,16Z))	C00157; HMDB0007921; HMDB0007980; HMDB0007981; HMDB0008012; HMDB0008040; HMDB0008041; HMDB0008072; HMDB0008105; HMDB0008136; HMDB0008137; HMDB0008168; HMDB0008201; HMDB0008332; HMDB0008364; HMDB0008397; HMDB0008591; HMDB0113077; HMDB0113096; HMDB0113097; HMDB0113122; HMDB0113149; HMDB0113177; HMDB0113204; HMDB0113233; HMDB0113288; HMDB0113289; HMDB0113316; HMDB0113343; HMDB0113344;	C44H82NO8P	-H(-)	100

				HMDB0113371; HMDB0113399; HMDB0113567; HMDB07921; HMDB07980; HMDB07981; HMDB08012; HMDB08040; HMDB08041; HMDB08072; HMDB08105; HMDB08136; HMDB08137; HMDB08168; HMDB08201; HMDB08332; HMDB08364; HMDB08397; HMDB08591			
1333	783,4038713	5146,153356	Fumonisin FP2	HMDB0031827; HMDB0031828; HMDB31827; HMDB31828	C39H62NO15	-H(-)	100
1334	783,6380668	15671,0544	SM(d18:1/22:1(13Z))	C00550; CHEBI:17636; HMDB0012104; HMDB12104	C45H89N2O6P	-H(-)	100
1335	788,5235757	25047,87701	PE(18:1(11Z)/22:6(4Z,7Z,10Z,13Z,16Z,19Z))	C00350; HMDB0009045; HMDB0009078; HMDB0009109; HMDB0009110; HMDB0009141; HMDB0009174; HMDB0009302; HMDB0009333; HMDB0009334; HMDB0009366; HMDB0009367; HMDB0009397; HMDB0009398; HMDB0009430; HMDB0009431; HMDB0009462; HMDB0009589; HMDB0009590; HMDB0009621; HMDB0009654; HMDB0009685; HMDB0009686; HMDB0113982;	C45H76NO8P	-H(-)	100

				HMDB0114084; HMDB0114111; HMDB0114112; HMDB0114140; HMDB0114141; HMDB0114167; HMDB0114168; HMDB0114279; HMDB0114307; HMDB0114333; HMDB0114334; HMDB0114361; HMDB0114362; HMDB0114389; HMDB0114580; HMDB09045; HMDB09078; HMDB09109; HMDB09110; HMDB09141; HMDB09174; HMDB09302; HMDB09333; HMDB09334; HMDB09366; HMDB09367; HMDB09397; HMDB09398; HMDB09430; HMDB09431; HMDB09462; HMDB09589; HMDB09590; HMDB09621; HMDB09654; HMDB09685; HMDB09686			
1336	790,2573933	8973,796596	UDP-3-O-(3-hydroxytetradecanoyl)-D-glucosamin	C06022	C29H51N3O18P2	-H(-)	100

			e				
1337	790,4758756	13008,96156	Immunomycin	C12102	C43H69NO12	-H(-)	72
1338	799,5486874	28912,76984	PG(18:0/20:3(5Z,8Z,11Z))	HMDB0010608; HMDB0010609; HMDB0116576; HMDB10608; HMDB10609	C44H81O10P	-H(-)	100
1339	801,0781981	7944,246539	Punigluconin	C17521; HMDB0039202; HMDB0039261; HMDB0040714; HMDB39202; HMDB39261; HMDB40714	C34H26O23	-H(-)	98
1340	808,4131906	12045,25329	Protoveratrine B	C10816	C41H63NO15	-H(-)	100
1341	815,7134238	7886,312907	TG(15:0/18:1(9Z)/16:1(9Z))	HMDB0011706; HMDB0011710; HMDB0042108; HMDB0042572; HMDB0042976; HMDB0043032; HMDB0043173; HMDB0043200; HMDB0043201; HMDB0043228; HMDB0043285; HMDB0043870; HMDB0047751; HMDB0048436; HMDB0048437; HMDB11706; HMDB11710; HMDB42108; HMDB42572; HMDB42976; HMDB43032; HMDB43173; HMDB43200; HMDB43201;	C52H96O6	-H(-)	100

				HMDB43228; HMDB43285; HMDB43870; HMDB47751; HMDB48436; HMDB48437			
1342	819,3802277	9453,667371	Licoricesaponin E2	C14049; HMDB0038719; HMDB38719	C42H60O16	-H(-)	100
1343	821,3964233	10965,06803	Glycyrrhizin	C02284; C18610; CHEBI:15939; HMDB0029843; HMDB0034522; HMDB0039250; HMDB0039310; HMDB29843; HMDB34522; HMDB39250; HMDB39310	C42H62O16	-H(-)	100
1344	825,6603844	34453,65964	Campesterol 6''-(9Z-octadecenoyl)-glucoside	HMDB0036292; HMDB36292	C52H90O7	-H(-)	100
1345	827,189205	6048,733623	Luteolin 7-O-(2-apiosyl-4-glucosyl-6-malonyl)-glucoside	HMDB0029259; HMDB29259	C35H40O23	-H(-)	100

1346	827,6654094	13162,51993	SM(d18:0/24:1(15Z)(OH))	C00550; HMDB0013469; HMDB13469	C47H93N2O7P	-H(-)	100
1347	833,6817336	20358,84916	6-methoxy-3-methyl-2-all-trans-decaprenyl-1,4-benzoquinol	CHEBI:64181; HMDB0062428; HMDB62428	C58H90O3	-H(-)	100
1348	834,5771588	20375,64904	3-O-Sulfogalactosylceramide (d18:1/20:0)	C06125; HMDB0012315; HMDB12315	C44H85NO11S	-H(-)	100
1349	837,2821335	5764,017652	3,5,7-Trihydroxy-4''-methoxy-8-prenylflavone 3-	HMDB0033395; HMDB33395	C39H50O20	-H(-)	100

			[rhamnosyl-(1->6)-galactosid...				
1350	839,6766758	13720,92144	Isofucosterol 3-O-[6-O-Octadecanoyl-b-D-glucopyranoside]	HMDB0032812; HMDB0034089; HMDB32812; HMDB34089	C53H92O7	-H(-)	100
1351	842,725325	8567,969985	SM(d18:1/26:0)	C00550; HMDB0011698; HMDB11698	C49H100N2O6P	-H(-)	100
1352	853,501172	19309,00218	PGP(18:0/18:2(9Z,12Z))	HMDB0013507; HMDB0013520; HMDB0013521; HMDB0013535; HMDB0013536; HMDB0013549; HMDB13507; HMDB13520; HMDB13521; HMDB13535; HMDB13536; HMDB13549	C42H80O13P2	-H(-)	94
1353	853,729461 7	8535,732359	TG(16:0/16:0/20:4(5Z,8Z,11Z,14Z))	C00422; HMDB0005363; HMDB0005390; HMDB0005440; HMDB0010440; HMDB0010444; HMDB0010451; HMDB0031117; HMDB0031118; HMDB0042142; HMDB0042170; HMDB0042176;	C55H98O6	-H(-)	100

				HMDB0042205; HMDB0042343; HMDB0042349; HMDB0042373; HMDB0042379; HMDB0042407; HMDB0042414; HMDB0042430; HMDB0042431; HMDB0042528; HMDB0042552; HMDB0042586; HMDB0042610; HMDB0042611; HMDB0042634; HMDB0042693; HMDB0042762; HMDB0042785; HMDB0042814; HMDB0043009; HMDB0043569; HMDB0043848; HMDB0043908; HMDB0043935; HMDB0044063; HMDB0044069; HMDB0044095; HMDB0044102; HMDB0044123; HMDB0044130; HMDB0044171; HMDB0044284; HMDB0044285; HMDB0044339; HMDB0044361; HMDB0044480; HMDB0044481; HMDB0044502; HMDB0044529; HMDB0044684; HMDB0044690; HMDB0044743; HMDB0044866; HMDB0044872; HMDB0044897; HMDB0044904; HMDB0044996; HMDB0045105; HMDB0045158; HMDB0045294; HMDB0045497; HMDB0045671; HMDB0045678; HMDB0045896; HMDB0046078; HMDB0047798; HMDB0047804; HMDB0047825; HMDB0047832; HMDB0047921;			

				HMDB0047941; HMDB0047964; HMDB0047985; HMDB0048073; HMDB0048117; HMDB0048118; HMDB0048185; HMDB0048461; HMDB0048467; HMDB0048487; HMDB0048494; HMDB0048579; HMDB0048598; HMDB0048618; HMDB0048744; HMDB0048745; HMDB0048787; HMDB0049075; HMDB0049081; HMDB0049121; HMDB0049227; HMDB0049703; HMDB0049709; HMDB0049747; HMDB0049848; HMDB0049866; HMDB0050305; HMDB0050312; HMDB0050437; HMDB0052398; HMDB0052426; HMDB05363; HMDB05390; HMDB05440; HMDB10440; HMDB10444; HMDB10451; HMDB31117; HMDB31118; HMDB42142; HMDB42170; HMDB42176; HMDB42205; HMDB42343; HMDB42349; HMDB42373; HMDB42379; HMDB42407; HMDB42414; HMDB42430; HMDB42431; HMDB42528; HMDB42552; HMDB42586; HMDB42610; HMDB42611; HMDB42634; HMDB42693; HMDB42762; HMDB42785;			

				HMDB42814; HMDB43009; HMDB43569; HMDB43848; HMDB43908; HMDB43935; HMDB44063; HMDB44069; HMDB44095; HMDB44102; HMDB44123; HMDB44130; HMDB44171; HMDB44284; HMDB44285; HMDB44339; HMDB44361; HMDB44480; HMDB44481; HMDB44502; HMDB44529; HMDB44684; HMDB44690; HMDB44743; HMDB44866; HMDB44872; HMDB44897; HMDB44904; HMDB44996; HMDB45105; HMDB45158; HMDB45294; HMDB45497; HMDB45671; HMDB45678; HMDB45896; HMDB46078; HMDB47798; HMDB47804; HMDB47825; HMDB47832; HMDB47921; HMDB47941; HMDB47964; HMDB47985; HMDB48073; HMDB48117; HMDB48118; HMDB48185; HMDB48461; HMDB48467; HMDB48487; HMDB48494; HMDB48579; HMDB48598; HMDB48618; HMDB48744; HMDB48745; HMDB48787; HMDB49075;			

				HMDB49081; HMDB49121; HMDB49227; HMDB49703; HMDB49709; HMDB49747; HMDB49848; HMDB49866; HMDB50305; HMDB50312; HMDB50437; HMDB52398; HMDB52426			
1354	859,469557 4	6346,707374	Cyclotricuspidoside C	HMDB0033636; HMDB0035947; HMDB33636; HMDB35947	C43H72O17	-H(-)	100
1355	861,829141 3	5912,112476	TG(15:0/20:0/o-18:0)	HMDB0043104; HMDB0043804; HMDB0045528; HMDB43104; HMDB43804; HMDB45528	C56H110O5	-H(-)	86
1356	863,750378 9	6054,324044	TG(14:0/22:6(4Z,7Z,10Z,13Z,16Z,19Z)/o-18:0)	HMDB0042930; HMDB0042959; HMDB0048252; HMDB0048367; HMDB0048406; HMDB0048411; HMDB0049006; HMDB0049069; HMDB0052770; HMDB0052840; HMDB0053082; HMDB0053180; HMDB0053251; HMDB0053258; HMDB0054972; HMDB0055266; HMDB0055315; HMDB0055351; HMDB0055452; HMDB0055720; HMDB0055827; HMDB0055894; HMDB42930; HMDB42959; HMDB48252; HMDB48367; HMDB48406; HMDB48411; HMDB49006; HMDB49069;	C57H100O5	-H(-)	100

				HMDB52770; HMDB52840; HMDB53082; HMDB53180; HMDB53251; HMDB53258; HMDB54972; HMDB55266; HMDB55315; HMDB55351; HMDB55452; HMDB55720; HMDB55827; HMDB55894			
1357	869,5637129	24094,43643	X-206	C15847	C47H82O14	-H(-)	100
1358	873,6981793	6325,26538	TG(18:3(9Z,12Z,15Z)/18:2(9Z,12Z)/18:3(9Z,12Z,15Z))	HMDB0010507; HMDB0010518; HMDB0042447; HMDB0042539; HMDB0042563; HMDB0042568; HMDB0042627; HMDB0042650; HMDB0042656; HMDB0042715; HMDB0042737; HMDB0042744; HMDB0042773; HMDB0042778; HMDB0042802; HMDB0042830; HMDB0042836; HMDB0042853; HMDB0042859; HMDB0042887; HMDB0042894; HMDB0042916; HMDB0044301; HMDB0044383; HMDB0044497; HMDB0044518; HMDB0044524; HMDB0044551; HMDB0044571; HMDB0044578; HMDB0045337; HMDB0047952; HMDB0047975; HMDB0048012; HMDB0048018; HMDB0048084;	C57H94O6	-H(-)	100

				HMDB0048089; HMDB0048106; HMDB0048134; HMDB0048150; HMDB0048156; HMDB0048166; HMDB0048172; HMDB0048216; HMDB0048223; HMDB0048238; HMDB0048267; HMDB0048304; HMDB0048310; HMDB0048332; HMDB0048353; HMDB0048370; HMDB0048371; HMDB0048609; HMDB0048693; HMDB0048761; HMDB0048776; HMDB0048782; HMDB0048825; HMDB0048839; HMDB0048846; HMDB0048930; HMDB0048936; HMDB0048945; HMDB0048951; HMDB0048971; HMDB0048978; HMDB0048992; HMDB0049029; HMDB0049238; HMDB0049423; HMDB0049570; HMDB0049583; HMDB0049590; HMDB0049859; HMDB0050035; HMDB0050175; HMDB0050187; HMDB0050194; HMDB0050883; HMDB0051002; HMDB0051008; HMDB0051025; HMDB0052409; HMDB0052508; HMDB0052513; HMDB0052527; HMDB0052630; HMDB0052637; HMDB0052644; HMDB0052742; HMDB0052749; HMDB0052756; HMDB0052851; HMDB0052856; HMDB0052883;			

				HMDB0052948; HMDB0052960; HMDB0052966; HMDB0052979; HMDB0052993; HMDB0053055; HMDB0053062; HMDB0053364; HMDB0053661; HMDB0053738; HMDB0053744; HMDB0053755; HMDB0054018; HMDB0054039; HMDB0054104; HMDB0054643; HMDB0054705; HMDB0054910; HMDB0055152; HMDB0055165; HMDB0055206; HMDB0055212; HMDB0055219; HMDB0055370; HMDB0055375; HMDB0055536; HMDB10507; HMDB10518; HMDB42447; HMDB42539; HMDB42563; HMDB42568; HMDB42627; HMDB42650; HMDB42656; HMDB42715; HMDB42737; HMDB42744; HMDB42773; HMDB42778; HMDB42802; HMDB42830; HMDB42836; HMDB42853; HMDB42859; HMDB42887; HMDB42894; HMDB42916; HMDB44301; HMDB44383; HMDB44497; HMDB44518; HMDB44524; HMDB44551; HMDB44571; HMDB44578; HMDB45337; HMDB47952; HMDB47975; HMDB48012;			

				HMDB48018; HMDB48084; HMDB48089; HMDB48106; HMDB48134; HMDB48150; HMDB48156; HMDB48166; HMDB48172; HMDB48216; HMDB48223; HMDB48238; HMDB48267; HMDB48304; HMDB48310; HMDB48332; HMDB48353; HMDB48370; HMDB48371; HMDB48609; HMDB48693; HMDB48761; HMDB48776; HMDB48782; HMDB48825; HMDB48839; HMDB48846; HMDB48930; HMDB48936; HMDB48945; HMDB48951; HMDB48971; HMDB48978; HMDB48992; HMDB49029; HMDB49238; HMDB49423; HMDB49570; HMDB49583; HMDB49590; HMDB49859; HMDB50035; HMDB50175; HMDB50187; HMDB50194; HMDB50883; HMDB51002; HMDB51008; HMDB51025; HMDB52409; HMDB52508; HMDB52513; HMDB52527; HMDB52630; HMDB52637; HMDB52644; HMDB52742; HMDB52749; HMDB52756; HMDB52851;			

				HMDB52856; HMDB52883; HMDB52948; HMDB52960; HMDB52966; HMDB52979; HMDB52993; HMDB53055; HMDB53062; HMDB53364; HMDB53661; HMDB53738; HMDB53744; HMDB53755; HMDB54018; HMDB54039; HMDB54104; HMDB54643; HMDB54705; HMDB54910; HMDB55152; HMDB55165; HMDB55206; HMDB55212; HMDB55219; HMDB55370; HMDB55375; HMDB55536			
1359	874,6540571	11068,90034	PS(18:0/24:0)	HMDB0112384; HMDB0112531; HMDB0112719; HMDB0112886	C48H94NO10P	-H(-)	100
1360	876,6852036	7023,648809	PC(o-22:2(13Z,16Z)/22:3(10Z,13Z,16Z))	HMDB0013456; HMDB13456	C52H96NO7P	-H(-)	100
1361	879,5983272	8292,454739	PC(DiMe(11,3)/MonoMe(11,5))	HMDB0061396; HMDB0061404; HMDB0061407; HMDB0061424; HMDB0061432; HMDB0061436; HMDB0061444; HMDB0061448; HMDB0061456;	C49H87NO10P	-H(-)	78

				HMDB0061463; HMDB61396; HMDB61404; HMDB61407; HMDB61424; HMDB61432; HMDB61436; HMDB61444; HMDB61448; HMDB61456; HMDB61463			
1362	880,5873809	11091,27893	PC(22:4(7Z,10Z,13Z,16Z)/22:6(4Z,7Z,10Z,13Z,16Z,19Z))	C00157; HMDB0008649; HMDB0008680; HMDB0008681; HMDB0008713; HMDB0008714; HMDB0008745; HMDB08649; HMDB08680; HMDB08681; HMDB08713; HMDB08714; HMDB08745	C52H84NO8P	-H(-)	72
1363	888,0752902	5461,271258	Sulfoacetyl-CoA	C19685	C23H38N7O20P3S2	-H(-)	100
1364	891,5262472	6486,837471	Zeaxanthin diglucoside	C15969; C16275	C52H76O12	-H(-)	100
1365	894,6232146	7791,698693	PS(20:3(5Z,8Z,11Z)/24:1(15Z))	HMDB0112620; HMDB0112635; HMDB0112652; HMDB0112678; HMDB0112730; HMDB0112781; HMDB0112807; HMDB0112898; HMDB0112899; HMDB0112924; HMDB0112925	C50H90NO10P	-H(-)	100
1366	896,6382606	10506,14692	PS(20:2(11Z,14Z)/24:1(	HMDB0112592; HMDB0112619; HMDB0112634; HMDB0112756; HMDB0112780; HMDB0112896;	C50H92NO10P	-H(-)	100

			15Z))	HMDB0112897; HMDB0112923			
1367	906,5494641	15022,49619	PS(DiMe(11,3)/MonoMe(13,5))	HMDB0061559; HMDB0061567; HMDB0061575; HMDB0061578; HMDB0061595; HMDB0061599; HMDB0061607; HMDB0061615; HMDB0061619; HMDB0061626; HMDB61559; HMDB61567; HMDB61575; HMDB61578; HMDB61595; HMDB61599; HMDB61607; HMDB61615; HMDB61619; HMDB61626	C49H82NO12P	-H(-)	100
1368	908,1711076	4127,208134	6-Carboxyhexanoyl-CoA	C01063; C09824	C28H46N7O19P3S	-H(-)	100
1369	909,2083997	4118,4145	Carthamin	C16941; HMDB0033898; HMDB33898	C43H42O22	-H(-)	86
1370	910,5004756	7596,566224	Kinetensin 1-7	HMDB0012984; HMDB12984	C41H65N15O9	-H(-)	71
1371	911,5015764	6217,218026	Soyasaponin II	C12081; C17546; HMDB0034650; HMDB0036362; HMDB0039072; HMDB34650; HMDB36362; HMDB39072	C47H76O17	-H(-)	100
1372	913,49552	6022,574299	Tragopogon	HMDB0037926; HMDB37926	C50H74O1	-H(-)	100

	7		saponin L		5		
1373	935,2167338	6749,910544	[3-(6-hydroxy-4-{5-[(E)-2-[6-hydroxy-3-(3-hydroxyphenyl)-2-(4-hydroxyphenyl...	HMDB0125742; HMDB0125743; HMDB0125750; HMDB0125751; HMDB0125758; HMDB0125759; HMDB0125765; HMDB0125771; HMDB0125777; HMDB0125783; HMDB0125789; HMDB0125795	C56H40O12S	-H(-)	100
1374	943,5281322	8804,20629	Quinquenoside L1	C08792; HMDB0032694; HMDB0039519; HMDB32694; HMDB39519	C48H80O18	-H(-)	100
1375	947,3048913	5366,286897	Magnolioside C	C17680	C41H56O25	-H(-)	83
1376	948,5972709	8579,297593	PS(DiMe(11,5)/DiMe(13,5))	HMDB0061563; HMDB0061571; HMDB0061622; HMDB61563; HMDB61571; HMDB61622	C52H88NO12P	-H(-)	100
1377	953,7599867	6728,30023	TG(20:4(5Z,8Z,11Z,14Z)	HMDB0010525; HMDB0010542; HMDB0044443; HMDB0044465; HMDB0044470; HMDB0044605;	C63H102O6	-H(-)	100

			/18:1(9Z)/22:5(7Z,10Z,13Z,16Z,19Z))	HMDB0044610; HMDB0044632; HMDB0045206; HMDB0045285; HMDB0045368; HMDB0045389; HMDB0045394; HMDB0045420; HMDB0045440; HMDB0045446; HMDB0046125; HMDB0046175; HMDB0046225; HMDB0048889; HMDB0048894; HMDB0048910; HMDB0049020; HMDB0049343; HMDB0049469; HMDB0049484; HMDB0049489; HMDB0049530; HMDB0049544; HMDB0049550; HMDB0049610; HMDB0049615; HMDB0049630; HMDB0049649; HMDB0049655; HMDB0049663; HMDB0049669; HMDB0049959; HMDB0050079; HMDB0050093; HMDB0050098; HMDB0050137; HMDB0050150; HMDB0050156; HMDB0050213; HMDB0050218; HMDB0050232; HMDB0050250; HMDB0050256; HMDB0050263; HMDB0050269; HMDB0050621; HMDB0050676; HMDB0050731; HMDB0050754; HMDB0050767; HMDB0050772; HMDB0050790; HMDB0050802; HMDB0050808; HMDB0050826; HMDB0050837; HMDB0050844; HMDB0051047; HMDB0051065; HMDB0051092;			

				HMDB0051098; HMDB0051149; HMDB0051154; HMDB0051166; HMDB0051189; HMDB0051200; HMDB0051206; HMDB0051211; HMDB0051217; HMDB0051251; HMDB0051258; HMDB0051268; HMDB0051292; HMDB0051319; HMDB0051325; HMDB0051342; HMDB0051358; HMDB0051829; HMDB0051861; HMDB0052583; HMDB0052588; HMDB0052664; HMDB0052673; HMDB0052678; HMDB0052687; HMDB0052715; HMDB0052721; HMDB0052729; HMDB0052777; HMDB0052804; HMDB0052818; HMDB0053011; HMDB0053018; HMDB0053089; HMDB0053094; HMDB0053102; HMDB0053135; HMDB0053141; HMDB0053154; HMDB0053213; HMDB0053224; HMDB0053429; HMDB0053470; HMDB0053477; HMDB0053482; HMDB0053507; HMDB0053513; HMDB0053519; HMDB0053544; HMDB0053556; HMDB0053568; HMDB0053573; HMDB0053580; HMDB0053591; HMDB0053597; HMDB0053603; HMDB0053621; HMDB0053771; HMDB0053783; HMDB0053798;			

				HMDB0053804; HMDB0053837; HMDB0053842; HMDB0053848; HMDB0053865; HMDB0053870; HMDB0053876; HMDB0053881; HMDB0053910; HMDB0053932; HMDB0053953; HMDB0054054; HMDB0054114; HMDB0054119; HMDB0054125; HMDB0054140; HMDB0054179; HMDB0054199; HMDB0054205; HMDB0054237; HMDB0054277; HMDB0054507; HMDB0054535; HMDB0054577; HMDB0054586; HMDB0054595; HMDB0054604; HMDB0054665; HMDB0054713; HMDB0054718; HMDB0054726; HMDB0054735; HMDB0054750; HMDB0054779; HMDB0054796; HMDB0054804; HMDB0054925; HMDB0054930; HMDB0054937; HMDB0054984; HMDB0054992; HMDB0054999; HMDB0055046; HMDB0055230; HMDB0055271; HMDB0055291; HMDB0055385; HMDB0055426; HMDB0055437; HMDB0055478; HMDB0055554; HMDB0055583; HMDB0055588; HMDB0055592; HMDB0055621; HMDB0055698; HMDB0055701; HMDB10525; HMDB10542; HMDB44443;			

				HMDB44465; HMDB44470; HMDB44605; HMDB44610; HMDB44632; HMDB45206; HMDB45285; HMDB45368; HMDB45389; HMDB45394; HMDB45420; HMDB45440; HMDB45446; HMDB46125; HMDB46175; HMDB46225; HMDB48889; HMDB48894; HMDB48910; HMDB49020; HMDB49343; HMDB49469; HMDB49484; HMDB49489; HMDB49530; HMDB49544; HMDB49550; HMDB49610; HMDB49615; HMDB49630; HMDB49649; HMDB49655; HMDB49663; HMDB49669; HMDB49959; HMDB50079; HMDB50093; HMDB50098; HMDB50137; HMDB50150; HMDB50156; HMDB50213; HMDB50218; HMDB50232; HMDB50250; HMDB50256; HMDB50263; HMDB50269; HMDB50621; HMDB50676; HMDB50731; HMDB50754; HMDB50767; HMDB50772; HMDB50790; HMDB50802; HMDB50808; HMDB50826; HMDB50837; HMDB50844;			

				HMDB51047; HMDB51065; HMDB51092; HMDB51098; HMDB51149; HMDB51154; HMDB51166; HMDB51189; HMDB51200; HMDB51206; HMDB51211; HMDB51217; HMDB51251; HMDB51258; HMDB51268; HMDB51292; HMDB51319; HMDB51325; HMDB51342; HMDB51358; HMDB51829; HMDB51861; HMDB52583; HMDB52588; HMDB52664; HMDB52673; HMDB52678; HMDB52687; HMDB52715; HMDB52721; HMDB52729; HMDB52777; HMDB52804; HMDB52818; HMDB53011; HMDB53018; HMDB53089; HMDB53094; HMDB53102; HMDB53135; HMDB53141; HMDB53154; HMDB53213; HMDB53224; HMDB53429; HMDB53470; HMDB53477; HMDB53482; HMDB53507; HMDB53513; HMDB53519; HMDB53544; HMDB53556; HMDB53568; HMDB53573; HMDB53580; HMDB53591; HMDB53597; HMDB53603; HMDB53621;			

				HMDB53771; HMDB53783; HMDB53798; HMDB53804; HMDB53837; HMDB53842; HMDB53848; HMDB53865; HMDB53870; HMDB53876; HMDB53881; HMDB53910; HMDB53932; HMDB53953; HMDB54054; HMDB54114; HMDB54119; HMDB54125; HMDB54140; HMDB54179; HMDB54199; HMDB54205; HMDB54237; HMDB54277; HMDB54507; HMDB54535; HMDB54577; HMDB54586; HMDB54595; HMDB54604; HMDB54665; HMDB54713; HMDB54718; HMDB54726; HMDB54735; HMDB54750; HMDB54779; HMDB54796; HMDB54804; HMDB54925; HMDB54930; HMDB54937; HMDB54984; HMDB54992; HMDB54999; HMDB55046; HMDB55230; HMDB55271; HMDB55291; HMDB55385; HMDB55426; HMDB55437; HMDB55478; HMDB55554; HMDB55583; HMDB55588; HMDB55592; HMDB55621; HMDB55698; HMDB55701			

1378	962,4924803	16069,97547	CDP-DG(18:2(9Z,11Z)/a-15:0)	HMDB0116048; HMDB0116055; HMDB0116080; HMDB0116205	C45H79N3O15P2	-H(-)	83
1379	966,6003101	8429,14581	Trihexosylceramide (d18:1/12:0)	C04737; HMDB0004877; HMDB04877	C48H89NO18	-H(-)	100
1380	969,2806033	6323,767155	Mycothione	C11502	C34H58N4O24S2	-H(-)	100
1381	973,7286548	7004,157233	TG(20:4(5Z,8Z,11Z,14Z)/20:4(5Z,8Z,11Z,14Z)/22:6(4Z,7Z,10Z,13Z,16Z,19Z))	HMDB0010532; HMDB0010549; HMDB0010557; HMDB0051353; HMDB0051387; HMDB0052829; HMDB0053165; HMDB0053235; HMDB0053243; HMDB0053248; HMDB0053975; HMDB0053997; HMDB0054261; HMDB0054296; HMDB0054301; HMDB0054306; HMDB0054316; HMDB0054320; HMDB0054326; HMDB0054863; HMDB0054879; HMDB0054895; HMDB0055043; HMDB0055065; HMDB0055087; HMDB0055099; HMDB0055101; HMDB0055106; HMDB0055113; HMDB0055120; HMDB0055127; HMDB0055134; HMDB0055307;	C65H98O6	-H(-)	100

				HMDB0055342; HMDB0055348; HMDB0055487; HMDB0055492; HMDB0055522; HMDB0055634; HMDB0055647; HMDB0055664; HMDB0055668; HMDB0055672; HMDB0055676; HMDB0055735; HMDB0055759; HMDB0055762; HMDB0055769; HMDB0055786; HMDB0055853; HMDB0055876; HMDB10532; HMDB10549; HMDB10557; HMDB51353; HMDB51387; HMDB52829; HMDB53165; HMDB53235; HMDB53243; HMDB53248; HMDB53975; HMDB53997; HMDB54261; HMDB54296; HMDB54301; HMDB54306; HMDB54316; HMDB54320; HMDB54326; HMDB54863; HMDB54879; HMDB54895; HMDB55043; HMDB55065; HMDB55087; HMDB55099; HMDB55101; HMDB55106; HMDB55113; HMDB55120; HMDB55127; HMDB55134; HMDB55307; HMDB55342; HMDB55348; HMDB55487; HMDB55492; HMDB55522; HMDB55634; HMDB55647; HMDB55664; HMDB55668;			

				HMDB55672; HMDB55676; HMDB55735; HMDB55759; HMDB55762; HMDB55769; HMDB55786; HMDB55853; HMDB55876			
1382	975,8757429	6372,654002	TG(22:0/22:6(4Z,7Z,10Z,13Z,16Z,19Z)/o-18:0)	HMDB0046980; HMDB0047004; HMDB0051798; HMDB0051883; HMDB0051910; HMDB0051915; HMDB0052348; HMDB0052393; HMDB0054560; HMDB0054632; HMDB0054828; HMDB0055020; HMDB0055744; HMDB0055845; HMDB0055904; HMDB46980; HMDB47004; HMDB51798; HMDB51883; HMDB51910; HMDB51915; HMDB52348; HMDB52393; HMDB54560; HMDB54632; HMDB54828; HMDB55020; HMDB55744; HMDB55845; HMDB55904	C65H116O5	-H(-)	100
1383	976,3071226	6053,7908	Tetradecanoyl-CoA	C02593; CHEBI:15532; HMDB0001521; HMDB0112244; HMDB01521; HMDB06517	C35H62N7O17P3S	-H(-)	100
1384	992,184723	5680,303298	Biotinyl-CoA	C01894	C31H50N9O18P3S2	-H(-)	100
1385	994,5544411	8370,23105	CDP-DG(a-13:0/i-22:0)	HMDB0116078; HMDB0116094; HMDB0116109; HMDB0116123; HMDB0116185; HMDB0116191;	C47H87N3O15P2	-H(-)	100

				HMDB0116202; HMDB0116219; HMDB0116236; HMDB0116253; HMDB0116262; HMDB0116270; HMDB0116287; HMDB0116297; HMDB0116304; HMDB0116320; HMDB0116331; HMDB0116337			
1386	998,4921631	7432,130381	CDP-DG(16:1(9Z)/20:4(5Z,8Z,11Z,14Z))	HMDB0115953; HMDB0115970; HMDB0115971; HMDB0115977; HMDB0115978; HMDB0115988	C48H79N3O15P2	-H(-)	100
1387	1005,428907	6513,935389	Oxytocin	C00746; HMDB0002865; HMDB02865	C43H66N12O12S2	-H(-)	100
1388	1007,806926	7412,459698	TG(20:0/22:5(4Z,7Z,10Z,13Z,16Z)/22:6(4Z,7Z,10Z,13Z,16Z,19Z))	HMDB0046073; HMDB0046203; HMDB0046223; HMDB0046228; HMDB0046929; HMDB0046977; HMDB0050716; HMDB0050729; HMDB0050734; HMDB0050824; HMDB0050829; HMDB0050842; HMDB0051245; HMDB0051256; HMDB0051381; HMDB0051746; HMDB0051795; HMDB0051848; HMDB0051859; HMDB0051864; HMDB0051880; HMDB0051890; HMDB0051896; HMDB0052315; HMDB0052345; HMDB0052375; HMDB0053542;	C67H108O6	-H(-)	100

				HMDB0053547; HMDB0053554; HMDB0053619; HMDB0053903; HMDB0053908; HMDB0053991; HMDB0054164; HMDB0054235; HMDB0054240; HMDB0054255; HMDB0054310; HMDB0054469; HMDB0054529; HMDB0054533; HMDB0054538; HMDB0054557; HMDB0054566; HMDB0054593; HMDB0054598; HMDB0054602; HMDB0054616; HMDB0054746; HMDB0054748; HMDB0054794; HMDB0054799; HMDB0054802; HMDB0054825; HMDB0054947; HMDB0054997; HMDB0055002; HMDB0055017; HMDB0055072; HMDB0055445; HMDB0055604; HMDB0055638; HMDB0055707; HMDB0055738; HMDB0055741; HMDB0055817; HMDB0055837; HMDB46073; HMDB46203; HMDB46223; HMDB46228; HMDB46929; HMDB46977; HMDB50716; HMDB50729; HMDB50734; HMDB50824; HMDB50829; HMDB50842; HMDB51245; HMDB51256; HMDB51381; HMDB51746; HMDB51795; HMDB51848; HMDB51859; HMDB51864;			

				HMDB51880; HMDB51890; HMDB51896; HMDB52315; HMDB52345; HMDB52375; HMDB53542; HMDB53547; HMDB53554; HMDB53619; HMDB53903; HMDB53908; HMDB53991; HMDB54164; HMDB54235; HMDB54240; HMDB54255; HMDB54310; HMDB54469; HMDB54529; HMDB54533; HMDB54538; HMDB54557; HMDB54566; HMDB54593; HMDB54598; HMDB54602; HMDB54616; HMDB54746; HMDB54748; HMDB54794; HMDB54799; HMDB54802; HMDB54825; HMDB54947; HMDB54997; HMDB55002; HMDB55017; HMDB55072; HMDB55445; HMDB55604; HMDB55638; HMDB55707; HMDB55738; HMDB55741; HMDB55817; HMDB55837			
1389	1017,450579	6972,29157	PIP2(16:0/20:4(5Z,8Z,11Z,14Z))	C00626; HMDB0010043; HMDB0010044; HMDB0010078; HMDB0010079; HMDB0010091; HMDB0010092; HMDB0010102; HMDB0010109;	C45H81O19P3	-H(-)	100

				HMDB0010110; HMDB0010112; HMDB0010113; HMDB0010132; HMDB0010136; HMDB10043; HMDB10044; HMDB10078; HMDB10079; HMDB10091; HMDB10092; HMDB10102; HMDB10109; HMDB10110; HMDB10112; HMDB10113; HMDB10132; HMDB10136			
1390	1019,90223	6100,757326	TG(18:0/24:0/22:5(4Z,7Z,10Z,13Z,16Z))	HMDB0044849; HMDB0044854; HMDB0045064; HMDB0045246; HMDB0045265; HMDB0045400; HMDB0045625; HMDB0045630; HMDB0045655; HMDB0045832; HMDB0045856; HMDB0045862; HMDB0045981; HMDB0046032; HMDB0046050; HMDB0046137; HMDB0046155; HMDB0046180; HMDB0046373; HMDB0046378; HMDB0046402; HMDB0046547; HMDB0046571; HMDB0046595; HMDB0046601; HMDB0046625; HMDB0046721; HMDB0046739; HMDB0046763; HMDB0046769; HMDB0046787; HMDB0046865; HMDB0046889; HMDB0046906; HMDB0047093; HMDB0047098; HMDB0047121; HMDB0047236; HMDB0047260;	C67H120O6	-H(-)	97

				HMDB0047282; HMDB0047288; HMDB0047304; HMDB0047335; HMDB0047403; HMDB0047419; HMDB0047425; HMDB0047448; HMDB0047466; HMDB0047495; HMDB0047502; HMDB0047512; HMDB0047513; HMDB0047571; HMDB0047588; HMDB0047610; HMDB0049210; HMDB0049832; HMDB0050405; HMDB0050422; HMDB0050428; HMDB0050531; HMDB0050567; HMDB0050573; HMDB0050645; HMDB0050689; HMDB0050967; HMDB0050982; HMDB0051069; HMDB0051104; HMDB0051484; HMDB0051499; HMDB0051505; HMDB0051521; HMDB0051612; HMDB0051634; HMDB0051649; HMDB0051656; HMDB0051681; HMDB0051704; HMDB0051714; HMDB0051752; HMDB0051800; HMDB0051972; HMDB0051986; HMDB0051992; HMDB0052007; HMDB0052097; HMDB0052127; HMDB0052134; HMDB0052163; HMDB0052192; HMDB0052238; HMDB0052611; HMDB0052933; HMDB0053343; HMDB0053436; HMDB0053446; HMDB0053715; HMDB0054404;			

				HMDB0054451; HMDB44849; HMDB44854; HMDB45064; HMDB45246; HMDB45265; HMDB45400; HMDB45625; HMDB45630; HMDB45655; HMDB45832; HMDB45856; HMDB45862; HMDB45981; HMDB46032; HMDB46050; HMDB46137; HMDB46155; HMDB46180; HMDB46373; HMDB46378; HMDB46402; HMDB46547; HMDB46571; HMDB46595; HMDB46601; HMDB46625; HMDB46721; HMDB46739; HMDB46763; HMDB46769; HMDB46787; HMDB46865; HMDB46889; HMDB46906; HMDB47093; HMDB47098; HMDB47121; HMDB47236; HMDB47260; HMDB47282; HMDB47288; HMDB47304; HMDB47335; HMDB47403; HMDB47419; HMDB47425; HMDB47448; HMDB47466; HMDB47495; HMDB47502; HMDB47512; HMDB47513; HMDB47571; HMDB47588; HMDB47610; HMDB49210; HMDB49832; HMDB50405; HMDB50422;			

				HMDB50428; HMDB50531; HMDB50567; HMDB50573; HMDB50645; HMDB50689; HMDB50967; HMDB50982; HMDB51069; HMDB51104; HMDB51484; HMDB51499; HMDB51505; HMDB51521; HMDB51612; HMDB51634; HMDB51649; HMDB51656; HMDB51681; HMDB51704; HMDB51714; HMDB51752; HMDB51800; HMDB51972; HMDB51986; HMDB51992; HMDB52007; HMDB52097; HMDB52127; HMDB52134; HMDB52163; HMDB52192; HMDB52238; HMDB52611; HMDB52933; HMDB53343; HMDB53436; HMDB53446; HMDB53715; HMDB54404; HMDB54451			
1391	1033,523025	6886,66747	Asparagoside F	HMDB0029321; HMDB29321	C50H82O22	-H(-)	100
1392	1037,462845	6407,876918	Mabioside E	HMDB0040654; HMDB40654	C48H78O22S	-H(-)	100
1393	1041,4837	6163,870008	beta-D-	C04819	C42H74N8	-H(-)	100

	36		Galactosyl-beta-1,4-N-acetyl-D-glucosaminylglycopeptide		O22		
1394	1047,499191	6791,649686	PIP2(16:0/22:3(10Z,13Z,16Z))	C00626; HMDB0010046; HMDB0010068; HMDB0010069; HMDB0010104; HMDB0010118; HMDB0010123; HMDB0010128; HMDB0010141; HMDB10046; HMDB10068; HMDB10069; HMDB10104; HMDB10118; HMDB10123; HMDB10128; HMDB10141	C47H87O19P3	-H(-)	95

Ο πίνακας 2 παρουσιάζει μια περιεκτική επισκόπηση των ισοτοπικών μαζών και προτύπων 1394 ιόντων που λαμβάνονται από ενώσεις που προέρχονται από τις βάσεις δεδομένων HMDB και KEGG. Αυτά τα δεδομένα παρέχουν πολύτιμες πληροφορίες σχετικά με τη σύνθεση αυτών των ενώσεων και μπορούν να χρησιμοποιηθούν για διάφορους ερευνητικούς και αναλυτικούς σκοπούς. Οι πηγές βάσης δεδομένων που αναφέρονται, HMDB και KEGG, αναγνωρίζονται ευρέως ως έγκυρες και αξιόπιστες στην επιστημονική κοινότητα.

: Κανονικοποιημένα δεδομένα

tive	dsCode/dsExpCode	dsPert	dsAmount	dsSequence	dsUser1	dsUser2	dsUser3	dsUser4	Internal ID	Imunophenotyp
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-	Sample	0	1519	PV	PV-	NA	NA	B023	MALS

	E8_389_PV061_B023_NEGa					Baseline				
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-E8_389_PV061_B023_NEGb	Sample	0	1520	PV	PV-Baseline	NA	NA	B023	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-B4_354_PV026_A026_NEGa	Sample	0	1521	PV	PV-Baseline	NA	NA	A026	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-B4_354_PV026_A026_NEGb	Sample	0	1522	PV	PV-Baseline	NA	NA	A026	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-E10_405_PV077_C008_NEGa	Sample	0	1523	PV	PV-Baseline	NA	NA	C008	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-E10_405_PV077_C008_NEGb	Sample	0	1524	PV	PV-Baseline	NA	NA	C008	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-F6_374_PV046_B007_NEGa	Sample	0	1525	PV	PV-Baseline	NA	NA	B007	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-F6_374_PV046_B007_NEGb	Sample	0	1526	PV	PV-Baseline	NA	NA	B007	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-C2_339_PV011_A011_NEGa	Sample	0	1527	PV	PV-Baseline	NA	NA	A011	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-C2_339_PV011_A011_NEGb	Sample	0	1528	PV	PV-Baseline	NA	NA	A011	Immunoparalysis

JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-H2_344_PV016_A016_NEGa	Sample	0	1529	PV	PV-Baseline	NA	NA	A016	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-H2_344_PV016_A016_NEGb	Sample	0	1530	PV	PV-Baseline	NA	NA	A016	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-A8_385_PV057_B019_NEGa	Sample	0	1531	PV	PV-Baseline	NA	NA	B019	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-A8_385_PV057_B019_NEGb	Sample	0	1532	PV	PV-Baseline	NA	NA	B019	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-D4_356_PV028_A028_NEGa	Sample	0	1533	PV	PV-Baseline	NA	NA	A028	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-D4_356_PV028_A028_NEGb	Sample	0	1534	PV	PV-Baseline	NA	NA	A028	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-H10_408_PV080_C011_NEGa	Sample	0	1535	PV	PV-Baseline	NA	NA	C011	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-H10_408_PV080_C011_NEGb	Sample	0	1536	PV	PV-Baseline	NA	NA	C011	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-B3_346_PV018_A018_NEGa	Sample	0	1537	PV	PV-Baseline	NA	NA	A018	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-	Sample	0	1538	PV	PV-	NA	NA	A018	MALS

	B3_346_PV018_A018_NEGb					Baseline				
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-B12_418_PV090_C023_NEGa	Sample	0	1539	PV	PV-Baseline	NA	NA	C023	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-B12_418_PV090_C023_NEGb	Sample	0	1540	PV	PV-Baseline	NA	NA	C023	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-H7_384_PV056_B018_NEGa	Sample	0	1541	PV	PV-Baseline	NA	NA	B018	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-H7_384_PV056_B018_NEGb	Sample	0	1542	PV	PV-Baseline	NA	NA	B018	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-A9_393_PV065_B027_NEGa	Sample	0	1545	PV	PV-Baseline	NA	NA	B027	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-A9_393_PV065_B027_NEGb	Sample	0	1546	PV	PV-Baseline	NA	NA	B027	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-C8_387_PV059_B021_NEGa	Sample	0	1547	PV	PV-Baseline	NA	NA	B021	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-C8_387_PV059_B021_NEGb	Sample	0	1548	PV	PV-Baseline	NA	NA	B021	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-C9_395_PV067_B029_NEGa	Sample	0	1551	PV	PV-Baseline	NA	NA	B029	Immunoparalysis

JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-C9_395_PV067_B029_NEGb	Sample	0	1552	PV	PV-Baseline	NA	NA	B029	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-D12_420_PV092_C026_NEGa	Sample	0	1553	PV	PV-Baseline	NA	NA	C026	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-D12_420_PV092_C026_NEGb	Sample	0	1554	PV	PV-Baseline	NA	NA	C026	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-G9_399_PV071_C002_NEGa	Sample	0	1555	PV	PV-Baseline	NA	NA	C002	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-G9_399_PV071_C002_NEGb	Sample	0	1556	PV	PV-Baseline	NA	NA	C002	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-A11_409_PV081_C012_NEGa	Sample	0	1557	PV	PV-Baseline	NA	NA	C012	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-A11_409_PV081_C012_NEGb	Sample	0	1558	PV	PV-Baseline	NA	NA	C012	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-H9_400_PV072_C003_NEGa	Sample	0	1561	PV	PV-Baseline	NA	NA	C003	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-H9_400_PV072_C003_NEGb	Sample	0	1562	PV	PV-Baseline	NA	NA	C003	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-	Sample	0	1563	PV	PV-	NA	NA	A014	Immunoparalysis

	F2_342_PV014_A014_NEGa					Baseline				
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-F2_342_PV014_A014_NEGb	Sample	0	1564	PV	PV-Baseline	NA	NA	A014	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-F3_350_PV022_A022_NEGa	Sample	0	1565	PV	PV-Baseline	NA	NA	A022	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-F3_350_PV022_A022_NEGb	Sample	0	1566	PV	PV-Baseline	NA	NA	A022	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-C6_371_PV043_B001_NEGa	Sample	0	1567	PV	PV-Baseline	NA	NA	B001	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-C6_371_PV043_B001_NEGb	Sample	0	1568	PV	PV-Baseline	NA	NA	B001	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-A2_337_PV009_A009_NEGa	Sample	0	1569	PV	PV-Baseline	NA	NA	A009	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-A2_337_PV009_A009_NEGb	Sample	0	1570	PV	PV-Baseline	NA	NA	A009	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-A4_353_PV025_A025_NEGa	Sample	0	1571	PV	PV-Baseline	NA	NA	A025	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-A4_353_PV025_A025_NEGb	Sample	0	1572	PV	PV-Baseline	NA	NA	A025	MALS

JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-G11_415_PV087_C018_NEGa	Sample	0	1573	PV	PV-Baseline	NA	NA	C018	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-G11_415_PV087_C018_NEGb	Sample	0	1574	PV	PV-Baseline	NA	NA	C018	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-E1_333_PV005_A005_NEGa	Sample	0	1575	PV	PV-Baseline	NA	NA	A005	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-E1_333_PV005_A005_NEGb	Sample	0	1576	PV	PV-Baseline	NA	NA	A005	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-C5_363_PV035_A039_NEGa	Sample	0	1577	PV	PV-Baseline	NA	NA	A039	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-C5_363_PV035_A039_NEGb	Sample	0	1578	PV	PV-Baseline	NA	NA	A039	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-D2_340_PV012_A012_NEGa	Sample	0	1579	PV	PV-Baseline	NA	NA	A012	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-D2_340_PV012_A012_NEGb	Sample	0	1580	PV	PV-Baseline	NA	NA	A012	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-G8_391_PV063_B025_NEGa	Sample	0	1581	PV	PV-Baseline	NA	NA	B025	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-	Sample	0	1582	PV	PV-	NA	NA	B025	Unclassified

	G8_391_PV063_B025_NEGb					Baseline				
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-G4_359_PV031_A034_NEGa	Sample	0	1583	PV	PV-Baseline	NA	NA	A034	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-G4_359_PV031_A034_NEGb	Sample	0	1584	PV	PV-Baseline	NA	NA	A034	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-D5_364_PV036_A040_NEGa	Sample	0	1585	PV	PV-Baseline	NA	NA	A040	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-D5_364_PV036_A040_NEGb	Sample	0	1586	PV	PV-Baseline	NA	NA	A040	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-C12_419_PV091_C024_NEGa	Sample	0	1587	PV	PV-Baseline	NA	NA	C024	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-C12_419_PV091_C024_NEGb	Sample	0	1588	PV	PV-Baseline	NA	NA	C024	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-D10_404_PV076_C007_NEGa	Sample	0	1589	PV	PV-Baseline	NA	NA	C007	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-D10_404_PV076_C007_NEGb	Sample	0	1590	PV	PV-Baseline	NA	NA	C007	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-F4_358_PV030_A030_NEGa	Sample	0	1591	PV	PV-Baseline	NA	NA	A030	Immunoparalysis

JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-F4_358_PV030_A030_NEGb	Sample	0	1592	PV	PV-Baseline	NA	NA	A030	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-D7_380_PV052_B014_NEGa	Sample	0	1593	PV	PV-Baseline	NA	NA	B014	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-D7_380_PV052_B014_NEGb	Sample	0	1594	PV	PV-Baseline	NA	NA	B014	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-D8_388_PV060_B022_NEGa	Sample	0	1595	PV	PV-Baseline	NA	NA	B022	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-D8_388_PV060_B022_NEGb	Sample	0	1596	PV	PV-Baseline	NA	NA	B022	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-B1_330_PV002_A002_NEGa	Sample	0	1597	PV	PV-Baseline	NA	NA	A002	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-B1_330_PV002_A002_NEGb	Sample	0	1598	PV	PV-Baseline	NA	NA	A002	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-D3_348_PV020_A020_NEGa	Sample	0	1599	PV	PV-Baseline	NA	NA	A020	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-D3_348_PV020_A020_NEGb	Sample	0	1600	PV	PV-Baseline	NA	NA	A020	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-	Sample	0	1601	PV	PV-	NA	NA	B012	Unclassified

	B7_378_PV050_B012_NEGa					Baseline				
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-B7_378_PV050_B012_NEGb	Sample	0	1602	PV	PV-Baseline	NA	NA	B012	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-D1_332_PV004_A004_NEGa	Sample	0	1603	PV	PV-Baseline	NA	NA	A004	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-D1_332_PV004_A004_NEGb	Sample	0	1604	PV	PV-Baseline	NA	NA	A004	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-H3_352_PV024_A024_NEGa	Sample	0	1605	PV	PV-Baseline	NA	NA	A024	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-H3_352_PV024_A024_NEGb	Sample	0	1606	PV	PV-Baseline	NA	NA	A024	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-E9_397_PV069_B031_NEGa	Sample	0	1607	PV	PV-Baseline	NA	NA	B031	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-E9_397_PV069_B031_NEGb	Sample	0	1608	PV	PV-Baseline	NA	NA	B031	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-C1_331_PV003_A003_NEGa	Sample	0	1609	PV	PV-Baseline	NA	NA	A003	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-C1_331_PV003_A003_NEGb	Sample	0	1610	PV	PV-Baseline	NA	NA	A003	Unclassified

JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-G10_407_PV079_C010_NEGa	Sample	0	1611	PV	PV-Baseline	NA	NA	C010	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-G10_407_PV079_C010_NEGb	Sample	0	1612	PV	PV-Baseline	NA	NA	C010	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-A6_369_PV041_A072_NEGa	Sample	0	1613	PV	PV-Baseline	NA	NA	A072	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-A6_369_PV041_A072_NEGb	Sample	0	1614	PV	PV-Baseline	NA	NA	A072	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-H4_360_PV032_A035_NEGa	Sample	0	1615	PV	PV-Baseline	NA	NA	A035	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-H4_360_PV032_A035_NEGb	Sample	0	1616	PV	PV-Baseline	NA	NA	A035	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-H11_416_PV088_C021_NEGa	Sample	0	1617	PV	PV-Baseline	NA	NA	C021	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-H11_416_PV088_C021_NEGb	Sample	0	1618	PV	PV-Baseline	NA	NA	C021	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-F8_390_PV062_B024_NEGa	Sample	0	1621	PV	PV-Baseline	NA	NA	B024	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-	Sample	0	1622	PV	PV-	NA	NA	B024	Unclassified

	F8_390_PV062_B024_NEGb					Baseline				
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-B8_386_PV058_B020_NEGa	Sample	0	1623	PV	PV-Baseline	NA	NA	B020	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-B8_386_PV058_B020_NEGb	Sample	0	1624	PV	PV-Baseline	NA	NA	B020	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-A10_401_PV073_C004_NEGa	Sample	0	1625	PV	PV-Baseline	NA	NA	C004	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-A10_401_PV073_C004_NEGb	Sample	0	1626	PV	PV-Baseline	NA	NA	C004	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-E5_365_PV037_A043_NEGa	Sample	0	1627	PV	PV-Baseline	NA	NA	A043	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-E5_365_PV037_A043_NEGb	Sample	0	1628	PV	PV-Baseline	NA	NA	A043	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-B5_362_PV034_A037_NEGa	Sample	0	1629	PV	PV-Baseline	NA	NA	A037	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-B5_362_PV034_A037_NEGb	Sample	0	1630	PV	PV-Baseline	NA	NA	A037	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-C11_411_PV083_C014_NEGa	Sample	0	1631	PV	PV-Baseline	NA	NA	C014	Immunoparalysis

JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-C11_411_PV083_C014_NEGb	Sample	0	1632	PV	PV-Baseline	NA	NA	C014	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-C10_403_PV075_C006_NEGa	Sample	0	1633	PV	PV-Baseline	NA	NA	C006	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-C10_403_PV075_C006_NEGb	Sample	0	1634	PV	PV-Baseline	NA	NA	C006	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-G3_351_PV023_A023_NEGa	Sample	0	1637	PV	PV-Baseline	NA	NA	A023	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-G3_351_PV023_A023_NEGb	Sample	0	1638	PV	PV-Baseline	NA	NA	A023	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-F11_414_PV086_C017_NEGa	Sample	0	1639	PV	PV-Baseline	NA	NA	C017	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-F11_414_PV086_C017_NEGb	Sample	0	1640	PV	PV-Baseline	NA	NA	C017	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-F10_406_PV078_C009_NEGa	Sample	0	1643	PV	PV-Baseline	NA	NA	C009	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-F10_406_PV078_C009_NEGb	Sample	0	1644	PV	PV-Baseline	NA	NA	C009	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-	Sample	0	1645	PV	PV-	NA	NA	A073	Immunoparalysis

	B6_370_PV042_A073_NEGa					Baseline				
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-B6_370_PV042_A073_NEGb	Sample	0	1646	PV	PV-Baseline	NA	NA	A073	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-E7_381_PV053_B015_NEGa	Sample	0	1647	PV	PV-Baseline	NA	NA	B015	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-E7_381_PV053_B015_NEGb	Sample	0	1648	PV	PV-Baseline	NA	NA	B015	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-D6_372_PV044_B002_NEGa	Sample	0	1649	PV	PV-Baseline	NA	NA	B002	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-D6_372_PV044_B002_NEGb	Sample	0	1650	PV	PV-Baseline	NA	NA	B002	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-G7_383_PV055_B017_NEGa	Sample	0	1651	PV	PV-Baseline	NA	NA	B017	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-G7_383_PV055_B017_NEGb	Sample	0	1652	PV	PV-Baseline	NA	NA	B017	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-B2_338_PV010_A010_NEGa	Sample	0	1653	PV	PV-Baseline	NA	NA	A010	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-B2_338_PV010_A010_NEGb	Sample	0	1654	PV	PV-Baseline	NA	NA	A010	Immunoparalysis

JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-D9_396_PV068_B030_NEGa	Sample	0	1655	PV	PV-Baseline	NA	NA	B030	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-D9_396_PV068_B030_NEGb	Sample	0	1656	PV	PV-Baseline	NA	NA	B030	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-G6_375_PV047_B008_NEGa	Sample	0	1657	PV	PV-Baseline	NA	NA	B008	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-G6_375_PV047_B008_NEGb	Sample	0	1658	PV	PV-Baseline	NA	NA	B008	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-C4_355_PV027_A027_NEGa	Sample	0	1659	PV	PV-Baseline	NA	NA	A027	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-C4_355_PV027_A027_NEGb	Sample	0	1660	PV	PV-Baseline	NA	NA	A027	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-B10_402_PV074_C005_NEGa	Sample	0	1661	PV	PV-Baseline	NA	NA	C005	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-B10_402_PV074_C005_NEGb	Sample	0	1662	PV	PV-Baseline	NA	NA	C005	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-A12_417_PV089_C022_NEGa	Sample	0	1663	PV	PV-Baseline	NA	NA	C022	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-	Sample	0	1664	PV	PV-	NA	NA	C022	Immunoparalysis

	A12_417_PV089_C022_NEGb					Baseline				
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-C7_379_PV051_B013_NEGa	Sample	0	1665	PV	PV-Baseline	NA	NA	B013	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-C7_379_PV051_B013_NEGb	Sample	0	1666	PV	PV-Baseline	NA	NA	B013	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-E3_349_PV021_A021_NEGa	Sample	0	1667	PV	PV-Baseline	NA	NA	A021	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-E3_349_PV021_A021_NEGb	Sample	0	1668	PV	PV-Baseline	NA	NA	A021	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-F7_382_PV054_B016_NEGa	Sample	0	1669	PV	PV-Baseline	NA	NA	B016	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-F7_382_PV054_B016_NEGb	Sample	0	1670	PV	PV-Baseline	NA	NA	B016	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-E4_357_PV029_A029_NEGa	Sample	0	1671	PV	PV-Baseline	NA	NA	A029	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-E4_357_PV029_A029_NEGb	Sample	0	1672	PV	PV-Baseline	NA	NA	A029	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-E11_413_PV085_C016_NEGa	Sample	0	1673	PV	PV-Baseline	NA	NA	C016	Immunoparalysis

JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-E11_413_PV085_C016_NEGb	Sample	0	1674	PV	PV-Baseline	NA	NA	C016	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-E2_341_PV013_A013_NEGa	Sample	0	1675	PV	PV-Baseline	NA	NA	A013	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-E2_341_PV013_A013_NEGb	Sample	0	1676	PV	PV-Baseline	NA	NA	A013	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-A3_345_PV017_A017_NEGa	Sample	0	1679	PV	PV-Baseline	NA	NA	A017	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-A3_345_PV017_A017_NEGb	Sample	0	1680	PV	PV-Baseline	NA	NA	A017	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-C3_347_PV019_A019_NEGa	Sample	0	1681	PV	PV-Baseline	NA	NA	A019	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-C3_347_PV019_A019_NEGb	Sample	0	1682	PV	PV-Baseline	NA	NA	A019	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-A5_361_PV033_A036_NEGa	Sample	0	1683	PV	PV-Baseline	NA	NA	A036	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-A5_361_PV033_A036_NEGb	Sample	0	1684	PV	PV-Baseline	NA	NA	A036	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-	Sample	0	1685	PV	PV-	NA	NA	A063	Immunoparalysis

	F5_366_PV038_A063_NEGa					Baseline				
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-F5_366_PV038_A063_NEGb	Sample	0	1686	PV	PV-Baseline	NA	NA	A063	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-E6_373_PV045_B004_NEGa	Sample	0	1687	PV	PV-Baseline	NA	NA	B004	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-E6_373_PV045_B004_NEGb	Sample	0	1688	PV	PV-Baseline	NA	NA	B004	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-D11_412_PV084_C015_NEGa	Sample	0	1689	PV	PV-Baseline	NA	NA	C015	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-D11_412_PV084_C015_NEGb	Sample	0	1690	PV	PV-Baseline	NA	NA	C015	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-G5_367_PV039_A065_NEGa	Sample	0	1691	PV	PV-Baseline	NA	NA	A065	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-G5_367_PV039_A065_NEGb	Sample	0	1692	PV	PV-Baseline	NA	NA	A065	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-B11_410_PV082_C013_NEGa	Sample	0	1693	PV	PV-Baseline	NA	NA	C013	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-B11_410_PV082_C013_NEGb	Sample	0	1694	PV	PV-Baseline	NA	NA	C013	Unclassified

JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-H8_392_PV064_B026_NEGa	Sample	0	1695	PV	PV-Baseline	NA	NA	B026	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-H8_392_PV064_B026_NEGb	Sample	0	1696	PV	PV-Baseline	NA	NA	B026	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-B9_394_PV066_B028_NEGa	Sample	0	1697	PV	PV-Baseline	NA	NA	B028	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-B9_394_PV066_B028_NEGb	Sample	0	1698	PV	PV-Baseline	NA	NA	B028	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-G2_343_PV015_A015_NEGa	Sample	0	1701	PV	PV-Baseline	NA	NA	A015	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P1-G2_343_PV015_A015_NEGb	Sample	0	1702	PV	PV-Baseline	NA	NA	A015	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-A4_445_PV117_F009_NEGa	Sample	0	1703	PV	PV-Baseline	NA	NA	F009	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-A4_445_PV117_F009_NEGb	Sample	0	1704	PV	PV-Baseline	NA	NA	F009	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-D5_456_PV128_F020_NEGa	Sample	0	1705	PV	PV-Baseline	NA	NA	F020	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-	Sample	0	1706	PV	PV-	NA	NA	F020	Immunoparalysis

	D5_456_PV128_F020_NEGb					Baseline				
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-G9_491_PV163_K003_NEGa	Sample	0	1707	PV	PV-Baseline	NA	NA	K003	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-G9_491_PV163_K003_NEGb	Sample	0	1708	PV	PV-Baseline	NA	NA	K003	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-G4_451_PV123_F015_NEGa	Sample	0	1709	PV	PV-Baseline	NA	NA	F015	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-G4_451_PV123_F015_NEGb	Sample	0	1710	PV	PV-Baseline	NA	NA	F015	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-D12_512_PV184_A049_NEGa	Sample	0	1711	PV	PV-Baseline	NA	NA	A049	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-D12_512_PV184_A049_NEGb	Sample	0	1712	PV	PV-Baseline	NA	NA	A049	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-A12_509_PV181_A046_NEGa	Sample	0	1713	PV	PV-Baseline	NA	NA	A046	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-A12_509_PV181_A046_NEGb	Sample	0	1714	PV	PV-Baseline	NA	NA	A046	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-F1_426_PV098_L003_NEGa	Sample	0	1715	PV	PV-Baseline	NA	NA	L003	MALS

JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-F1_426_PV098_L003_NEGb	Sample	0	1716	PV	PV-Baseline	NA	NA	L003	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-G7_475_PV147_I003_NEGa	Sample	0	1719	PV	PV-Baseline	NA	NA	I003	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-G7_475_PV147_I003_NEGb	Sample	0	1720	PV	PV-Baseline	NA	NA	I003	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-B2_430_PV102_E002_NEGa	Sample	0	1723	PV	PV-Baseline	NA	NA	E002	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-B2_430_PV102_E002_NEGb	Sample	0	1724	PV	PV-Baseline	NA	NA	E002	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-C10_495_PV167_K007_NEGa	Sample	0	1725	PV	PV-Baseline	NA	NA	K007	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-C10_495_PV167_K007_NEGb	Sample	0	1726	PV	PV-Baseline	NA	NA	K007	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-A9_485_PV157_N002_NEGa	Sample	0	1727	PV	PV-Baseline	NA	NA	N002	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-A9_485_PV157_N002_NEGb	Sample	0	1728	PV	PV-Baseline	NA	NA	N002	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-	Sample	0	1729	PV	PV-	NA	NA	G001	MALS

	A6_461_PV133_G001_NEGa					Baseline				
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-A6_461_PV133_G001_NEGb	Sample	0	1730	PV	PV-Baseline	NA	NA	G001	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-C6_463_PV135_G007_NEGa	Sample	0	1731	PV	PV-Baseline	NA	NA	G007	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-C6_463_PV135_G007_NEGb	Sample	0	1732	PV	PV-Baseline	NA	NA	G007	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-E10_497_PV169_K009_NEGa	Sample	0	1733	PV	PV-Baseline	NA	NA	K009	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-E10_497_PV169_K009_NEGb	Sample	0	1734	PV	PV-Baseline	NA	NA	K009	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-D11_504_PV176_A038_NEGa	Sample	0	1735	PV	PV-Baseline	NA	NA	A038	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-D11_504_PV176_A038_NEGb	Sample	0	1736	PV	PV-Baseline	NA	NA	A038	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-A1_421_PV093_D001_NEGa	Sample	0	1737	PV	PV-Baseline	NA	NA	D001	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-A1_421_PV093_D001_NEGb	Sample	0	1738	PV	PV-Baseline	NA	NA	D001	Unclassified

JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-B10_494_PV166_K006_NEGa	Sample	0	1739	PV	PV-Baseline	NA	NA	K006	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-B10_494_PV166_K006_NEGb	Sample	0	1740	PV	PV-Baseline	NA	NA	K006	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-H10_500_PV172_K015_NEGa	Sample	0	1741	PV	PV-Baseline	NA	NA	K015	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-H10_500_PV172_K015_NEGb	Sample	0	1742	PV	PV-Baseline	NA	NA	K015	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-B7_470_PV142_H005_NEGa	Sample	0	1743	PV	PV-Baseline	NA	NA	H005	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-B7_470_PV142_H005_NEGb	Sample	0	1744	PV	PV-Baseline	NA	NA	H005	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-B8_478_PV150_I007_NEGa	Sample	0	1745	PV	PV-Baseline	NA	NA	I007	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-B8_478_PV150_I007_NEGb	Sample	0	1746	PV	PV-Baseline	NA	NA	I007	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-G6_467_PV139_H002_NEGa	Sample	0	1747	PV	PV-Baseline	NA	NA	H002	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-	Sample	0	1748	PV	PV-	NA	NA	H002	Immunoparalysis

	G6_467_PV139_H002_NEGb					Baseline				
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-D10_496_PV168_K008_NEGa	Sample	0	1749	PV	PV-Baseline	NA	NA	K008	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-D10_496_PV168_K008_NEGb	Sample	0	1750	PV	PV-Baseline	NA	NA	K008	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-C8_479_PV151_I008_NEGa	Sample	0	1751	PV	PV-Baseline	NA	NA	I008	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-C8_479_PV151_I008_NEGb	Sample	0	1752	PV	PV-Baseline	NA	NA	I008	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-D2_432_PV104_E004_NEGa	Sample	0	1753	PV	PV-Baseline	NA	NA	E004	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-D2_432_PV104_E004_NEGb	Sample	0	1754	PV	PV-Baseline	NA	NA	E004	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-G11_507_PV179_A044_NEGa	Sample	0	1755	PV	PV-Baseline	NA	NA	A044	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-G11_507_PV179_A044_NEGb	Sample	0	1756	PV	PV-Baseline	NA	NA	A044	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-G5_459_PV131_F025_NEGa	Sample	0	1757	PV	PV-Baseline	NA	NA	F025	Immunoparalysis

JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-G5_459_PV131_F025_NEGb	Sample	0	1758	PV	PV-Baseline	NA	NA	F025	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-F4_450_PV122_F014_NEGa	Sample	0	1759	PV	PV-Baseline	NA	NA	F014	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-F4_450_PV122_F014_NEGb	Sample	0	1760	PV	PV-Baseline	NA	NA	F014	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-C12_511_PV183_A048_NEGa	Sample	0	1761	PV	PV-Baseline	NA	NA	A048	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-C12_511_PV183_A048_NEGb	Sample	0	1762	PV	PV-Baseline	NA	NA	A048	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-H2_436_PV108_E008_NEGa	Sample	0	1763	PV	PV-Baseline	NA	NA	E008	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-H2_436_PV108_E008_NEGb	Sample	0	1764	PV	PV-Baseline	NA	NA	E008	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-B6_462_PV134_G006_NEGa	Sample	0	1765	PV	PV-Baseline	NA	NA	G006	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-B6_462_PV134_G006_NEGb	Sample	0	1766	PV	PV-Baseline	NA	NA	G006	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-	Sample	0	1767	PV	PV-	NA	NA	K002	Immunoparalysis

	F9_490_PV162_K002_NEGa					Baseline				
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-F9_490_PV162_K002_NEGb	Sample	0	1768	PV	PV-Baseline	NA	NA	K002	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-H3_444_PV116_F008_NEGa	Sample	0	1769	PV	PV-Baseline	NA	NA	F008	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-H3_444_PV116_F008_NEGb	Sample	0	1770	PV	PV-Baseline	NA	NA	F008	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-E2_433_PV105_E005_NEGa	Sample	0	1771	PV	PV-Baseline	NA	NA	E005	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-E2_433_PV105_E005_NEGb	Sample	0	1772	PV	PV-Baseline	NA	NA	E005	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-F3_442_PV114_F006_NEGa	Sample	0	1773	PV	PV-Baseline	NA	NA	F006	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-F3_442_PV114_F006_NEGb	Sample	0	1774	PV	PV-Baseline	NA	NA	F006	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-B12_510_PV182_A047_NEGa	Sample	0	1775	PV	PV-Baseline	NA	NA	A047	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-B12_510_PV182_A047_NEGb	Sample	0	1776	PV	PV-Baseline	NA	NA	A047	Immunoparalysis

JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-G3_443_PV115_F007_NEGa	Sample	0	1777	PV	PV-Baseline	NA	NA	F007	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-G3_443_PV115_F007_NEGb	Sample	0	1778	PV	PV-Baseline	NA	NA	F007	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-A3_437_PV109_F001_NEGa	Sample	0	1779	PV	PV-Baseline	NA	NA	F001	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-A3_437_PV109_F001_NEGb	Sample	0	1780	PV	PV-Baseline	NA	NA	F001	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-C9_487_PV159_N011_NEGa	Sample	0	1781	PV	PV-Baseline	NA	NA	N011	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-C9_487_PV159_N011_NEGb	Sample	0	1782	PV	PV-Baseline	NA	NA	N011	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-C7_471_PV143_H006_NEGa	Sample	0	1783	PV	PV-Baseline	NA	NA	H006	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-C7_471_PV143_H006_NEGb	Sample	0	1784	PV	PV-Baseline	NA	NA	H006	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-E5_457_PV129_F021_NEGa	Sample	0	1787	PV	PV-Baseline	NA	NA	F021	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-	Sample	0	1788	PV	PV-	NA	NA	F021	Unclassified

	E5_457_PV129_F021_NEGb					Baseline				
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-B1_422_PV094_D002_NEGa	Sample	0	1791	PV	PV-Baseline	NA	NA	D002	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-B1_422_PV094_D002_NEGb	Sample	0	1792	PV	PV-Baseline	NA	NA	D002	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-H11_508_PV180_A045_NEGa	Sample	0	1793	PV	PV-Baseline	NA	NA	A045	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-H11_508_PV180_A045_NEGb	Sample	0	1794	PV	PV-Baseline	NA	NA	A045	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-F10_498_PV170_K010_NEGa	Sample	0	1795	PV	PV-Baseline	NA	NA	K010	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-F10_498_PV170_K010_NEGb	Sample	0	1796	PV	PV-Baseline	NA	NA	K010	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-H6_468_PV140_H003_NEGa	Sample	0	1797	PV	PV-Baseline	NA	NA	H003	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-H6_468_PV140_H003_NEGb	Sample	0	1798	PV	PV-Baseline	NA	NA	H003	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-A5_453_PV125_F017_NEGa	Sample	0	1799	PV	PV-Baseline	NA	NA	F017	Immunoparalysis

JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-A5_453_PV125_F017_NEGb	Sample	0	1800	PV	PV-Baseline	NA	NA	F017	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-C11_503_PV175_A033_NEGa	Sample	0	1801	PV	PV-Baseline	NA	NA	A033	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-C11_503_PV175_A033_NEGb	Sample	0	1802	PV	PV-Baseline	NA	NA	A033	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-A2_429_PV101_E001_NEGa	Sample	0	1803	PV	PV-Baseline	NA	NA	E001	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-A2_429_PV101_E001_NEGb	Sample	0	1804	PV	PV-Baseline	NA	NA	E001	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-G1_427_PV099_L004_NEGa	Sample	0	1805	PV	PV-Baseline	NA	NA	L004	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-G1_427_PV099_L004_NEGb	Sample	0	1806	PV	PV-Baseline	NA	NA	L004	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-H1_428_PV100_L005_NEGa	Sample	0	1809	PV	PV-Baseline	NA	NA	L005	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-H1_428_PV100_L005_NEGb	Sample	0	1810	PV	PV-Baseline	NA	NA	L005	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-	Sample	0	1811	PV	PV-	NA	NA	D004	Unclassified

	C1_423_PV095_D004_NEGa					Baseline				
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-C1_423_PV095_D004_NEGb	Sample	0	1812	PV	PV-Baseline	NA	NA	D004	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-C4_447_PV119_F011_NEGa	Sample	0	1813	PV	PV-Baseline	NA	NA	F011	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-C4_447_PV119_F011_NEGb	Sample	0	1814	PV	PV-Baseline	NA	NA	F011	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-G10_499_PV171_K014_NEGa	Sample	0	1815	PV	PV-Baseline	NA	NA	K014	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-G10_499_PV171_K014_NEGb	Sample	0	1816	PV	PV-Baseline	NA	NA	K014	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-C2_431_PV103_E003_NEGa	Sample	0	1817	PV	PV-Baseline	NA	NA	E003	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-C2_431_PV103_E003_NEGb	Sample	0	1818	PV	PV-Baseline	NA	NA	E003	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-D4_448_PV120_F012_NEGa	Sample	0	1819	PV	PV-Baseline	NA	NA	F012	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-D4_448_PV120_F012_NEGb	Sample	0	1820	PV	PV-Baseline	NA	NA	F012	Immunoparalysis

JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-A10_493_PV165_K005_NEGa	Sample	0	1821	PV	PV-Baseline	NA	NA	K005	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-A10_493_PV165_K005_NEGb	Sample	0	1822	PV	PV-Baseline	NA	NA	K005	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-E1_425_PV097_L002_NEGa	Sample	0	1823	PV	PV-Baseline	NA	NA	L002	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-E1_425_PV097_L002_NEGb	Sample	0	1824	PV	PV-Baseline	NA	NA	L002	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-A11_501_PV173_A031_NEGa	Sample	0	1825	PV	PV-Baseline	NA	NA	A031	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-A11_501_PV173_A031_NEGb	Sample	0	1826	PV	PV-Baseline	NA	NA	A031	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-E3_441_PV113_F005_NEGa	Sample	0	1827	PV	PV-Baseline	NA	NA	F005	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-E3_441_PV113_F005_NEGb	Sample	0	1828	PV	PV-Baseline	NA	NA	F005	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-D1_424_PV096_L001_NEGa	Sample	0	1829	PV	PV-Baseline	NA	NA	L001	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-	Sample	0	1830	PV	PV-	NA	NA	L001	Immunoparalysis

	D1_424_PV096_L001_NEGb					Baseline				
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-H7_476_PV148_I004_NEGa	Sample	0	1831	PV	PV-Baseline	NA	NA	I004	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-H7_476_PV148_I004_NEGb	Sample	0	1832	PV	PV-Baseline	NA	NA	I004	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-F7_474_PV146_I002_NEGa	Sample	0	1833	PV	PV-Baseline	NA	NA	I002	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-F7_474_PV146_I002_NEGb	Sample	0	1834	PV	PV-Baseline	NA	NA	I002	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-F5_458_PV130_F022_NEGa	Sample	0	1835	PV	PV-Baseline	NA	NA	F022	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-F5_458_PV130_F022_NEGb	Sample	0	1836	PV	PV-Baseline	NA	NA	F022	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-B4_446_PV118_F010_NEGa	Sample	0	1837	PV	PV-Baseline	NA	NA	F010	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-B4_446_PV118_F010_NEGb	Sample	0	1838	PV	PV-Baseline	NA	NA	F010	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-F2_434_PV106_E006_NEGa	Sample	0	1839	PV	PV-Baseline	NA	NA	E006	Unclassified

JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-F2_434_PV106_E006_NEGb	Sample	0	1840	PV	PV-Baseline	NA	NA	E006	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-D9_488_PV160_N012_NEGa	Sample	0	1841	PV	PV-Baseline	NA	NA	N012	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-D9_488_PV160_N012_NEGb	Sample	0	1842	PV	PV-Baseline	NA	NA	N012	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-F11_506_PV178_A042_NEGa	Sample	0	1843	PV	PV-Baseline	NA	NA	A042	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-F11_506_PV178_A042_NEGb	Sample	0	1844	PV	PV-Baseline	NA	NA	A042	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-E11_505_PV177_A041_NEGa	Sample	0	1845	PV	PV-Baseline	NA	NA	A041	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-E11_505_PV177_A041_NEGb	Sample	0	1846	PV	PV-Baseline	NA	NA	A041	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-B5_454_PV126_F018_NEGa	Sample	0	1847	PV	PV-Baseline	NA	NA	F018	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-B5_454_PV126_F018_NEGb	Sample	0	1848	PV	PV-Baseline	NA	NA	F018	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-	Sample	0	1849	PV	PV-	NA	NA	I005	Immunoparalysis

	A8_477_PV149_I005_NEGa					Baseline				
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-A8_477_PV149_I005_NEGb	Sample	0	1850	PV	PV-Baseline	NA	NA	I005	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-E4_449_PV121_F013_NEGa	Sample	0	1851	PV	PV-Baseline	NA	NA	F013	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-E4_449_PV121_F013_NEGb	Sample	0	1852	PV	PV-Baseline	NA	NA	F013	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-E6_465_PV137_J001_NEGa	Sample	0	1853	PV	PV-Baseline	NA	NA	J001	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-E6_465_PV137_J001_NEGb	Sample	0	1854	PV	PV-Baseline	NA	NA	J001	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-F6_466_PV138_H001_NEGa	Sample	0	1855	PV	PV-Baseline	NA	NA	H001	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-F6_466_PV138_H001_NEGb	Sample	0	1856	PV	PV-Baseline	NA	NA	H001	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-G8_483_PV155_M007_NEGa	Sample	0	1857	PV	PV-Baseline	NA	NA	M007	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-G8_483_PV155_M007_NEGb	Sample	0	1858	PV	PV-Baseline	NA	NA	M007	Immunoparalysis

JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-B9_486_PV158_N004_NEGa	Sample	0	1859	PV	PV-Baseline	NA	NA	N004	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-B9_486_PV158_N004_NEGb	Sample	0	1860	PV	PV-Baseline	NA	NA	N004	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-E7_473_PV145_I001_NEGa	Sample	0	1861	PV	PV-Baseline	NA	NA	I001	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-E7_473_PV145_I001_NEGb	Sample	0	1862	PV	PV-Baseline	NA	NA	I001	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-D6_464_PV136_G008_NEGa	Sample	0	1863	PV	PV-Baseline	NA	NA	G008	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-D6_464_PV136_G008_NEGb	Sample	0	1864	PV	PV-Baseline	NA	NA	G008	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-H9_492_PV164_K004_NEGa	Sample	0	1865	PV	PV-Baseline	NA	NA	K004	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-H9_492_PV164_K004_NEGb	Sample	0	1866	PV	PV-Baseline	NA	NA	K004	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-C5_455_PV127_F019_NEGa	Sample	0	1867	PV	PV-Baseline	NA	NA	F019	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-	Sample	0	1868	PV	PV-	NA	NA	F019	Immunoparalysis

	C5_455_PV127_F019_NEGb					Baseline				
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-H8_484_PV156_M008_NEGa	Sample	0	1869	PV	PV-Baseline	NA	NA	M008	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-H8_484_PV156_M008_NEGb	Sample	0	1870	PV	PV-Baseline	NA	NA	M008	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-H5_460_PV132_F026_NEGa	Sample	0	1871	PV	PV-Baseline	NA	NA	F026	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-H5_460_PV132_F026_NEGb	Sample	0	1872	PV	PV-Baseline	NA	NA	F026	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-A7_469_PV141_H004_NEGa	Sample	0	1873	PV	PV-Baseline	NA	NA	H004	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-A7_469_PV141_H004_NEGb	Sample	0	1874	PV	PV-Baseline	NA	NA	H004	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-G2_435_PV107_E007_NEGa	Sample	0	1875	PV	PV-Baseline	NA	NA	E007	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-G2_435_PV107_E007_NEGb	Sample	0	1876	PV	PV-Baseline	NA	NA	E007	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-D7_472_PV144_H007_NEGa	Sample	0	1877	PV	PV-Baseline	NA	NA	H007	Unclassified

JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-D7_472_PV144_H007_NEGb	Sample	0	1878	PV	PV-Baseline	NA	NA	H007	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-D8_480_PV152_I009_NEGa	Sample	0	1879	PV	PV-Baseline	NA	NA	I009	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-D8_480_PV152_I009_NEGb	Sample	0	1880	PV	PV-Baseline	NA	NA	I009	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-B11_502_PV174_A032_NEGa	Sample	0	1883	PV	PV-Baseline	NA	NA	A032	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-B11_502_PV174_A032_NEGb	Sample	0	1884	PV	PV-Baseline	NA	NA	A032	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-H4_452_PV124_F016_NEGa	Sample	0	1885	PV	PV-Baseline	NA	NA	F016	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P2-H4_452_PV124_F016_NEGb	Sample	0	1886	PV	PV-Baseline	NA	NA	F016	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-C3_531_PV203_F021_2_NEGa	Sample	0	1889	PV	PV-Baseline	NA	NA	F021	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-C3_531_PV203_F021_2_NEGb	Sample	0	1890	PV	PV-Baseline	NA	NA	F021	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-	Sample	0	1895	PV	PV-	NA	NA	F028	Unclassified

	E3_533_PV205_F028_NEGa					Baseline				
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-E3_533_PV205_F028_NEGb	Sample	0	1896	PV	PV-Baseline	NA	NA	F028	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-B5_546_PV218_N003_NEGa	Sample	0	1901	PV	PV-Baseline	NA	NA	N003	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-B5_546_PV218_N003_NEGb	Sample	0	1902	PV	PV-Baseline	NA	NA	N003	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-F1_518_PV190_A055_NEGa	Sample	0	1905	PV	PV-Baseline	NA	NA	A055	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-F1_518_PV190_A055_NEGb	Sample	0	1906	PV	PV-Baseline	NA	NA	A055	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-G4_543_PV215_M005_NEGa	Sample	0	1911	PV	PV-Baseline	NA	NA	M005	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-G4_543_PV215_M005_NEGb	Sample	0	1912	PV	PV-Baseline	NA	NA	M005	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-E2_525_PV197_A069_NEGa	Sample	0	1913	PV	PV-Baseline	NA	NA	A069	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-E2_525_PV197_A069_NEGb	Sample	0	1914	PV	PV-Baseline	NA	NA	A069	Immunoparalysis

JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-B2_522_PV194_A064_NEGa	Sample	0	1915	PV	PV-Baseline	NA	NA	A064	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-B2_522_PV194_A064_NEGb	Sample	0	1916	PV	PV-Baseline	NA	NA	A064	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-F5_550_PV222_N009_NEGa	Sample	0	1917	PV	PV-Baseline	NA	NA	N009	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-F5_550_PV222_N009_NEGb	Sample	0	1918	PV	PV-Baseline	NA	NA	N009	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-D4_540_PV212_K013_NEGa	Sample	0	1919	PV	PV-Baseline	NA	NA	K013	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-D4_540_PV212_K013_NEGb	Sample	0	1920	PV	PV-Baseline	NA	NA	K013	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-A5_545_PV217_N001_NEGa	Sample	0	1921	PV	PV-Baseline	NA	NA	N001	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-A5_545_PV217_N001_NEGb	Sample	0	1922	PV	PV-Baseline	NA	NA	N001	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-D1_516_PV188_A053_NEGa	Sample	0	1933	PV	PV-Baseline	NA	NA	A053	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-	Sample	0	1934	PV	PV-	NA	NA	A053	Immunoparalysis

	D1_516_PV188_A053_NEGb					Baseline				
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-G2_527_PV199_A071_NEGa	Sample	0	1937	PV	PV-Baseline	NA	NA	A071	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-G2_527_PV199_A071_NEGb	Sample	0	1938	PV	PV-Baseline	NA	NA	A071	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-G1_519_PV191_A056_NEGa	Sample	0	1939	PV	PV-Baseline	NA	NA	A056	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-G1_519_PV191_A056_NEGb	Sample	0	1940	PV	PV-Baseline	NA	NA	A056	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-C4_539_PV211_I010_NEGa	Sample	0	1955	PV	PV-Baseline	NA	NA	I010	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-C4_539_PV211_I010_NEGb	Sample	0	1956	PV	PV-Baseline	NA	NA	I010	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-H3_536_PV208_G003_NEGa	Sample	0	1959	PV	PV-Baseline	NA	NA	G003	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-H3_536_PV208_G003_NEGb	Sample	0	1960	PV	PV-Baseline	NA	NA	G003	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-E5_549_PV221_N007_NEGa	Sample	0	1971	PV	PV-Baseline	NA	NA	N007	Unclassified

JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-E5_549_PV221_N007_NEGb	Sample	0	1972	PV	PV-Baseline	NA	NA	N007	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-G5_551_PV223_N010_NEGa	Sample	0	1973	PV	PV-Baseline	NA	NA	N010	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-G5_551_PV223_N010_NEGb	Sample	0	1974	PV	PV-Baseline	NA	NA	N010	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-E1_517_PV189_A054_NEGa	Sample	0	1979	PV	PV-Baseline	NA	NA	A054	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-E1_517_PV189_A054_NEGb	Sample	0	1980	PV	PV-Baseline	NA	NA	A054	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-A3_529_PV201_C020_NEGa	Sample	0	1981	PV	PV-Baseline	NA	NA	C020	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-A3_529_PV201_C020_NEGb	Sample	0	1982	PV	PV-Baseline	NA	NA	C020	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-H5_552_PV224_N013_NEGa	Sample	0	1997	PV	PV-Baseline	NA	NA	N013	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-H5_552_PV224_N013_NEGb	Sample	0	1998	PV	PV-Baseline	NA	NA	N013	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-	Sample	0	1999	PV	PV-	NA	NA	A074	Unclassified

	H2_528_PV200_A074_NEGa					Baseline				
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-H2_528_PV200_A074_NEGb	Sample	0	2000	PV	PV-Baseline	NA	NA	A074	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-C2_523_PV195_A066_NEGa	Sample	0	2003	PV	PV-Baseline	NA	NA	A066	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-C2_523_PV195_A066_NEGb	Sample	0	2004	PV	PV-Baseline	NA	NA	A066	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-A6_553_PV225_N015_NEGa	Sample	0	2005	PV	PV-Baseline	NA	NA	N015	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-A6_553_PV225_N015_NEGb	Sample	0	2006	PV	PV-Baseline	NA	NA	N015	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-H4_544_PV216_M006_NEGa	Sample	0	2007	PV	PV-Baseline	NA	NA	M006	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-H4_544_PV216_M006_NEGb	Sample	0	2008	PV	PV-Baseline	NA	NA	M006	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-C5_547_PV219_N005_NEGa	Sample	0	2017	PV	PV-Baseline	NA	NA	N005	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-C5_547_PV219_N005_NEGb	Sample	0	2018	PV	PV-Baseline	NA	NA	N005	Immunoparalysis

JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-F4_542_PV214_M002_NEGa	Sample	0	2023	PV	PV-Baseline	NA	NA	M002	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-F4_542_PV214_M002_NEGb	Sample	0	2024	PV	PV-Baseline	NA	NA	M002	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-A4_537_PV209_G004_NEGa	Sample	0	2029	PV	PV-Baseline	NA	NA	G004	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-A4_537_PV209_G004_NEGb	Sample	0	2030	PV	PV-Baseline	NA	NA	G004	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-A1_513_PV185_A050_NEGa	Sample	0	2031	PV	PV-Baseline	NA	NA	A050	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-A1_513_PV185_A050_NEGb	Sample	0	2032	PV	PV-Baseline	NA	NA	A050	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-G3_535_PV207_G002_NEGa	Sample	0	2033	PV	PV-Baseline	NA	NA	G002	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-G3_535_PV207_G002_NEGb	Sample	0	2034	PV	PV-Baseline	NA	NA	G002	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-H1_520_PV192_A061_NEGa	Sample	0	2035	PV	PV-Baseline	NA	NA	A061	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-	Sample	0	2036	PV	PV-	NA	NA	A061	Unclassified

	H1_520_PV192_A061_NEGb					Baseline				
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-B3_530_PV202_C025_NEGa	Sample	0	2037	PV	PV-Baseline	NA	NA	C025	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-B3_530_PV202_C025_NEGb	Sample	0	2038	PV	PV-Baseline	NA	NA	C025	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-D2_524_PV196_A067_NEGa	Sample	0	2039	PV	PV-Baseline	NA	NA	A067	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-D2_524_PV196_A067_NEGb	Sample	0	2040	PV	PV-Baseline	NA	NA	A067	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-A2_521_PV193_A062_NEGa	Sample	0	2041	PV	PV-Baseline	NA	NA	A062	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-A2_521_PV193_A062_NEGb	Sample	0	2042	PV	PV-Baseline	NA	NA	A062	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-C1_515_PV187_A052_NEGa	Sample	0	2047	PV	PV-Baseline	NA	NA	A052	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-C1_515_PV187_A052_NEGb	Sample	0	2048	PV	PV-Baseline	NA	NA	A052	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-B1_514_PV186_A051_NEGa	Sample	0	2049	PV	PV-Baseline	NA	NA	A051	Unclassified

JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-B1_514_PV186_A051_NEGb	Sample	0	2050	PV	PV-Baseline	NA	NA	A051	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-F2_526_PV198_A070_NEGa	Sample	0	2051	PV	PV-Baseline	NA	NA	A070	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-F2_526_PV198_A070_NEGb	Sample	0	2052	PV	PV-Baseline	NA	NA	A070	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-D3_532_PV204_F026_2_NEGa	Sample	0	2053	PV	PV-Baseline	NA	NA	F026	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-D3_532_PV204_F026_2_NEGb	Sample	0	2054	PV	PV-Baseline	NA	NA	F026	MALS
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-D5_548_PV220_N006_NEGa	Sample	0	2055	PV	PV-Baseline	NA	NA	N006	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-D5_548_PV220_N006_NEGb	Sample	0	2056	PV	PV-Baseline	NA	NA	N006	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-B6_554_PV226_F027_NEGa	Sample	0	2059	PV	PV-Baseline	NA	NA	F027	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-B6_554_PV226_F027_NEGb	Sample	0	2060	PV	PV-Baseline	NA	NA	F027	Immunoparalysis
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-	Sample	0	2063	PV	PV-	NA	NA	M001	Unclassified

	E4_541_PV213_M001_NEGa					Baseline				
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-E4_541_PV213_M001_NEGb	Sample	0	2064	PV	PV-Baseline	NA	NA	M001	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-B4_538_PV210_G005_NEGa	Sample	0	2069	PV	PV-Baseline	NA	NA	G005	Unclassified
JE	BOSq_Radboud_PROVIDE_072820_P3-B4_538_PV210_G005_NEGb	Sample	0	2070	PV	PV-Baseline	NA	NA	G005	Unclassified

Ο πίνακας 3 παρουσιάζει μια απεικόνιση της διαδικασίας κανονικοποίησης των τιμών ιόντων, οι οποίες αξιολογήθηκαν στον πίνακα 2. Ο σκοπός της κανονικοποίησης είναι να ευθυγραμμίσει τις τιμές των ανόμοιων κλιμάκων σε μια κοινή κλίμακα που μπορεί να συγκριθεί με συνέπεια. Πρόκειται για ένα ουσιαστικό βήμα στη στατιστική ανάλυση, καθώς διευκολύνει την ακριβή ερμηνεία των δεδομένων και επιτρέπει τον προσδιορισμό τάσεων και προτύπων. Προσαρμόζοντας τις τιμές σε μια κοινή κλίμακα, η διαδικασία κανονικοποίησης μας επιτρέπει να εξάγουμε ουσιαστικά συμπεράσματα και να λαμβάνουμε τεκμηριωμένες αποφάσεις με βάση τα δεδομένα.

MALS: σύνδρομο ενεργοποίησης μακροφάγων

	MALS vs Immunoparalysis	MALS vs Unclassified	Immunoparalysis vs Unclassified	AveExpr	F	P.Value
	0,503778862	0,805521948	0,301743086	16,07956484	28,85328237	8,87E-1
	0,284467161	0,515029081	0,23056192	13,25658427	23,00448421	9,53E-1
	0,362694129	0,648595185	0,285901056	14,66918907	22,76243626	1,16E-0
xylate	0,414179913	0,642654791	0,228474878	13,88482656	21,58187469	3,07E-0
oxyphenylethyleneglycol sulfate	0,373704278	0,621695311	0,247991033	14,5815457	21,20906591	4,18E-0
	-0,094567597	-0,272048303	-0,177480706	15,51333386	19,91907516	1,23E-0
cid	0,26472994	0,414130931	0,149400991	13,63093899	18,67884158	3,49E-0
ole	0,366896308	0,462519525	0,095623217	16,04855505	18,63192557	3,63E-0
	-0,098790951	-0,302444381	-0,20365343	19,42502296	17,33405348	1,10E-0
alpha-L-fucoside	-0,114390277	-0,177956227	-0,06356595	13,89540111	16,81471687	1,71E-0
3Z,16Z)/22:6(4Z,7Z,10Z,13Z,16Z,19Z))	-0,126593515	-0,228983711	-0,102390196	14,79242561	16,4818269	2,28E-0
l-3-methyl ether	0,149297833	0,360152383	0,21085455	13,41651312	16,09894946	3,18E-0
oate	0,242766347	0,375305827	0,13253948	14,18530563	15,4805573	5,43E-0

	0,538885156	0,757458188	0,218573033	16,7750628	15,33603846	6,16E-0
	0,189631095	0,410783394	0,221152299	15,26626786	14,18792618	1,68E-0
-beta-1,4-N-acetyl-D-glucosaminylglycopeptide	-0,056618592	-0,129288535	-0,072669943	13,79696292	13,86441735	2,24E-0
	0,113352272	0,305612631	0,192260359	13,37852023	13,7843266	2,40E-0
	0,246526051	0,313074163	0,066548112	14,15080155	13,39681792	3,38E-0
	-0,082672036	-0,184642924	-0,101970887	13,802293	13,28472774	3,73E-0
e	0,223640159	0,418896275	0,195256116	13,12576536	13,07729475	4,49E-0
onoMe(11,5))	-0,101327388	-0,192628119	-0,091300732	14,31406233	12,94833875	5,03E-0
13Z,16Z))	-0,137852981	-0,199256194	-0,061403212	15,42934488	12,73829968	6,07E-0
A	-0,038134549	-0,102186238	-0,064051689	13,53066177	12,4059121	8,16E-0
	-0,150143106	-0,241563632	-0,091420526	16,55862372	12,27462472	9,17E-0
oside	-0,062314737	-0,180764869	-0,118450133	13,95828331	12,20858428	9,73E-0

	0,119569286	0,277721046	0,15815176	13,61326411	12,060231	1,11E-05
e	0,353047181	0,597310352	0,244263171	14,52207622	11,693942	1,54E-05
	-0,087865442	-0,159253496	-0,071388054	14,053984	11,21864	2,37E-05
	-0,061940249	-0,189433197	-0,127492949	13,7952077	11,162424	2,49E-05
	-0,078216535	-0,151540974	-0,073324439	14,25511326	11,140161	2,54E-05
	-0,12275187	-0,228293968	-0,105542097	15,60574715	11,123987	2,58E-05
lfate	0,143129495	0,393882323	0,250752828	13,62922234	11,116772	2,60E-05
3Z,11Z))	-0,091306237	-0,208286014	-0,116979777	14,0688724	11,029883	2,81E-05
22:0)	-0,060863178	-0,117673671	-0,056810493	14,06815792	10,940688	3,04E-05
e C	-0,078889596	-0,134206081	-0,055316485	13,84813746	10,908217	3,13E-05
Me(13,5))	-0,088968941	-0,142814557	-0,053845616	14,19590642	10,806269	3,44E-05

phoroside 5-glucoside	-0,076006152	-0,157991897	-0,081985746	13,96985752	10,785021	3,50E-05
e (d18:1/12:0)	-0,039995195	-0,119578903	-0,079583709	14,00191433	10,765199	3,57E-05
	0,122016409	0,267874997	0,145858587	14,54012712	10,644587	3,98E-05
nate	-0,024065394	-0,084814322	-0,060748927	12,62672315	10,637182	4,01E-05
yruvic acid	0,131441258	0,209876475	0,078435217	13,26040757	10,596368	4,16E-05
	-0,029565279	-0,096958408	-0,067393129	13,64547722	10,463371	4,69E-05
	-0,094960341	-0,169253358	-0,074293018	13,48649099	10,374893	5,08E-05
	0,107680403	0,25368771	0,146007307	13,34402584	10,208142	5,92E-05
	-0,075364322	-0,115837688	-0,040473365	13,9039025	10,159896	6,18E-05
nedione	-0,101718883	-0,152100335	-0,050381452	13,06772743	10,107072	6,49E-05
	0,14155822	0,39690796	0,25534974	14,9004789	10,092766	6,57E-05
oxyethyl)-4-hydroxybenzothiazole	0,226608007	0,286272877	0,05966487	12,71863605	10,076403	6,67E-05

ne	-0,102395022	-0,174415656	-0,072020634	12,75399533	10,047189	6,85E-05
	-0,085744179	-0,155001313	-0,069257133	14,18620033	9,9966478	7,17E-05
	-0,02458764	-0,102693927	-0,078106288	13,58394577	9,874069	8,02E-05
	0,144575745	0,180439546	0,035863801	13,34779126	9,7720103	8,81E-05
3Z,16Z)/P-18:1(11Z))	-0,140336838	-0,195596333	-0,055259495	19,2610386	9,7407717	9,06E-05
7Z,10Z,13Z,16Z,19Z))	-0,088753513	-0,122796265	-0,034042752	13,9628542	9,7126298	9,30E-05
ine	-0,049999022	-0,118828772	-0,068829749	13,50086941	9,6312911	0,000100
	-0,032195605	-0,121045162	-0,088849557	17,0256228	9,6221931	0,00010
	-0,079621605	-0,205005414	-0,125383809	15,20158176	9,411665	0,000122
ranosyloxy)-3-octanone	0,451501788	0,455003174	0,003501386	13,41981774	9,2719345	0,000139
/24:1(15Z))	-0,108220545	-	-0,082877083	14,7390644	9,2145747	0,000146

		0,191097628				
methyl)-4-methoxybenzene	0,118909009	0,212981376	0,094072366	12,90103923	9,1111656	0,000161
	0,205449711	0,282218177	0,076768466	13,88589821	8,9744863	0,00018
bonyl-deacetyl-leupeptin	-0,083856414	-0,144761185	-0,060904771	13,97392544	8,9610973	0,000185
	-0,056334743	-0,114933426	-0,058598683	13,6685877	8,8940694	0,00019
in L	-0,045794822	-0,136180099	-0,090385276	14,04889856	8,8914066	0,000197
	-0,067820193	-0,191304079	-0,123483887	15,43052874	8,8459735	0,000205
	-0,088997924	-0,101693466	-0,012695542	13,10593253	8,7722564	0,000220
erone glucuronide	0,236773199	0,463526777	0,226753578	13,25615276	8,7596109	0,00022
olyl)	-0,089311025	-0,166195142	-0,076884117	13,17750409	8,7392064	0,000227
	-0,098553326	-0,31276331	-0,214209984	18,52631737	8,7191372	0,000231
	-0,027967501	-0,173553378	-0,145585878	15,51733045	8,6529455	0,000246

ethylbutyl)-phenol	-0,076777353	-0,198976509	-0,122199156	14,55043911	8,5837328	0,000262
3Z,11Z,14Z))	-0,104405136	-0,140282701	-0,035877565	14,72134394	8,5804007	0,000263
	0,241421307	0,309516302	0,068094996	14,66023168	8,56005	0,000268
0)	-0,110786678	-0,276362591	-0,165575913	13,24662924	8,5335643	0,000274
-[(E)-2-[6-hydroxy-3-(3-hydroxyphenyl)-2-(4-	-0,015282193	-0,087169156	-0,071886963	13,82673773	8,5260748	0,000276
binosyl-(1->6)-glucoside]	0,087348987	0,214358592	0,127009604	13,310217	8,5198062	0,000278
	0,129298592	0,22124392	0,091945328	13,50338412	8,4153791	0,000306
adecane-2,9-dione	-0,045476594	-0,102663372	-0,057186778	13,68645735	8,4019468	0,000310
,8Z,11Z,14Z))	-0,03764775	-0,09320449	-0,05555674	13,82327986	8,3379934	0,000329
	-0,090463444	-0,101861778	-0,011398334	13,14737898	8,2845518	0,000345
	-0,145005764	-0,224898035	-0,079892271	16,01257959	8,2602529	0,000353
	0,316103072	0,636731406	0,320628334	13,52630367	8,2495179	0,000357

	0,14222435	0,177897587	0,035673237	13,77449914	8,1378029	0,000396
zole	-0,064540128	-0,181104921	-0,116564793	16,91882425	8,0692367	0,000422
ylphenylalanyl)	0,184702829	0,214925658	0,030222829	13,99936179	8,0619583	0,000425
11Z)/a-15:0)	-0,076692715	-0,129222247	-0,052529532	15,05783829	8,0552048	0,000427
	0,018211028	-0,137438265	-0,155649293	14,59236943	8,0529501	0,000428
	-0,027863566	-0,087716842	-0,059853276	14,42549721	7,9843051	0,000456
rone-3-glucuronide	0,098546491	0,351878962	0,253332471	15,36182924	7,9254524	0,000482
	0,103882504	0,189997219	0,086114715	13,84104052	7,9247709	0,000482
enol	-0,031674988	-0,114797516	-0,083122528	13,10947791	7,8572999	0,000514
	-0,055116718	-0,175819514	-0,120702795	15,89691594	7,8561147	0,000514
	-0,079694486	-0,119898794	-0,040204307	14,08852483	7,8556031	0,000514
cid	0,144944113	0,166253608	0,021309495	14,8031164	7,8550472	0,000515

[6-O-Octadecanoyl-b-D-glucopyranoside]	-0,074798204	-0,144261316	-0,069463112	14,68314665	7,844317	0,000520
	-0,093336657	-0,153392689	-0,060056032	14,35958591	7,8409173	0,00052
3Z,11Z))	-0,115615073	-0,143716381	-0,028101308	15,90558454	7,8087576	0,000537
ol	-0,032965278	-0,161385223	-0,128419945	14,95436513	7,7951833	0,000544
	0,092858287	0,193011284	0,100152997	13,47587155	7,7636737	0,000560
rodiol	-0,04396608	-0,114734963	-0,070768884	12,395554	7,7500637	0,00056
	0,139376981	0,14006277	0,000685789	12,79885821	7,7493349	0,000568
methyl-3-pentenyl)-1,2-dithiin	-0,091509495	-0,174079649	-0,082570154	14,88910838	7,7039894	0,000592
	0,259216869	0,331940176	0,072723307	17,80671021	7,6824518	0,000604
inecarboxylic acid	-0,077796975	-0,204584203	-0,126787228	17,2801529	7,6681059	0,00061
	0,093438226	0,107634811	0,014196586	15,70146442	7,6600054	0,000617
	0,068868894	0,192396062	0,123527168	13,19308605	7,5995436	0,000653

3-furyl)thio]-2-butanone	0,176349691	0,305274521	0,12892483	13,43692261	7,5877968	0,000660
	-0,057601317	-0,120501903	-0,062900586	12,20889903	7,5440346	0,000688
decanedioic acid	0,079396386	0,157058772	0,077662386	13,16859233	7,5253159	0,000700
	0,171116942	0,355888385	0,184771442	12,7020252	7,4678837	0,000738
	0,159897035	0,246086436	0,086189401	12,80212903	7,3878296	0,00079
	0,168794204	0,278548537	0,109754334	13,66977717	7,3828363	0,000799
dien-3-one	-0,047424895	-0,180658138	-0,133233244	12,87403918	7,372634	0,000807
	0,108494786	0,191290826	0,08279604	12,58577164	7,3713101	0,000808
	-0,063366848	-0,109174348	-0,0458075	13,39633041	7,251335	0,000904
/20:4(5Z,8Z,11Z,14Z))	-0,045981696	-0,095818365	-0,049836668	13,92154919	7,1419101	0,001001
	-0,057229161	-0,099009118	-0,041779957	13,85215791	7,1158949	0,001026
	-0,112761359	-0,125967233	-0,013205874	12,88464554	7,0959378	0,001045
(13Z,16Z)/0:0)	-0,080621408	-	-0,029691603	13,546677	7,0957205	0,001045

		0,110313011				
Z)/24:1(15Z))	-0,084026567	-0,149255947	-0,06522938	14,39540455	7,0663532	0,001075
	0,249558588	0,402329166	0,152770577	14,92072443	6,9432326	0,001206
	0,11235463	0,186487767	0,074133136	13,65807647	6,941228	0,001208
	-0,052227581	-0,114397236	-0,062169655	13,68635763	6,8609807	0,001303
ol-3,4,5-trisphosphate	-0,085225954	-0,132818007	-0,047592053	14,50517938	6,8561547	0,001309
	-0,097037127	-0,244772677	-0,14773555	17,71207161	6,8441121	0,001323
	-0,031142025	-0,081101991	-0,049959966	13,74042338	6,8313033	0,001339
(5Z,8Z,11Z,14Z))	-0,074340213	-0,117947194	-0,043606981	14,13323698	6,8138256	0,001362
Z,10Z,13Z,16Z))	-0,117670284	-0,126108552	-0,008438268	14,70941682	6,7867637	0,001397
	0,054975204	0,165560762	0,110585558	13,11498807	6,7646273	0,001426
	-0,069556243	-0,107894	-0,038337757	13,37296486	6,7519243	0,001443

5Z)/18:2(9Z,12Z)/18:3(9Z,12Z,15Z))	-0,057025839	-0,123331761	-0,066305922	13,98541045	6,709352	0,001502
	-0,064244841	-0,110729808	-0,046484967	13,93613272	6,6830482	0,00154
	0,24465937	0,405129892	0,160470522	16,00602912	6,6465544	0,001593
Z,13Z,16Z))	-0,057220323	-0,100083746	-0,042863423	13,95204644	6,620697	0,001632
nycin	0,210361963	0,490473716	0,280111754	13,76801221	6,6037511	0,001659
	-0,06118511	-0,132644599	-0,071459489	13,97836932	6,5811843	0,001694
	0,107804723	0,199774791	0,091970068	14,5416057	6,563352	0,001723
	0,065250829	0,129234778	0,063983949	13,78307779	6,4812302	0,001861
	0,21105614	0,311637098	0,100580957	19,78878866	6,4407862	0,00193
	-0,039690726	-0,073617407	-0,033926681	13,48908317	6,431608	0,001950
an	0,148248338	0,352430504	0,204182166	14,00212326	6,4314031	0,001951
	-0,064315871	-0,209404358	-0,145088487	22,77525126	6,4101834	0,001990
ronide	0,059491274	0,438631294	0,37914002	16,08876655	6,3681666	0,002070

	-0,067976003	-0,095510181	-0,027534177	13,42476709	6,3673302	0,002072
	0,719499365	0,948408918	0,228909553	14,43612528	6,3420126	0,002122
	0,210682934	0,279098244	0,068415311	12,84899067	6,325022	0,002156
	0,011748928	0,114069536	0,102320608	13,4578397	6,28875	0,002231
	0,33185716	0,246220169	-0,085636991	14,42846913	6,2655124	0,002281
Z,15Z)/P-16:0)	-0,126206346	-0,18124775	-0,055041404	16,2987933	6,2502816	0,002314
	0,351008703	0,370050871	0,019042168	13,78934956	6,2432111	0,002329
	0,212002093	0,483108055	0,271105962	12,71491065	6,2374052	0,002342
	0,149488811	0,226224766	0,076735955	14,46062011	6,1784896	0,002476
	-0,035777638	-0,073811623	-0,038033985	12,42842475	6,1229101	0,002609
e; 5-Hydroxysebacate	0,178445254	0,17791844	-0,000526814	13,81471336	6,1038553	0,002657
tamin D	-0,048945353	-0,15989172	-0,110946367	14,62965832	6,0989758	0,002669
erol	-0,075608981	-0,143214685	-0,067605705	14,02342432	6,0885574	0,002695
y-6-{4-hydroxy-6-methyl-5-oxo-3-[(3,4,5-trihydroxy-6-	-0,035905167	-0,083006035	-0,047100868	13,91226351	6,0349046	0,00283
ylceramide (d18:1/20:0)	-0,146587187	-	-0,035834314	15,22482005	6,031182	0,00284

		0,182421501				
	-0,106059653	-0,133110157	-0,027050504	14,13744563	6,0282122	0,00285
	0,202908058	0,217631885	0,014723827	11,56326376	6,0145999	0,00289
hydro-2-hydroxy-1-naphthalenyl)thio]-2-oxopropanoic acid	0,129752644	0,166453136	0,036700492	14,35069479	6,005714	0,00291
anoic acid	-0,044632806	-0,141209367	-0,09657656	13,76815876	5,9989417	0,00293
Z,13Z,16Z,19Z)/P-18:1(11Z))	-0,129939586	-0,172913721	-0,042974136	16,02345542	5,9650531	0,00302
	0,110964975	0,239524284	0,128559309	13,33002078	5,8875534	0,00325
	-0,105596638	-0,246509714	-0,140913077	17,49691148	5,8859249	0,00326
	-0,048764753	-0,096300783	-0,04753603	13,6093088	5,8782797	0,00328
	0,264116649	0,298781598	0,03466495	13,4154237	5,8493563	0,00337
	-0,08364738	-0,180467463	-0,096820083	14,69568418	5,8461422	0,00339
e	-0,066723174	-0,116513775	-0,049790602	12,6966528	5,8340217	0,00342

22:2n6)	-0,042286494	-0,117664567	-0,075378073	14,57333737	5,8316943	0,003436
	-0,0718006	-0,128032611	-0,056232011	13,68256116	5,8014163	0,003536
	-0,082112502	-0,1019114	-0,019798898	13,37315802	5,7795076	0,00361
xadecanoic acid	-0,031784378	-0,142978456	-0,111194079	16,2474042	5,7445311	0,003732
	0,185637158	0,198872893	0,013235734	12,94859268	5,7134807	0,003844
7Z,10Z,13Z,16Z,19Z)/o-18:0)	-0,065150758	-0,110403087	-0,045252329	13,87977972	5,6980419	0,003900
e	0,116567808	0,236359344	0,119791535	14,12001891	5,6814345	0,003962
B2	0,219239916	0,471511628	0,252271711	13,80171833	5,6751266	0,003986
-1-phenylpropan-1-ol	0,598442737	0,699304499	0,100861761	12,90908715	5,6704177	0,004004
	0,113373032	0,25286881	0,139495779	13,26691532	5,6612478	0,004039
	-0,093538342	-0,132760672	-0,03922233	13,21444863	5,6575652	0,004053
	-0,06273519	-0,18569282	-0,122957631	17,80463578	5,6561945	0,004058
a-chromanol	0,171511655	0,159518786	-0,011992869	13,44830751	5,6458051	0,004098
1''-carboxylic acid	-0,040125683	-	-0,069751971	12,21893124	5,6302762	0,004159

		0,109877654				
clohexen-1-one	-0,103273702	-0,114350762	-0,011077059	12,32534188	5,6253783	0,004178
oxy-5-prenylbenzoate 3-glucoside	0,053443013	0,205820429	0,152377416	14,29371504	5,602357	0,004271
-5-phosphomethylpyrimidine	-0,061910698	-0,153524474	-0,091613777	16,276183	5,6007032	0,004277
	-0,014590529	-0,111860458	-0,09726993	14,08971904	5,5822306	0,004353
	-0,029207624	-0,142978362	-0,113770737	14,75707977	5,5430842	0,004518
Z))	-0,101304656	-0,130205145	-0,028900489	14,87122283	5,5305515	0,004572
de	0,087269526	0,160542448	0,073272922	15,24023414	5,5020821	0,004697
acetyl)glutamic acid	0,027105106	0,107838967	0,080733861	13,26135798	5,4927803	0,004739
ethazine	0,036108561	0,387272607	0,351164046	15,2104302	5,4901535	0,004751
	0,015379437	0,233121287	0,21774185	15,33103448	5,4807841	0,004793
e	-0,068899894	-0,109248431	-0,040348537	12,73702475	5,4359926	0,005001
dien-1-ol	-0,060503236	-	-0,031334513	12,15926384	5,432163	0,005020

		0,091837749				
	-0,126329933	-0,262477985	-0,136148053	15,41099033	5,4320339	0,00502
	0,208116667	0,264129131	0,056012464	13,66840222	5,4172556	0,00509
ylenepentanedioic acid	-0,02003295	-0,123524417	-0,103491467	13,72405654	5,4113327	0,00512
	-0,021780609	-0,128348546	-0,106567937	14,66382797	5,388858	0,00523
23,28-decahydroxy-14-(hydroxymethyl)-13,25,32,35-	-0,043051816	-0,194855823	-0,151804007	17,16646583	5,3627255	0,00536
	0,232338328	0,335048083	0,102709754	13,64967134	5,3587601	0,00538
ecen-1-one	0,09866206	0,228007295	0,129345235	12,24149289	5,3323977	0,00551
	-0,022993543	-0,080866699	-0,057873157	14,07393852	5,3196754	0,00558
,12Z))	-0,126882881	-0,153012421	-0,02612954	15,57328035	5,3083376	0,00564
	0,165636372	0,171060455	0,005424083	15,26049049	5,2632202	0,00589
	0,086921041	0,160180867	0,073259826	14,23581904	5,2423716	0,00601
a-carotene	-0,084247075	-	-0,067695085	14,10935527	5,2380666	0,00603

		0,151942161				
	-0,018555187	-0,088369982	-0,069814795	12,88890833	5,2344698	0,006058
	0,170398193	0,167724106	-0,002674087	14,94213816	5,2037525	0,006238
onic acid	0,067753408	0,207860811	0,140107403	13,98986123	5,1833722	0,006360
	0,163395102	0,317841842	0,15444674	13,84610585	5,1787896	0,006388
Z,10Z,13Z,16Z,19Z))	-0,070522874	-0,122859162	-0,052336288	14,00309645	5,1751421	0,006410
	-0,068069158	-0,092758568	-0,02468941	13,56139229	5,1559852	0,006528
noic acid	0,102912884	0,2076448	0,104731916	14,73718088	5,1311952	0,006684
	0,191250874	0,271745691	0,080494817	15,45963484	5,1238916	0,006731
10Z,13Z,16Z)/0:0)	-0,062542404	-0,096256517	-0,033714113	13,89951635	5,1036123	0,006862
ol	-0,103005123	-0,146658095	-0,043652972	14,51565702	5,0719184	0,007073
no-O-sulfate	0,051138744	0,116917227	0,065778484	12,83125327	5,0513041	0,007213
-homoserine(2-)	-0,001276599	-0,090947119	-0,08967052	13,22052429	5,0124276	0,007485

	-0,091347438	-0,151342685	-0,059995246	13,99345804	5,0105372	0,00749
9Z,12Z,15Z))	-0,222640999	-0,134334149	0,08830685	17,63010502	5,0069352	0,00752
(9Z)/0:0)	-0,100574248	-0,136179339	-0,035605091	14,32219399	4,916233	0,00820
	-0,028286649	-0,0809247	-0,052638051	13,52794705	4,9135637	0,00822
tic Acid	-0,053360035	-0,172128416	-0,11876838	17,41603746	4,8880904	0,00842
ic acid	0,137046746	0,248474284	0,111427538	14,2976094	4,8671061	0,00859
e	0,213732628	0,233887116	0,020154488	14,07220607	4,8435494	0,00879
	-0,081480732	-0,232884055	-0,151403324	15,15396423	4,826812	0,00893
	0,099462527	0,178737377	0,07927485	14,09907418	4,8242638	0,00895
ne	-0,08406322	-0,204483766	-0,120420545	13,66650968	4,7969114	0,00919
racil	0,001256856	-0,06498443	-0,066241286	12,43886455	4,7692641	0,00944
	-0,061688631	-0,167840749	-0,106152118	19,9732112	4,7663264	0,00946

droxy-3-methoxyphenyl)-1-phenyl-3-heptanone	0,091963252	0,133998364	0,042035112	14,29858206	4,7656188	0,009475
	0,117171142	0,138840739	0,021669596	13,13170446	4,7414215	0,00969
ol	0,132585925	0,185265703	0,052679778	12,11067735	4,740332	0,009707
yl-1-eicosanone	-0,041053417	-0,084967163	-0,043913745	12,76791588	4,7031346	0,010058
id	-0,018630515	-0,114821307	-0,096190792	14,30427421	4,7019551	0,01007
Z,10Z,13Z,16Z,19Z))	-0,226748218	-0,141720053	0,085028165	17,81786932	4,678154	0,010301
linoleic acid	0,181918913	0,391960946	0,210042032	17,43011347	4,5997537	0,011104
	-0,057433361	-0,088586167	-0,031152806	13,21479133	4,5939636	0,011166
acid	-0,062250581	-0,080152192	-0,017901611	11,42380618	4,5528885	0,011614
	-0,068897056	-0,105590695	-0,036693638	13,8005707	4,5444113	0,011709
	0,033988692	0,133475111	0,099486418	13,18627626	4,5271917	0,011903
erine; Adenine	0,070297434	0,114966657	0,044669223	13,26484813	4,5226252	0,01195
yl-L-lysine	-0,097379359	-	-0,11451053	13,60679048	4,5148603	0,012045

		0,211889889				
mine	-0,064884189	-0,153336089	-0,088451901	16,65097294	4,4901267	0,012334
	-0,047223574	-0,073676514	-0,02645294	13,02325115	4,4891008	0,012346
	0,142930376	0,293670849	0,150740472	12,48377992	4,4847006	0,012398
; 5-(Methylthio)-2-[(methylthio)methyl]-2-pentenal	-0,082730039	-0,2076299	-0,124899861	16,4933483	4,4616728	0,012675
diacetate	0,056599341	0,162328848	0,105729507	13,65015784	4,445226	0,012876
	-0,107321048	-0,205158497	-0,097837449	15,49394883	4,4443977	0,012886
-heptahydroxy-19-(hydroxymethyl)-2,17,20,23-	-0,036740589	-0,086281736	-0,049541147	13,99098894	4,4434159	0,012899
	0,164369621	0,38228785	0,21791823	13,59433353	4,428207	0,013088
	0,093948452	0,199538	0,105589548	12,75496321	4,4192791	0,013201
	0,125142528	0,231967163	0,106824636	14,86691829	4,3974221	0,013480
ropyl 1-propenyl disulfide	0,168357095	0,116636444	-0,05172065	13,06803366	4,3775009	0,013740
eneicosanone	-0,023010472	-0,071016977	-0,048006504	12,70958054	4,3472976	0,014144
	0,013055465	0,181357519	0,168302054	13,43578056	4,342861	0,014205

	-0,090525926	0,055831123	0,14635705	12,5707341	4,3010733	0,014786
ene	-0,093929795	-0,164671064	-0,070741269	12,58604989	4,2890443	0,014958
	0,082123065	0,150145019	0,068021954	13,01237279	4,2834469	0,01503
ol	-0,092377054	-0,127746559	-0,035369505	14,5419358	4,275498	0,015154
mine glucuronide	0,094783804	0,263089649	0,168305846	13,27058805	4,2583576	0,015405
	-0,019163315	-0,070328443	-0,051165129	12,53491938	4,2452466	0,01560
6(4Z,7Z,10Z,13Z,16Z,19Z))	-0,169241021	-0,144217838	0,025023184	15,91719785	4,2293293	0,015841
osterone	0,160961538	0,192271702	0,031310164	12,99300383	4,2236006	0,015928
aminium; Sulcatone	-0,060599666	-0,109882937	-0,049283271	12,05527592	4,1904068	0,016445
hene	0,056388915	-0,072392589	-0,128781504	13,24488951	4,1886345	0,016473
	0,094503946	0,105777397	0,011273451	13,41372425	4,178699	0,016631
nyl)-sn-glycerol 1-phosphate	0,14345925	0,142703684	-0,000755566	13,24792861	4,1754923	0,016682
	-0,050565489	-	-0,037398253	13,42300378	4,1752348	0,016686

		0,087963742				
	0,07958714	0,110321233	0,030734092	13,29906305	4,1651434	0,01684
	-0,064283666	-0,081509945	-0,017226279	13,89669186	4,1546046	0,01702
	-0,039164736	-0,079343214	-0,040178478	13,46621617	4,1480487	0,01712
ydroxy-8-oxo-6-octenedioyl)-sn-glycero-3- ne	-0,033422114	-0,089517692	-0,056095579	13,0738176	4,1443255	0,01718
fate	-0,001090306	0,080287467	0,081377773	13,15818258	4,1389241	0,01727
(9-octadecenoyl)fusarochromanone	-0,069393184	-0,089018576	-0,019625392	13,61876882	4,138125	0,01729
ysteine	0,080176486	0,154307678	0,074131192	12,87678336	4,1345214	0,01735
yl propyl disulfide	0,055467371	0,169557198	0,114089826	13,78527611	4,1270616	0,01747
	-0,009029644	0,124199393	0,133229038	12,67518099	4,123004	0,01754
le	0,385915311	0,429945067	0,044029756	13,73463362	4,0878733	0,01814
	0,013169681	0,101429402	0,088259721	13,25471734	4,0846522	0,01820
	-0,105935222	-0,234877327	-0,128942104	11,90791584	4,067122	0,01851
	0,122679935	0,2210898	0,098409865	13,18775356	4,0617506	0,01861

	0,189252423	0,23873716	0,049484737	13,51535098	4,0611989	0,01862
te	0,119179653	0,191717703	0,07253805	13,31855663	4,0402062	0,01900
coside; Histidinyl-Proline	0,347183842	0,594436161	0,247252319	14,5967956	4,0337541	0,01911
acid	0,18270996	0,263233176	0,080523216	14,89972323	4,0309518	0,01917
alloylglucoside)	0,007475319	-0,07083864	-0,078313958	14,57539073	4,0087575	0,01958
	-0,033500024	-0,117137436	-0,083637412	13,13225969	4,0054964	0,01964
e	-0,190767792	-0,242397893	-0,051630101	13,09388899	3,9990992	0,01976
ronide	0,068370336	0,302594438	0,234224101	14,43496721	3,9990134	0,01976
Z,10Z,13Z,16Z)/0:0)	-0,092730257	-0,078980847	0,01374941	13,16650381	3,9979989	0,01978
dro-1H-pyrrole	0,237291248	0,347060179	0,109768931	12,12711328	3,9886313	0,01996
onoMe(13,5))	-0,075458303	-0,118355644	-0,042897341	15,27648726	3,9875982	0,01998
	-0,092364321	-0,190940475	-0,098576154	14,66421918	3,9691951	0,02034
	-0,044927533	-0,077165381	-0,032237848	12,64996077	3,9647277	0,02043

	0,258451227	0,199281028	-0,059170199	13,81552483	3,9626327	0,020474
noic acid	-0,09246082	-0,21882734	-0,126366519	16,91803372	3,9548107	0,020628
	0,165443358	0,250053092	0,084609734	12,90285001	3,9469873	0,02078
ydroxyisocaproate	0,082671647	0,185624383	0,102952736	14,17863686	3,929168	0,021144
	-0,00907663	-0,06819736	-0,05912073	13,55518021	3,9214472	0,021302
	0,189313367	0,169975567	-0,019337801	14,14576012	3,9113855	0,021510
ntyl-2-furantridecanoic acid	-0,034332742	-0,151487589	-0,117154847	14,35625546	3,8992851	0,021762
n	0,50112604	0,526130867	0,025004828	15,25470022	3,8972122	0,02180
Z-octadecenoyl)-glucoside	-0,086370236	-0,103635197	-0,017264961	15,8608463	3,8793193	0,022185
	0,059190432	0,140420545	0,081230112	13,608581	3,8764967	0,022245
	-0,004197236	-0,147383513	-0,143186277	15,85828258	3,8746114	0,022286
lavam	0,086257344	0,174897052	0,088639708	13,67619807	3,8693825	0,022398
ic acid	-0,01427078	-0,107407936	-0,093137156	14,74403733	3,8625801	0,022546
	0,118944536	0,192444123	0,073499587	13,38188391	3,8552355	0,022706
	0,026870208	0,068618459	0,041748251	13,03585823	3,804767	0,023838

	0,01484786	0,115462564	0,100614704	13,10183933	3,7842322	0,02431
14Z,17Z)/0:0)	-0,075842146	-0,100828955	-0,024986809	13,48177093	3,7786326	0,02444
acid	0,155378945	0,14983467	-0,005544275	13,71088037	3,7735407	0,02456
	0,125753821	0,29192576	0,166171939	13,23607796	3,7700672	0,02465
dithioic acid	-0,067416298	-0,411495291	-0,344078992	15,20489895	3,7666637	0,02473
esulfonic acid	0,244063555	0,289241326	0,045177771	15,48977369	3,7450349	0,02525
Z)/22:3(10Z,13Z,16Z))	-0,043044464	-0,097558796	-0,054514331	14,10979149	3,7346511	0,02550
ne	-0,05902288	-0,091301638	-0,032278757	13,79739956	3,7190281	0,02589
	-0,01326605	-0,084493424	-0,071227375	12,73048529	3,7170912	0,02594
0Z,13Z,16Z)/0:0)	-0,074176829	-0,114329324	-0,040152495	13,85274319	3,7027004	0,02630
ydroxy-24-oxo-3-(sulfooxy)cholan-24-yl]-Glycine	0,084676858	0,325504343	0,240827485	15,03347922	3,6863804	0,02672
	0,092110955	0,160666072	0,068555117	13,67413607	3,6799754	0,02688
	0,096761215	0,152935671	0,056174457	12,80046091	3,6782392	0,02693

	-0,029618506	-0,180103923	-0,150485416	14,13713447	3,6729133	0,027073
	0,05805872	-0,070137456	-0,128196177	17,10685457	3,6516587	0,027635
lrin	0,102502983	0,110195268	0,007692285	12,4906014	3,6453265	0,027804
	-0,047272704	-0,137962469	-0,090689765	14,16606283	3,6393784	0,02796
am-3-carboxylic acid	0,082589966	0,158694067	0,076104101	13,25433093	3,6354997	0,02807
	0,055629202	0,088204468	0,032575266	12,85016591	3,6346352	0,028093
yl-2-all-trans-decaprenyl-1,4-benzoquinol	-0,109560427	-0,137053222	-0,027492796	15,17150494	3,6337453	0,028117
Z,14Z)/20:4(5Z,8Z,11Z,14Z)/22:6(4Z,7Z,10Z,13Z,16Z,19Z))	-0,045756849	-0,083372795	-0,037615946	13,83717127	3,6326885	0,028146
	0,156862016	0,168569924	0,011707908	11,24742727	3,6306163	0,028202
	0,049311619	0,132548211	0,083236592	13,29755338	3,6281841	0,028269
e	-0,017143197	-0,118309296	-0,101166099	12,54230358	3,627762	0,028280
e	-0,051367236	-0,13488505	-0,083517814	12,16984908	3,6095379	0,02878
	0,085057496	-	-0,171230937	18,96448389	3,5831557	0,029526

		0,086173441				
	0,152185705	0,046735573	-0,105450132	12,68341681	3,5678668	0,029965
prop-2-en-1-yl)phenoxy]carbonyl}phenyl)oxidanesulfonic	0,061601671	0,076332153	0,014730482	12,91239441	3,5570782	0,03028
cobrassicin	0,0859955	0,187527816	0,101532316	13,23667862	3,551275	0,030450
yl-3,3-diphenylpyrrolinium (EDDP)	0,155515333	0,142606447	-0,012908886	13,3578887	3,5485422	0,030530
alpha-hydroxy-6-(erythro-1'',2'',3''-trihydroxypropyl)-5,6,...	0,201741795	0,293865921	0,092124126	13,4696045	3,5444362	0,030652
	-0,068046016	-0,103414054	-0,035368038	14,05626162	3,5374014	0,030861
	-0,016376964	0,073017166	0,089394131	12,37503724	3,5178586	0,031450
	-0,066882058	-0,097811371	-0,030929313	13,40938942	3,5093154	0,031711
	0,08378113	0,138451999	0,054670869	14,54507609	3,5071836	0,031776
	0,428246366	0,613016328	0,184769962	17,26678083	3,5033683	0,031894
oamyl acetal	0,057813948	0,113935241	0,056121293	11,71750479	3,4942233	0,032177
	-0,064099651	-0,164291903	-0,100192252	15,59363214	3,4922248	0,032239
a-chromanol	-0,099550298	-0,110233255	-0,010682957	14,2623902	3,4907661	0,032285

	0,130244576	0,121718861	-0,008525716	17,78271898	3,4907334	0,032286
	-0,030395724	-0,089007306	-0,058611582	14,73418511	3,4798979	0,032626
12Z))	-0,137631635	-0,117091671	0,020539963	20,36868666	3,4591976	0,033286
	-0,137518351	-0,388406059	-0,250887708	12,76894086	3,4479556	0,033650
	0,055467641	0,094109677	0,038642036	12,86905008	3,4458314	0,03372
H-isochromene-3-carboxylic acid	-0,036112488	-0,363693783	-0,327581295	15,59291736	3,4456042	0,033727
	-0,073121484	-0,066647751	0,006473733	12,55842661	3,4445027	0,033763
	-0,026395734	-0,083451252	-0,057055518	14,05637326	3,4423215	0,033834
	-0,112532057	-0,102500133	0,010031924	16,34762921	3,4419947	0,033845
opyl)pyrrolidin-2-one	-0,086550578	0,045007071	0,131557648	13,18154783	3,4396566	0,033922
-L-glutamate(1-)	-0,054520173	-0,333299305	-0,278779132	13,85273651	3,4087593	0,034951

rclohexanecarboxylate	-0,014394711	-0,092271867	-0,077877156	13,27479721	3,4001959	0,035242
ate	0,05548295	0,140725424	0,085242474	13,84229026	3,3829878	0,03583
	-0,004479482	-0,067521194	-0,063041712	12,92790865	3,3739464	0,036150
	0,085195579	0,110095022	0,024899443	15,12072159	3,3609402	0,036608
S,24S)-17,23-Epoxy-3,24,29-trihydroxy-27-norlanost-8-en-	-0,05110182	-0,127242191	-0,076140371	14,0204077	3,3607063	0,036616
	-0,176523418	-0,232290939	-0,055767521	12,95908799	3,3599995	0,036641
yl-CoA	-0,068692018	-0,102629972	-0,033937953	13,52101355	3,3425709	0,037265
sterone sulfate	-0,039953812	-0,137658677	-0,097704866	17,98178091	3,3087721	0,038506
none	-0,049085219	-0,096028585	-0,046943366	13,90677073	3,3046632	0,038659
	0,090664841	0,134278926	0,043614085	12,39980927	3,3008932	0,038801
aline	0,066143416	0,116017626	0,04987421	13,27393899	3,2710852	0,039938
yranosyl-(1->3)-alpha-D-galactopyranosyl-(1->3)-L-fucose	0,078543089	0,146958353	0,068415264	13,16705054	3,2576777	0,04046

yrrole	-0,087841075	-0,066303716	0,021537359	12,00744263	3,2393453	0,041186
	0,083773095	0,248847662	0,165074567	12,68716554	3,2353259	0,041347
amido)-2,4,6-trideoxy-beta-L-altropyranose	-0,012395121	-0,066152301	-0,053757181	14,43749243	3,2170346	0,042087
	-0,00633422	0,077391506	0,083725726	13,23459368	3,2116607	0,042307
ate	-0,042920352	-0,085552779	-0,042632427	14,71317826	3,2100133	0,042374
	-0,037406954	-0,129122466	-0,091715513	12,09558691	3,2066455	0,042513
	0,064749764	0,113176789	0,048427025	13,32147068	3,2060863	0,042536
	0,064093622	0,132356098	0,068262476	13,23397646	3,2055878	0,042557
acid; Thiolutin	-0,023357754	-0,11652813	-0,093170375	13,43232517	3,2031873	0,042656
3,7-Trimethyluric acid	-0,022322772	-0,13341156	-0,111088788	15,91008164	3,1932389	0,04307
	-0,036717891	-0,117823967	-0,081106077	15,853689	3,1924588	0,043102
-1H-isochromen-3-yl)methoxy]sulfonic acid	-0,111495248	-0,121376633	-0,009881385	13,48950202	3,1914211	0,04314
	0,182804561	0,280885695	0,098081134	13,56874486	3,1885083	0,043268

ethoxyphenyl)-5-methoxy-1-phenyl-3-heptanone	0,1772928	0,316944733	0,139651932	13,81896173	3,1736605	0,04389
	-0,075394218	-0,071194548	-0,146588766	16,34147512	3,1686741	0,04410
aniol	0,085189025	0,09297195	0,007782924	13,5376899	3,1547442	0,04470
ucoside	-0,006091894	0,0621276	0,068219494	13,69986297	3,1456439	0,04510
amine glucuronide	0,371084105	0,210776666	-0,160307439	13,31654735	3,1421806	0,04525
matocystin	-0,061486675	-0,078787986	-0,017301311	14,12188082	3,1411591	0,04530
	-0,104508055	-0,284579089	-0,180071034	15,42923169	3,1406701	0,04532
nylazulene	-0,079359422	0,043033322	0,122392744	12,62208713	3,1384197	0,04542
	-0,021919361	-0,042599443	-0,020680081	13,73634701	3,1170734	0,04637
holic acid	0,245853167	0,434901447	0,18904828	16,05268991	3,114665	0,04648
omycin	-0,139069006	-0,110491612	0,028577395	14,583834	3,0886242	0,04767
oxyproline	-0,023138515	0,133362234	0,156500749	13,73754844	3,0796589	0,04808
butyrate	-0,020829816	-0,05787102	-0,037041203	14,33149812	3,0789409	0,04812
	-0,057173263	-	-0,040812203	14,03481857	3,077641	0,04818

		0,097985466				
	0,095285754	0,125173568	0,029887815	13,12312061	3,0560611	0,049204
cid	-0,069062137	-0,076788859	-0,007726722	13,257552	3,0386143	0,050045
noic acid	-0,01557513	-0,080933112	-0,065357983	14,004703	3,0139887	0,051257
	-0,004211703	-0,082946975	-0,078735272	13,55323746	3,0134757	0,051282
inone	-0,049831239	-0,108017637	-0,058186398	14,5139722	2,9979377	0,052062
-5,5-dimethyl-2,4-imidazolidinedione	-0,00704343	-0,09358824	-0,08654481	13,6174417	2,9847276	0,052735
(4Z,7Z,10Z,13Z,16Z))	-0,029176275	-0,053881559	-0,024705285	13,73750869	2,979851	0,052986
ophenone 5-sulfate	0,094208355	0,176048416	0,081840061	18,21536196	2,9691209	0,053541
tadecanoic acid	-0,011501583	-0,0823834	-0,070881817	15,50242768	2,9689648	0,053549
	0,058793265	0,131376649	0,072583384	13,89488004	2,9610389	0,05396
cid)	0,011877006	0,104289977	0,092412971	13,79567525	2,9542884	0,054319
Z,10Z,13Z,16Z)/22:6(4Z,7Z,10Z,13Z,16Z,19Z))	-0,034870712	-0,057297513	-0,022426801	13,88332914	2,9331959	0,055444

2	-0,046113482	-0,110381104	-0,064267623	14,17415408	2,9275455	0,055750
	-0,083268445	-0,07865072	0,004617725	11,69841869	2,9259459	0,055837
:0)	-0,018784439	-0,077212543	-0,058428104	13,82856517	2,924435	0,055919
	-0,011528942	-0,066910892	-0,05538195	15,28405996	2,9160878	0,05637
yphenyl)-gamma-valerolactone sulfate	0,026550814	0,151548974	0,12499816	14,06684474	2,9094041	0,056742
	0,016726958	-0,055928618	-0,072655576	14,12334533	2,9074566	0,056850
-hydroxypropan-2-yl)-2-oxo-2H,8H,9H-furo[2,3-h]chromen-	-0,041675254	-0,102928936	-0,061253682	15,07264347	2,9007074	0,057224
	0,060765432	0,113092067	0,052326635	12,20440576	2,8969529	0,057434
side	0,028588872	0,092025246	0,063436374	13,18512659	2,8938987	0,05760
-3alpha,17beta-diol disulfate	0,035733651	0,126090656	0,090357006	13,20473917	2,8916092	0,057733
xaldehyde	-0,018238882	-0,068568154	-0,050329272	12,04872031	2,8819211	0,058280
(2-methylpropyl)benzeneacetate)-beta-D- acid	0,040532325	0,135325054	0,094792729	13,06920875	2,8791923	0,058435

oic acid	-0,114493665	-0,181615089	-0,067121424	12,83619357	2,8773984	0,058537
leate	-0,076398022	-0,118081536	-0,041683513	14,48845195	2,8767336	0,05857
	-0,051991898	-0,083272913	-0,031281015	11,9804834	2,8696859	0,058978
	-0,026222887	-0,066134633	-0,039911746	13,73572289	2,8622919	0,059403
-4-oxo-6-[3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]-2-...	-0,0204221	-0,064311853	-0,043889753	13,9880901	2,8590086	0,05959
id	-0,010236488	-0,118122151	-0,107885663	17,43659295	2,8359161	0,060948
	-0,022167052	-0,097990557	-0,075823505	15,08859219	2,8324765	0,061152
ne	-0,078486506	-0,112688688	-0,034202182	14,03630359	2,8273901	0,061456
cetate	0,044795728	0,091516325	0,046720596	12,74003815	2,8254489	0,061572
cetate	0,069164499	0,099976186	0,030811687	13,8219545	2,8158701	0,062149
	-0,116619655	-	0,075214111	12,09747774	2,8101839	0,062494

		0,041405543				
c acid methyl ester	0,002192467	-0,073969146	-0,076161613	13,58619342	2,8022989	0,06297
cine	-0,004222755	0,090334494	0,094557249	13,42068177	2,794203	0,063474
oxylic acid	-0,006765095	-0,130110376	-0,123345281	12,95373632	2,7852382	0,064030
icatechin-5-O-sulphate	0,119594005	0,102464398	-0,017129608	13,38489274	2,7776445	0,064506
ic acid	-0,171096798	-0,00611218	0,164984618	16,16189857	2,7773805	0,064522
	-0,012443272	-0,063554346	-0,051111075	13,56624979	2,7683506	0,065092
	-0,168962031	-0,398824014	-0,229861983	20,67444325	2,7527938	0,066086
roten-3-one	-0,057619235	-0,069327956	-0,011708721	13,56397914	2,7481912	0,066383
-eicosatrienoic acid	-0,088349785	-0,287926553	-0,199576768	15,37565694	2,7480221	0,066394
hydrofevicordin F 3-glucoside	-0,062244109	-0,060709869	0,001534239	13,45094715	2,747561	0,066424
	0,022468773	-	-0,064421499	13,42039952	2,7340521	0,067304

		0,041952726				
ne	0,065261422	0,126295911	0,061034489	13,58600076	2,7339461	0,06731
Z,12Z))	-0,148826173	-0,084546396	0,064279776	17,66609267	2,7336888	0,06732
	-0,007544645	0,06096076	0,068505406	13,26233486	2,7277886	0,06771
cid	-0,020453598	-0,117087891	-0,096634293	14,49717899	2,7254968	0,06786
)-butanamide	0,066331971	0,114870636	0,048538664	12,98489451	2,7253608	0,06787
ate	-0,032311313	-0,013615476	0,018695837	13,86386197	2,7097989	0,06891
cid	0,051008846	0,102868176	0,05185933	14,72477019	2,7032899	0,06935
	0,070225658	0,152355722	0,082130064	13,46882305	2,6885971	0,07035
	-0,047137202	0,015522613	0,062659815	13,25497845	2,6612156	0,07225
	0,132784459	0,139671373	0,006886914	14,78885429	2,6542353	0,07274
	0,170132579	0,298003449	0,12787087	15,30737525	2,6514618	0,07294
	0,064279992	0,140930003	0,076650011	12,88397153	2,6291492	0,07455
triene B4	-0,015783441	-0,104187774	-0,088404333	13,58039743	2,623624	0,07495
	0,04978985	0,151871168	0,102081318	14,64211496	2,6094174	0,07599

de diphosphate	0,050782694	0,124808885	0,074026191	13,61649561	2,6073476	0,076152
	0,084545522	0,149596236	0,065050714	13,4650963	2,6056012	0,076282
	-0,03681659	-0,068148473	-0,031331884	14,10802976	2,602425	0,076518
	-0,065116211	-0,087134273	-0,022018062	12,10123108	2,6003413	0,076674
	0,017965038	0,074391783	0,056426745	13,02983801	2,5989813	0,076776
hyl]-2-butenal	0,188217768	0,154039081	-0,034178686	14,30445553	2,5973589	0,07689
	-0,082543325	-0,141770804	-0,059227478	10,7802443	2,5944912	0,077113
	-0,028648193	-0,077341939	-0,048693747	15,15062647	2,5905613	0,077409
yl	-0,012164659	-0,103803701	-0,091639043	13,57171226	2,568235	0,079114
+)	-0,06451224	-0,082829958	-0,018317718	13,25289368	2,5647873	0,079380
16:1(9Z))	0,025971764	-0,050069996	-0,076041759	13,92557059	2,5637593	0,079460
	-0,157589745	-	0,156854364	13,84325979	2,5613682	0,079646

		0,000735381				
ybutyrate glucoside	0,159779261	0,202319115	0,042539854	13,14134578	2,5603379	0,079726
ehyde	-0,094294188	-0,102516186	-0,008221998	13,54325254	2,5544118	0,080188
	-0,068007081	-0,093013078	-0,025005998	13,61366491	2,5538785	0,080230
	0,087302943	0,056799435	-0,030503508	14,92819775	2,5506853	0,080480
	0,076256728	0,155894627	0,079637899	13,58876681	2,5478403	0,080704
	-0,030362204	0,054203	0,084565204	13,10678795	2,5454007	0,08089
arnitine	-0,032017588	0,08400208	0,116019668	13,33454616	2,5430285	0,081084
oic acid	0,105856162	0,112148451	0,006292289	14,69234104	2,5349899	0,081723
onide	0,232393312	0,329664266	0,097270954	13,61550874	2,5208219	0,082861
xy-2-(4-hydroxyphenyl)-4-oxo-3,4-dihydro-2H-1-	-0,034092091	-0,076051238	-0,041959148	14,34159536	2,4983495	0,084699
trophenoxy)benzene	0,071196355	0,07301974	0,001823385	12,72826288	2,4971096	0,08480
	-0,037677897	-0,063704443	-0,026026546	13,68688805	2,4877557	0,085580
	0,100773438	0,154437615	0,053664177	13,94708851	2,4751036	0,08664
	-0,055402539	-0,13960374	-0,084201201	12,96786247	2,4750503	0,086648

	0,15101484	0,132706786	-0,018308054	13,82366663	2,4700389	0,087073
	0,071040909	0,159188306	0,088147397	12,59241304	2,469352	0,087132
ethylfuran	-0,024553664	-0,076728167	-0,052174503	12,70945213	2,4643279	0,087560
phosphoinositol	0,005965699	-0,070077425	-0,076043125	13,79001141	2,4627362	0,08769
	0,113166071	0,091642743	-0,021523329	15,18877767	2,4595301	0,08797
	0,20225965	0,186982808	-0,015276842	18,07346537	2,4586306	0,088049
	0,058309512	0,092316948	0,034007436	11,98040697	2,4586266	0,088049
	-0,083179323	-0,040147642	0,043031681	11,27321903	2,4522076	0,088603
)-2,4-dioxobutanoic acid	0,24135961	0,213932713	-0,027426897	12,65863247	2,4498105	0,088811
	-0,040148254	-0,046864707	-0,006716453	12,78046226	2,4494104	0,088845
	0,135245044	0,006193392	-0,129051652	13,37735599	2,4449644	0,089232
utanoate	0,081755115	0,111083095	0,02932798	13,24264471	2,443029	0,089401
benzenediol	-0,086858004	-0,100411627	-0,013553623	13,59059957	2,4406605	0,089608
	0,051849261	0,149772352	0,097923091	13,57566145	2,4375721	0,089879

y-EPE; Cinnamyl benzoate	0,142703165	0,215150414	0,07244725	15,52004498	2,4358561	0,090030
N4-hydroxylamine	0,079779546	0,122244701	0,042465154	12,761533	2,4346716	0,090134
	0,078202649	-0,007679412	-0,085882062	15,01339411	2,4311014	0,090449
e	0,064143626	0,129079604	0,064935978	13,12497975	2,4290052	0,090634
	-0,002721129	-0,108439888	-0,105718759	11,589064	2,4286544	0,090665
yruvate	0,0725662	0,097378808	0,024812608	12,0337824	2,4270482	0,090808
acid	-0,07043446	-0,097898053	-0,027463593	13,59809362	2,4133924	0,092028
l apiosyl-(1->6)-glucoside	-0,046525057	0,070535878	0,117060935	13,37859513	2,4113528	0,092211
ine	0,060335356	0,164345314	0,104009958	13,32324754	2,4042974	0,092849
	-0,065014921	-0,111654344	-0,046639423	11,46861992	2,4034753	0,092924
ylphorbol 13-acetate	-0,052846506	-0,061929469	-0,009082963	13,38603362	2,4019115	0,093066
-dimethyl-2-octanol	-0,061499448	-0,105658097	-0,044158649	12,59292959	2,3980752	0,093416
xin	-0,216136921	-	0,205096007	14,16533139	2,3975993	0,093459

		0,011040914				
	-0,052762603	-0,059910358	-0,007147754	14,279989	2,3895421	0,094198
an	0,070662068	0,185226836	0,114564768	12,79804869	2,3891614	0,094233
nofuranosyl-(1->2)-beta-L-arabinofuranosyl-(1->2)-beta-L-	0,020088236	0,066679343	0,046591107	13,2133255	2,3875053	0,094386
E	0,08647954	0,16436703	0,077887491	15,20671095	2,3868403	0,094447
one I	0,087837207	0,123229934	0,035392727	12,72036797	2,3822031	0,094876
	-0,119950782	-0,077225061	0,042725721	14,73948011	2,3812446	0,094965
	-0,065953729	-0,17712802	-0,11117429	17,61533323	2,3752287	0,095525
d	-0,130342179	-0,300031262	-0,169689082	16,72121712	2,3750261	0,095544
lfinyl)propyl disulfide	0,018413137	-0,128769688	-0,147182824	16,72067694	2,374974	0,095549
	0,152406486	0,114021359	-0,038385127	13,23748342	2,3730349	0,095730
	0,087395402	0,120716966	0,033321565	11,37564237	2,365215	0,096465
thio-2-butene	0,056969778	-0,014293397	-0,071263176	14,12799691	2,3610708	0,09685

	0,013510511	-0,201878562	-0,215389073	14,07929903	2,3592532	0,097029
	-0,110877819	-0,114386391	-0,003508572	14,70257286	2,3557851	0,097358
	-0,127718805	-0,117644955	0,01007385	14,1357914	2,352706	0,097652
leric acid; 8-Hydroxyoctanoate	-0,025703527	-0,065940003	-0,040236476	12,39217877	2,3514966	0,097767
ic acid	0,092539199	0,090538869	-0,00200033	14,16890305	2,3499432	0,097916
Z,10Z,13Z,16Z,19Z)/o-18:0)	-0,029680329	-0,055120791	-0,025440462	13,72840386	2,3493311	0,097975
iophene	-0,047345746	-0,071236747	-0,023891001	12,49799832	2,3482451	0,098079
	0,08273949	0,071662196	-0,011077294	13,21470159	2,3427286	0,098609
	0,034296778	-0,063590396	-0,097887173	12,0839955	2,3345947	0,099397
o-Nonulose	0,108996191	0,103284813	-0,005711378	16,41308791	2,3149753	0,101322
	0,127103953	0,095943785	-0,031160168	11,78912422	2,3114105	0,101676
	-0,053507192	-0,116481725	15,94682666	2,3091356	0,101903	

		0,169988917				
	0,090215129	0,11748031	0,027265181	13,35820438	2,2985296	0,10296
	-0,041532805	-0,053035584	-0,011502779	13,75674631	2,2932248	0,10350
ylic acid; Methyl phenyl disulfide	0,098006715	0,111567163	0,013560447	12,6679487	2,2916161	0,10366
	-0,145999682	-0,17731681	-0,031317128	13,02232723	2,2871505	0,10411
aroviolin	-0,024038866	-0,070229911	-0,046191045	12,90003545	2,2750018	0,10536
te	-0,003977165	0,072088514	0,076065678	12,85348924	2,2734856	0,1055
e E4	0,058642962	0,091771487	0,033128526	13,22925	2,2680987	0,10607
loride	0,028534268	0,118096797	0,089562528	12,47066025	2,2661435	0,10628
y)phenyl]prop-2-enoic acid	-0,085428149	-0,082028699	0,00339945	13,07126305	2,2640762	0,10649
	0,004192592	-0,052381585	-0,056574177	12,92199917	2,2635246	0,10655
	-0,027739127	-0,056570271	-0,028831144	14,28088583	2,2549769	0,10744
zole	-0,081474424	-0,082306158	-0,000831733	13,56444259	2,2476406	0,10822

l	-0,088897812	-0,076544585	0,012353227	16,21492149	2,2438313	0,10862
	0,050006456	0,092195918	0,042189462	15,36517647	2,2429236	0,10872
mic acid	-0,07206559	-0,165796037	-0,093730447	12,28519784	2,2351494	0,10955
zolyl)ethyl butanoate	-0,018224572	-0,000524262	0,01770031	16,70059273	2,2258173	0,11055
utane	-0,119141753	-0,087661198	0,031480555	12,39043936	2,2214975	0,11102
e	0,010376106	0,071664868	0,061288761	12,31237322	2,2060218	0,11272
	0,072818247	0,001145238	-0,071673009	17,86846222	2,2033099	0,11302
	-0,075169646	-0,088004881	-0,012835234	17,27421382	2,2020047	0,11316
	-0,010373909	-0,066591658	-0,056217749	15,69777296	2,1943062	0,11402
	-0,059018927	-0,028874029	0,030144899	11,59563545	2,1929671	0,11417
	-0,038003266	-0,063067342	-0,025064076	13,19624582	2,1877757	0,11475

	-0,07968602	-0,095306327	-0,015620307	15,54303529	2,1834283	0,11524
naldoxime	0,086807285	0,093253419	0,006446133	15,3440772	2,1820538	0,1154
	0,081068698	0,009708855	-0,071359843	13,36201171	2,1774963	0,11591
nylglycol	0,006683654	-0,049984184	-0,056667838	13,40036331	2,1752096	0,11617
5,6-dimethylpyrimidin-4-ol	-0,055167489	-0,074608468	-0,019440979	13,33442021	2,1580938	0,11814
	0,059816565	-0,012230323	-0,072046888	14,43196632	2,1535605	0,11866
noyloxy)-8-(2-methylbutanoyloxy)-9,10-epoxy-p-mentha-	-0,018460649	-0,058450194	-0,039989545	13,97400871	2,1504132	0,11903
ne	0,081597276	0,060770795	-0,020826481	13,61177633	2,1462926	0,11951
eoxy-5-oxoavermectin "2b" aglycone	-0,030320463	-0,066866006	-0,036545543	13,48996356	2,1421468	0,12000
	0,074205755	0,283059847	0,208854093	14,84053553	2,1398591	0,12026
cursor Z	-0,157577836	-0,147364996	0,01021284	16,09780447	2,1387162	0,12040
e	0,013805674	-	-0,069619302	12,66142214	2,1365279	0,12066

		0,055813628				
noate	-0,107625739	-0,108111651	-0,000485912	19,01168112	2,1344163	0,120912
	0,106371286	0,1260612	0,019689914	13,99517344	2,1341073	0,120949
ne	-0,011480178	-0,079114803	-0,067634625	12,36080855	2,131497	0,12125
)-1-Methylpropyl 1-propenyl disulfide	0,002180133	-0,127052678	-0,129232811	16,02052716	2,1222503	0,122362
lfonic acid	-0,007341645	-0,061406859	-0,054065214	11,71581817	2,119898	0,12264
	-0,061873982	-0,05800579	0,003868192	14,09939438	2,1184615	0,122817
ecarboxylate	-0,062395842	-0,049853034	0,012542808	12,18332866	2,1176075	0,122920
oxy-4-(prop-2-en-1-yl)phenyl]oxidanesulfonic acid	0,086752753	0,16955844	0,082805687	14,13061216	2,1161424	0,123097
cetothiohydroximate	0,249025806	0,420551195	0,171525389	17,42236193	2,1139812	0,123358
nine	-0,071379902	0,003827544	0,075207447	12,55938161	2,1128224	0,123498
ide	0,079945535	0,08264873	0,002703195	13,15864037	2,1045834	0,124499
am	0,136806716	0,111503119	-0,025303598	13,81508687	2,10426	0,12453
7-one	-0,004882236	-	-0,06890416	12,75650768	2,1010318	0,124933

		0,073786396				
	0,006348011	-0,067155392	-0,073503403	12,84738462	2,0910896	0,12615
acid-O-sulphate	0,077660289	0,070656741	-0,007003548	12,68860644	2,080608	0,12745
	0,154967099	0,142512816	-0,012454283	14,06891742	2,0686153	0,12896
ne	0,128139838	0,156312595	0,028172757	13,81376104	2,0651033	0,12941
	-0,038856072	-0,069868125	-0,031012053	13,97529729	2,0632537	0,12964
	-0,121537313	0,002620537	0,12415785	12,63580834	2,0576833	0,13035
12-Epoxy-7(11)-eremophilene-6-angeloyloxy-8,12-	0,013418034	-0,066379168	-0,079797202	13,95323341	2,0545742	0,13075
	0,048385951	0,093152584	0,044766633	13,01361666	2,052486	0,13102
ized	0,04922858	0,126977661	0,077749081	13,82360467	2,0388778	0,13278
nylthio)epicatechin 3-gallate	0,153564189	0,377134051	0,223569862	16,44413729	2,0294771	0,13401
	-0,01723303	-0,07767023	-0,0604372	14,48245411	2,0285855	0,13413
	0,049105449	-0,08278168	-0,131887128	12,95724861	2,011991	0,13633
oxy)benzoic acid	0,045854299	0,110691836	0,064837537	12,53633771	2,0069611	0,13700
	-0,05261071	-0,05867046	-0,00605975	13,71442911	2,0044919	0,13733
osulfonate	0,10282405	0,056116346	-0,046707704	13,52556152	2,0009948	0,13780

dine	0,017581542	-0,055237927	-0,07281947	13,95105125	1,9940879	0,13874
nide	0,068675778	0,150187882	0,081512104	13,73154716	1,9927092	0,13893
	0,070734801	0,107971869	0,037237068	15,63317082	1,9902656	0,13926
enoic acid	-0,006139892	-0,103912848	-0,097772956	15,56270284	1,9834798	0,14019
	0,06148454	-0,061374321	-0,122858861	14,07662241	1,9816962	0,14044
0 monostearate	0,004576088	-0,059331965	-0,063908052	14,20922656	1,9766124	0,14114
ntyl-2-furanundecanoic acid	-0,058349717	-0,113853143	-0,055503426	14,82011925	1,9720046	0,14178
	0,031708651	0,074924847	0,043216196	12,75392412	1,9695005	0,14213
E)-1,2-diphenylbut-1-en-1-yl]phenoxy}acetic acid	-0,169760365	-0,065422764	0,104337601	14,46993501	1,9668781	0,14250
	-0,01035275	-0,056703134	-0,046350383	13,30966769	1,966371	0,14257
olamine; Dihydrobiopterin	0,003174162	0,162247358	0,159073196	14,41478984	1,9628672	0,14306
biphosphate	0,028785533	0,062644685	0,033859152	12,2079611	1,955238	0,14413

	-0,085690648	-0,129560085	-0,043869438	14,01561175	1,9477348	0,145203
	0,030432841	0,09781144	0,067378599	12,81467922	1,945768	0,145484
ntanoate	-0,045569748	-0,037489781	-0,083059529	16,18163018	1,9431095	0,145864
	0,050826048	0,105441755	0,054615707	12,66450165	1,9268901	0,148205
	-0,119114056	-0,125690212	-0,006576156	14,3749207	1,924977	0,148483
	-0,060931544	-0,070173201	-0,009241657	13,25703076	1,916277	0,149757
etrahydropyridine	-0,009013585	-0,09546104	-0,086447455	11,72691896	1,9113671	0,150481
henyl)-1,2-ethanediol 1-O-b-D-glucoside	-0,014706641	0,03607413	0,05078077	13,65918764	1,9087367	0,150870
	-0,048252586	-0,121053063	-0,072800478	12,8186517	1,908246	0,15094
	0,011442229	0,100161932	0,088719703	12,87852259	1,9081518	0,15095
	0,148157197	0,331798623	0,183641427	15,57022706	1,9016043	0,151930
m	-0,057747965	-0,033866815	0,02388115	14,81980891	1,9015442	0,151939
alanine	0,002367033	-	-0,09740609	14,89521924	1,9013639	0,151966

		0,095039057				
	-0,021739043	-0,167955168	-0,146216125	14,22820944	1,8930752	0,153208
	0,086134453	0,093331855	0,007197402	18,05892104	1,891207	0,153489
E2	-0,016535566	-0,106612169	-0,090076604	14,13207407	1,8895794	0,153735
yridine	0,05165803	0,090856212	0,039198182	12,45714405	1,8882454	0,153936
	-0,033356907	0,016270612	0,049627519	13,46125321	1,8818843	0,154901
	0,081112136	0,099027596	0,01791546	11,96828159	1,8764242	0,155734
oxide	0,052876048	-0,030944222	-0,083820271	11,88942877	1,8730047	0,156258
	-0,089578332	-0,070991547	0,018586785	14,48129025	1,8715258	0,156485
	-0,078282327	-0,067956077	0,01032625	13,49928723	1,8604565	0,158196
n	-0,031918511	-0,085065238	-0,053146727	12,15304681	1,8571515	0,158710
	0,065119321	0,082089869	0,016970548	12,10843606	1,8514829	0,15959
	0,274352267	-	-0,303072226	16,45036701	1,8474324	0,160233

		0,028719959				
ne	0,003646556	0,074532373	0,070885817	13,17762706	1,8460741	0,160447
	0,049916528	0,107108239	0,05719171	13,04269445	1,8368178	0,161913
thoxyphenyl)-7-methoxy-8-methyl-4-oxo-4H-chromen-5-	0,019450979	0,074902528	0,055451549	13,50493555	1,8339912	0,162363
	0,200407646	0,102816389	-0,097591257	16,64443367	1,8334205	0,162454
	-0,012918671	-0,201035233	-0,188116563	14,64208504	1,8330702	0,162510
acid	-0,007607004	-0,060182337	-0,052575333	13,41051151	1,8120812	0,165897
	0,02644552	-0,032019639	-0,058465159	12,70577462	1,8111217	0,166053
sterone	0,095287184	0,070092802	-0,025194382	14,60149363	1,7905207	0,169450
	-0,003511019	-0,050179881	-0,046668861	12,68027195	1,789383	0,169639
osiglitazone	-0,082019907	-5,98E-05	0,081960067	13,24761493	1,7871535	0,17001
	-0,012370024	-0,071770495	-0,059400471	12,22464455	1,785474	0,170292
yl isopropyl disulfide	-0,109008599	-	-0,019248552	16,64325782	1,7849791	0,170375

		0,128257152				
	0,071019118	0,121331017	0,050311898	13,67466965	1,7829489	0,17071
	-0,019134273	-0,066362866	-0,085497139	12,00015209	1,7751451	0,17203
	-0,020671579	0,106119298	0,126790877	11,41994921	1,7682509	0,17320
	0,042038854	0,130351972	0,088313117	12,68078336	1,7645288	0,17383
d	-0,069014786	-0,131906308	-0,062891522	16,59713281	1,7625476	0,17417
	-0,044247098	-0,076255912	-0,12050301	12,67004397	1,7614745	0,17435
	0,107369809	0,064488647	-0,042881162	18,53108164	1,7516471	0,17605
	-0,044730424	-0,072880864	-0,02815044	12,89613827	1,7489258	0,17652
	0,043020153	0,067762065	0,024741913	12,90477108	1,745121	0,17718
one	0,054235601	0,098888153	0,044652552	12,71615381	1,7450451	0,17719
	-0,051251374	-0,111077327	-0,059825953	13,6172069	1,7433808	0,17748
4-methyluracil	-0,003470719	0,093321089	0,096791808	13,88757643	1,7343429	0,17907
Z)(OH))	-0,089100275	-0,007097573	0,007097573	14,70477785	1,7273418	0,18031

		0,082002702				
	0,029966996	0,114756358	0,084789362	14,97636242	1,7253249	0,18066
ptan	-0,145456788	-0,242162581	-0,096705793	12,5756577	1,7189928	0,18179
alcohol	-0,001211852	0,151636745	0,152848596	13,4541631	1,7178329	0,18200
	-0,029548675	-0,076476056	-0,046927381	14,82085958	1,7083174	0,18371
hylthieno[3,4-d]pyrimidine	0,249568009	-0,02746146	-0,27702947	14,7530515	1,7056504	0,18419
oxy-3-oxopregn-4-en-21-oic acid	0,070054369	-0,037305197	-0,107359566	13,62397102	1,7037488	0,18454
	-0,019774601	-0,081766357	-0,061991756	15,36488337	1,6935471	0,18640
ol-O-sulphate	-0,127019222	-0,218006682	-0,090987459	16,52980087	1,6840356	0,18815
de	-0,243486271	-0,072438998	0,171047273	14,37333013	1,6834736	0,18826
	0,035030992	0,096405415	0,061374423	13,50009927	1,680298	0,18885
one	0,012997206	-0,144083045	-0,157080251	15,07861088	1,6797774	0,18894

acid	0,062191155	0,07563623	0,013445075	13,38639789	1,6737642	0,19007
cid	0,062253044	0,127446185	0,065193141	15,88757588	1,6633625	0,19202
dipyl)-L-cysteinyl-D-valine	-0,016363297	0,074380108	0,090743405	12,87684498	1,6620122	0,19228
	0,097456056	0,056471518	-0,040984538	14,19129566	1,6608618	0,19249
ohexylacetic acid	-0,067143039	-0,097801397	-0,030658357	13,84330644	1,640592	0,19637
	-0,190416273	-0,306591782	-0,116175508	13,26350581	1,6247696	0,19946
	0,030585023	0,077478254	0,046893231	13,57824909	1,6225416	0,19989
tenyl)thiophene	0,089431832	0,070961062	-0,01847077	15,60697624	1,6211633	0,20017
zin	0,132677304	0,101094863	-0,031582441	14,02661876	1,612223	0,20194
nylglycinexylidide	0,110095316	0,119204942	0,009109626	12,30393517	1,6106701	0,20224
aic acid	-0,022790443	-0,08543668	-0,062646237	14,297317	1,6035429	0,20367
no-4-hydroxy-3-methylpentanoic acid	-0,024637278	-0,062560179	-0,037922901	14,42355965	1,5982014	0,20474
	0,077710943	0,049009503	-0,02870144	16,96862768	1,5946078	0,20547
	-0,029324545	0,064159238	0,093483783	14,21093433	1,5928841	0,20582
dehyde	0,016550442	0,063953563	0,047403121	12,68139197	1,5897195	0,20646
	-0,010992848	-	-0,037793844	11,12644434	1,5824758	0,20794

		0,048786692				
ide	-0,010737342	-0,07060621	-0,059868868	15,37908566	1,5823817	0,207962
	-0,008730583	0,039357238	0,048087821	14,1355578	1,5798332	0,208485
	-0,060799757	-0,051515431	0,009284327	13,29957094	1,5758634	0,209302
	-0,024452465	-0,088461312	-0,064008847	14,99351729	1,5678054	0,21097
	-0,007332667	-0,059418671	-0,052086004	17,8316875	1,5652389	0,211504
	-0,017100317	-0,077278037	-0,060177719	13,90832206	1,5592968	0,212745
afaxine	0,001693888	0,056547087	0,054853198	12,24653339	1,5566441	0,213302
n	-0,010430012	0,038058866	0,048488878	13,25040687	1,5560551	0,213426
	0,347718022	0,307636457	-0,040081566	14,77605418	1,5491365	0,21488
	0,012778124	0,068150479	0,055372355	12,59398601	1,5478695	0,215154
no[17,16-b]quinolin-3beta-ol	0,157519012	0,144441975	-0,013077037	12,60794044	1,5403141	0,216762
e	0,115106407	0,058918856	-0,056187551	13,48528639	1,5355064	0,217791
e	-0,008615393	0,044907737	0,05352313	14,34897814	1,5349609	0,217908
	0,03322753	0,090693208	0,057465678	14,50249283	1,5339157	0,21813

ydroprostaglandin A2	0,101938008	0,089861271	-0,012076736	15,55050643	1,533911	0,21813
2-phenylethane	-0,05974979	-0,169470879	-0,109721088	12,02899322	1,5303186	0,218907
	-0,044087405	-0,122563868	-0,078476463	17,4209855	1,5285377	0,219292
Glutamyl)-lysine	-0,022828742	0,100011134	0,122839876	13,86916685	1,5217058	0,220773
	-0,061138275	-0,096241943	-0,035103668	13,6824429	1,5214735	0,22082
	0,000772758	-0,091262679	-0,092035437	16,46275922	1,5184333	0,221486
ne	-0,028901938	-0,106587313	-0,077685374	14,11262454	1,509687	0,223404
Propyl 1-propanesulfinothioate; Methylxanthine	0,031771361	-0,064609512	-0,096380873	17,13887413	1,5095739	0,22342
late(2-)	0,075226285	0,182834792	0,107608508	14,71194784	1,5079084	0,223796
	0,100091228	0,225088323	0,124997095	15,6845018	1,507479	0,223890
esogestrel	0,101431388	0,075349949	-0,026081439	13,61402112	1,5071033	0,223973
thyl-2-oxopentanoate	-0,063151307	-0,138354065	-0,075202759	12,83560042	1,5062319	0,224166

	-0,022201615	0,048925735	0,07112735	12,7821246	1,5051896	0,22439
	0,016724163	-0,030099557	-0,04682372	13,7478101	1,5029816	0,22488
	-0,134371997	-0,152223295	-0,017851298	13,77419885	1,4958729	0,22646
	-0,308649669	-0,307565119	0,001084549	14,71533317	1,4914619	0,22745
nthalene-6-sulfonate	0,030309774	0,076847835	0,046538061	12,42403931	1,4889466	0,22801
	-0,119095614	-0,051885618	0,067209996	12,73092771	1,48619	0,22863
	0,055275427	0,067935853	0,012660426	13,50990138	1,4780904	0,23047
	0,063750551	0,091434419	0,027683869	14,04626173	1,4773813	0,23063
R)-17,23-Epoxy-3,29-dihydroxy-27-norlanost-8-ene-15,24-	0,044211441	0,172838927	0,128627486	13,73629961	1,4768102	0,23076
methylpyrazine	-0,229416204	-0,18704154	0,042374665	13,91506307	1,4743573	0,23132
	-0,039362406	-0,052741738	-0,013379332	13,86794078	1,4588388	0,23488
	-0,030211035	-0,054395509	-0,024184473	14,33246851	1,4561564	0,23551

thoxazole	0,077223557	0,322922319	0,245698762	17,27027472	1,4555426	0,235653
	0,13216558	0,1046322	-0,02753338	12,73922276	1,446519	0,237759
	-0,034543705	-0,09349075	-0,058947045	15,41572856	1,4463194	0,237806
-[(3-methylbut-2-enoyl)oxy]oxane-2-carboxylic acid	-0,039645602	0,229531262	0,269176864	15,28960004	1,4454846	0,238002
	-0,052509312	-0,052730822	-0,00022151	12,76880258	1,4451592	0,238078
	0,041023892	0,114523212	0,07349932	13,18628565	1,4433862	0,238495
	0,096406469	0,164082691	0,067676222	12,97879014	1,4397615	0,239349
	-0,050301246	-0,090945661	-0,040644414	21,05973125	1,4350458	0,240465
uinoline N-oxide	-0,169567546	0,015782569	0,185350116	13,80709809	1,4317161	0,241256
ydroxyphenyl)propanoic acid	-0,060166558	-0,150695139	-0,090528581	13,0846155	1,4297547	0,241723
	0,035442304	0,072331345	0,036889041	12,86431404	1,4266859	0,242456
azole-9-carboxaldehyde	-0,116167703	-0,138511688	-0,022343985	12,16894079	1,4208914	0,243846
	-0,053038285	-0,062653249	-0,009614964	12,18583929	1,4202952	0,243989
	0,062994106	0,089239928	0,026245821	11,70204815	1,4181458	0,244507

inorol	-0,072471593	-0,088918026	-0,016446433	14,44726064	1,4124425	0,24588
{2-[(3-methylbut-2-enoyl)oxy]-2-{9-[(3-methylbut-2-enoyl...	-0,00228836	0,044426407	0,046714767	13,42197093	1,4123507	0,245909
eto-6-octendioyl)-sn-glycero-3-phosphatidylcholine	-0,026671671	-0,057881138	-0,031209467	13,32043432	1,4110503	0,246224
olyl sulfate	-0,002387209	-0,05906447	-0,056677262	11,94747773	1,4106866	0,246313
uronide	0,28284723	0,087217408	-0,195629822	13,69189567	1,400259	0,248860
ribonucleoside 5''-diphosphate	0,001242799	-0,034823791	-0,036066589	13,78556863	1,3926624	0,250732
hritol 2,4-cyclodiphosphate	0,045679241	0,071704919	0,026025678	13,43378387	1,3884309	0,251781
	0,090962939	0,113003071	0,022040132	13,30636872	1,3835994	0,25298
	-0,101487587	-0,088622979	0,012864608	14,60741352	1,3834514	0,25302
	-0,009261742	-0,047820226	-0,038558485	12,46904147	1,3808922	0,253661
	0,029842149	0,064123268	0,034281119	12,78885083	1,3722696	0,255829
cetic acid	0,149292737	0,105360003	-0,043932734	16,55667319	1,3715327	0,256015
glycine conjugate	0,186803047	0,240709804	0,053906757	17,53498314	1,3702242	0,256346
m	-0,050228314	-	0,006622439	11,08639976	1,3675906	0,257013

		0,043605875				
-3-buten-2-one	-0,139757857	-0,000271318	0,139486539	13,70582083	1,3653668	0,257578
	-0,066037621	-0,042399029	0,023638592	11,90747148	1,3646754	0,257754
	-0,110186171	0,029382546	0,139568717	13,52021108	1,3637298	0,257994
e I	0,036783132	0,04500647	0,008223338	13,11458687	1,3623617	0,258343
	0,061853675	0,031224767	-0,030628908	13,20374444	1,3604741	0,258825
byl disulfide	0,044131527	0,096949318	0,052817792	15,74399432	1,3598548	0,258983
	0,04806506	0,108282731	0,060217671	14,20905674	1,3593112	0,259122
anthiol acetate	0,019847599	-0,044080765	-0,063928364	14,12567392	1,3538561	0,260521
onamide	0,084568258	0,010711403	-0,073856855	14,39248229	1,351596	0,261103
nol W	-0,111083363	0,001804321	0,112887684	14,41780767	1,3475062	0,262159
esinol 4''-glucoside	-0,007018049	0,031250219	0,038268268	13,56315217	1,3468143	0,262338
	-0,010026949	0,017947011	0,02797396	12,78365336	1,3455773	0,262659
	-0,005597987	-0,064443919	-0,058845932	14,55604052	1,3432134	0,263272
	-0,052439003	-	-0,044125473	13,14842765	1,3402972	0,264031

		0,096564475				
e	-0,063016971	-0,096382455	-0,033365484	17,9207444	1,3398609	0,26414
-5a-cholanoic acid	-0,044076784	-0,086169331	-0,042092547	16,94586714	1,3385882	0,26447
loride	0,211533689	0,30623307	0,094699381	13,78804843	1,3345739	0,26552
	0,029723991	-0,050299535	-0,080023526	12,86923426	1,3329855	0,26594
	-0,008110637	-0,052212419	-0,044101783	13,16248989	1,3241818	0,26826
	0,068485246	0,092253797	0,023768551	12,7248342	1,3241069	0,26828
	0,051222086	0,049413037	-0,001809049	11,9108065	1,3237833	0,26837
oxy-8-carboxychromene	-0,010369701	-0,089773738	-0,079404036	12,58618615	1,3150689	0,27069
	-0,025454859	-0,060319548	-0,034864689	14,05921754	1,309044	0,27230
	-0,079142566	0,108627581	0,187770147	15,05199004	1,304897	0,27342
assinol methyl ether	0,036298578	0,259443965	0,223145387	15,17217236	1,3046745	0,27348
ol	0,010058567	0,13731124	0,127252673	12,92696857	1,3034772	0,27380

acid	0,098588375	0,031444164	-0,067144211	14,32952258	1,3029181	0,273958
	-0,002494572	-0,047354185	-0,044859613	12,96636507	1,2964723	0,275708
	0,127928358	0,098919728	-0,02900863	13,69556105	1,292595	0,276765
	0,045932348	0,06517315	0,019240801	13,19351429	1,2902754	0,277400
	-0,007593731	-0,056188359	-0,048594628	14,46403842	1,2841262	0,279090
	-0,004412694	-0,060795802	-0,056383108	13,67291146	1,2820525	0,279662
	0,01811806	0,053770246	0,035652186	12,20459617	1,2817352	0,279750
lfide	0,028271462	-0,06404403	-0,092315491	14,67589277	1,2810615	0,279936
	-0,050968102	-0,051759998	-0,000791896	14,93051161	1,2803474	0,280134
	-0,032346187	-0,074313143	-0,041966955	14,7222223	1,2704913	0,282875
	-0,024668093	-0,123878734	-0,099210641	16,72593349	1,2628424	0,285020
rboxymethyl)-C-hydroxycarbonimidoyl]-2-({2,3,4,6-	-0,102284565	-0,039703066	0,062581499	13,55197407	1,2609544	0,285552

	0,077585879	0,174955051	0,097369172	13,06144875	1,256505	0,28681
n	-0,076298321	-0,039190857	0,037107464	12,11832062	1,2561123	0,28692
l	0,055482951	0,087580549	0,032097598	12,90873353	1,2552071	0,28717
	0,072993544	0,044474397	-0,028519146	13,72078188	1,2501451	0,28861
	0,077395609	0,07331455	-0,004081059	14,45209357	1,2461446	0,28976
	0,024706234	-0,043047561	-0,067753795	14,57063001	1,2454326	0,28996
	0,036171778	0,043880184	0,007708405	14,08483106	1,2412285	0,29117
one	0,027814695	-0,024839798	-0,052654492	11,73690724	1,2382222	0,29203
e P	0,016632438	0,13284487	0,116212432	14,97240958	1,2343686	0,29315
ucuronide	-0,019342106	0,055381467	0,074723573	12,86780404	1,2321275	0,29380
	0,088947938	0,094880825	0,005932887	15,00740777	1,2234089	0,29634
	0,00915781	0,053471652	0,044313842	13,24201552	1,2197273	0,29742
	-0,018331284	0,035312947	0,053644231	13,50763582	1,2191721	0,29758
	-0,013541104	0,089027432	0,102568537	13,51721004	1,2167736	0,29829
canolide	0,04475538	-0,028665202	-0,073420582	13,92714769	1,2155056	0,29866

	0,046370751	-0,035555504	-0,081926255	13,67108335	1,2154984	0,29867
in glucuronide	0,056147227	0,130637157	0,07448993	12,9568093	1,2153823	0,29870
a,17-dihydroxygibberellin A4 17-glucoside	0,007051972	0,089466504	0,082414532	14,37676576	1,2129733	0,29941
	0,024275958	-0,014304098	-0,038580056	12,90879228	1,2085487	0,30073
rmone III diol	0,088213903	0,088008855	-0,000205047	15,01514819	1,2030966	0,30235
-2,2'-azoxytoluene	0,031355065	0,049312194	0,017957129	12,87119261	1,2015067	0,30283
-oxide	0,017856143	-0,072087157	-0,0899433	17,89710681	1,2008224	0,30303
pylsulfinyl)propyl disulfide	0,132478827	0,073600594	-0,058878233	14,96242969	1,197885	0,30391
	0,06165861	0,006803967	-0,054854643	14,88205948	1,1977049	0,30397
	-0,191152897	-0,187647568	0,003505329	13,09609418	1,188865	0,30663
	-0,03437522	-0,08205244	-0,047677221	14,97570876	1,1887332	0,30667
	-0,023435573	-0,074642272	-0,051206699	15,42823678	1,1812912	0,30894
	-0,048166527	0,034245665	0,082412192	14,17634778	1,1776412	0,31006
	0,041000732	-	-0,085012054	13,87476737	1,1722812	0,31170

		0,044011322				
	-0,28627979	-0,197934153	0,088345637	15,54031025	1,171465	0,311960
	-0,016510959	-0,068300022	-0,051789063	14,30007183	1,1702339	0,312340
	-0,021903201	-0,046310005	-0,024406805	13,88353219	1,1673007	0,313247
lcysteine sulfoxide	0,069863922	0,073105195	0,003241273	12,84501293	1,1552507	0,317002
	0,015345147	0,079706514	0,064361367	12,38381666	1,1547839	0,31714
	-0,022627129	-0,045744447	-0,023117318	13,20461142	1,1529838	0,317714
lethione	0,094011122	0,083068447	-0,010942675	11,74185276	1,1487162	0,319057
	-0,041607382	0,04667897	0,088286352	12,26453635	1,1486226	0,319087
ido-2,3-dideoxy-alpha-D-glucuronate	0,014225014	-0,020989486	-0,0352145	14,05185588	1,1465735	0,319734
	-0,063280728	-0,071918099	-0,008637371	14,31202636	1,1446659	0,320338
acid	0,009661125	0,055538101	0,045876976	13,10833076	1,1431348	0,32082
	0,018832841	-	-0,050431279	13,31178782	1,1406139	0,321624

		0,031598438				
acid	-0,066153	-0,133216185	-0,067063184	15,890985	1,1358608	0,323140
cetate	-0,016719868	-0,036673607	-0,019953739	11,41102497	1,1343965	0,323608
	0,051800432	0,079752768	0,027952336	13,44951735	1,1324021	0,32424
	-0,07495678	-0,031646719	0,043310061	16,97590614	1,1322503	0,324296
Z,14Z)/18:1(9Z)/22:5(7Z,10Z,13Z,16Z,19Z))	-0,036290347	-0,041209825	-0,004919478	13,84692665	1,1318007	0,324440
rfural	-0,055126163	-0,121706088	-0,066579925	14,3977708	1,1234116	0,327144
	0,055818429	0,16725632	0,111437891	13,76098358	1,1163311	0,329444
	0,067856234	0,36335774	0,295501506	16,35073819	1,1148656	0,329922
yline	-0,06400101	-0,067420432	-0,003419422	12,33033177	1,1127416	0,330616
	0,052239886	0,125224026	0,07298414	13,50386112	1,1108636	0,33123
'''-malonylglucoside)	-0,000608679	-0,039496498	-0,038887818	14,63915097	1,1098475	0,331564

	-0,024476065	0,031772212	0,056248276	13,12373571	1,1072958	0,332402
	0,055404606	0,09455833	0,039153724	13,55938531	1,0956089	0,336268
	-0,043393927	-0,091720416	-0,048326489	13,43982246	1,0951889	0,336408
	0,040262811	0,050625349	0,010362538	13,26788135	1,0931055	0,337102
3-sulfolactate	-0,194726852	-0,02249598	0,172230872	12,88723807	1,0921929	0,33740
enyl)pentan-3-yl]oxy}sulfonic acid	-0,037373383	0,243499895	0,280873279	19,31222691	1,0915937	0,337607
	0,051451822	-0,017038832	-0,068490654	13,12534368	1,0874508	0,33899
tanoic acid	0,153585951	0,134656211	-0,018929739	13,64292514	1,0860628	0,33946
	0,085462705	0,071918177	-0,013544528	13,26769959	1,0775668	0,342326
	0,11772517	0,188384129	0,070658959	14,61472214	1,0768675	0,342563
	0,012111043	0,076140672	0,064029629	13,3404951	1,0762955	0,342757
	-0,294397227	-0,087736407	0,20666082	15,28107217	1,075709	0,342956
one	-0,028201142	-0,047920626	-0,019719483	13,01713519	1,0740544	0,343518
tate	0,030058002	-0,019419247	-0,049477249	13,03845651	1,0721542	0,344164

	0,060964789	0,06386455	0,002899761	12,6421177	1,0642271	0,34687
	-0,0238712	-0,089030364	-0,065159164	14,09090496	1,0613651	0,34786
	0,118374258	0,072195852	-0,046178405	16,20998589	1,0597253	0,34842
yl-(1->2)-galacturonide]	-0,071472015	-0,120410465	-0,048938449	14,65495763	1,0563006	0,34960
	0,114212875	0,099921503	-0,014291372	13,53971744	1,0518017	0,35116
ole-3-acetonitrile	-0,090527591	-0,082177256	0,008350335	13,68516995	1,0516549	0,35121
	0,031666255	0,051075354	0,0194091	13,21295397	1,0492445	0,35205
aroylserotonin glucoside	0,026812493	0,04893625	0,022123757	13,86976147	1,0481077	0,35245
soleucine	0,064676881	0,028771754	-0,035905127	14,56804632	1,0462125	0,35311
c acid	0,059062267	0,086584519	0,027522251	17,05809417	1,0429817	0,35424
5-c]pyridine	0,003154717	-0,051001502	-0,054156219	12,13090413	1,0402792	0,35519
	-0,048665674	-0,054140018	-0,005474343	18,19606348	1,0393283	0,35553
	-0,171773547	-0,189112675	-0,017339128	13,66385664	1,0351126	0,35701

	-0,04767884	-0,022780519	0,02489832	13,37126835	1,0299945	0,358832
zole	0,018279114	-0,186750255	-0,205029369	15,31035358	1,0289512	0,359203
-L-lysinium(1+)	0,004945025	0,185177381	0,180232357	13,25893315	1,0270818	0,359869
iosyl-4-glucosyl-6-malonyl)-glucoside	-0,02166521	0,057760754	0,079425964	13,59221163	1,0265197	0,360069
	0,055182916	0,009202182	-0,045980734	17,04357736	1,0201776	0,362337
	0,022000078	-0,016359178	-0,038359257	13,55006487	1,0198482	0,362456
	-0,022861981	-0,035489157	-0,012627176	13,90868967	1,0145998	0,364344
	0,020468558	0,053527964	0,033059407	13,44791825	1,0123715	0,365149
	0,146185945	0,100899109	-0,045286836	12,09633291	1,0083529	0,366605
te	0,040857517	0,057860509	0,017002992	12,54433951	1,0058841	0,367503
	-0,016638587	0,071342484	0,08798107	14,62863958	1,0053947	0,367681
	0,012531797	0,086737309	0,074205512	13,30769121	1,0025827	0,368706
	-0,041723489	0,014175186	0,055898675	12,96766305	0,9928635	0,372273
ma-tocotrienol	-0,015828323	-0,041901719	-0,026073396	13,13185375	0,9915422	0,372760

cinone II	-0,167431853	-0,040892489	0,126539364	13,9577013	0,9906108	0,373104
	-0,119317962	-0,125414244	-0,006096282	18,16966245	0,9794374	0,377257
	0,004143257	-0,084354921	-0,088498179	12,38358203	0,9765507	0,378337
	0,059391035	0,149212207	0,089821172	13,82055831	0,9725486	0,379840
alic acid	-0,055910938	0,057678358	0,113589297	14,46691688	0,970707	0,380534
ol	0,011460225	0,055873038	0,044412813	12,62589146	0,9701541	0,380742
	0,030117729	-0,029726211	-0,05984394	14,38249746	0,968769	0,381265
oxyindole glucuronide	0,066540566	0,049633227	-0,016907339	13,50499266	0,9663737	0,382171
2,3,10,11-tetrol	0,026546832	0,061777286	0,035230454	13,10747566	0,9560461	0,38610
ate	-0,047417457	-0,033897936	0,013519521	13,60878295	0,9538881	0,386928
ine	-0,011629731	0,013294939	0,02492467	12,51526267	0,951971	0,387664
	0,073801107	-0,0511424	-0,124943507	12,87289702	0,9502644	0,388320
	0,032824971	0,061761392	0,028936421	13,56098627	0,947386	0,389429
	0,054164748	-	-0,099366223	12,71821381	0,9449756	0,390360

		0,045201475				
de	0,091045135	0,148569216	0,057524081	14,4235972	0,9416119	0,391664
	0,052975448	0,116285107	0,063309659	15,55277379	0,9415053	0,391705
	-0,065057601	-0,128508621	-0,06345102	14,20780909	0,9402832	0,392180
scine	0,031193304	0,06588582	0,034692516	12,73843461	0,9386454	0,392817
	0,101908113	0,137063596	0,035155483	14,09619814	0,9382635	0,392965
	-0,015223597	0,046408563	0,06163216	13,36778132	0,9302979	0,396080
cerophosphoinositol	0,040016444	-0,026400921	-0,066417365	15,45748134	0,9302615	0,396094
acid	0,085972081	-0,017176201	-0,103148282	15,22271583	0,9301111	0,396153
ethylethyl)-4-methylbenzene	-0,271421864	-0,197616511	0,073805353	15,97510025	0,9269627	0,397391
none	-0,259033654	-0,13308979	0,125943864	15,44630946	0,9218197	0,399422
yl GABA	-0,126530074	-0,112086902	0,014443171	14,01932978	0,9211419	0,39969
-propenyl disulfide, 9Cl	0,046486986	0,065388181	0,018901195	12,99469798	0,9182691	0,400830
	-0,019520107	-0,04805819	-0,028538083	13,58285506	0,9083056	0,404809

	0,085099425	0,074828853	-0,010270571	18,71356608	0,9078447	0,40499
l carnitine	0,01919804	-0,02683145	-0,04602949	13,40129839	0,907724	0,40504
ndsin 2''-(E)-ferulate	-0,065665417	-0,000102671	0,065562745	13,4505651	0,906854	0,40539
	-0,014579762	-0,047966213	-0,033386451	18,89290167	0,8923332	0,41127
	0,092152831	0,076883804	-0,015269026	14,84761949	0,8904291	0,41204
	-0,036496969	0,02079703	0,057293998	14,7656571	0,8867156	0,41356
	-0,025867088	-0,052329673	-0,026462585	11,76344303	0,8835885	0,41485
-2,3-dione	-0,207041942	-0,097327313	0,109714628	15,50295008	0,8816235	0,41566
	0,090647285	0,107589249	0,016941964	12,99491453	0,8801649	0,41626
	0,112037437	0,109776079	-0,002261357	15,31991649	0,878515	0,41694
carboxylate form	-0,105591598	-0,072479952	0,033111646	13,23722874	0,8769051	0,41760
ydroxy-5-nitrophenyl)-N,N-diethylpropanamide	0,109338837	0,075554754	-0,033784083	12,97737653	0,8745761	0,41857
[2-hydroxy-1-(1-oxo-1H-isochromen-3-yl)butoxy]oxane-2-	0,081437219	0,089876103	0,008438884	13,09139851	0,8739579	0,41883

nate	-0,114258306	-0,084845919	0,029412387	11,10361794	0,8706842	0,420193
	0,036181209	0,094583991	0,058402781	14,68123735	0,8692964	0,420772
	-0,037180343	0,124076317	0,16125666	13,25768458	0,8654442	0,42238
riptan	0,161952042	0,078686346	-0,083265696	12,65280386	0,864909	0,422607
; Diethyldithiophosphate	0,013160293	-0,039419658	-0,052579951	12,66102316	0,8610257	0,424237
hoside	0,058497584	0,058303657	-0,000193927	13,51702521	0,8598021	0,42475
d	0,04441662	0,079207747	0,034791127	14,33069043	0,8590932	0,425051
e	0,013060402	-0,026981729	-0,040042131	13,98844933	0,8568317	0,426006
	0,132495226	0,130714144	-0,001781082	15,01718796	0,855766	0,426456
yl-1,6-dioxaspiro[4.4]nona-3,8-diene	-0,104693381	0,028426367	0,133119748	15,05703753	0,8547143	0,426901
ide	0,017661876	0,055968915	0,038307038	13,38538243	0,8501029	0,428858
	0,022786799	0,080602649	0,05781585	13,69235886	0,8489829	0,429335
	-0,112414994	0,011215643	0,123630637	15,4397493	0,8456985	0,430736
	-0,009404148	-0,042919094	-0,033514946	13,43683333	0,8451516	0,430970
	-0,021108637	-	-0,018476425	10,60256728	0,8391466	0,433544

		0,039585062				
1,4]thiazine	0,041647656	0,035148149	-0,006499506	11,88968744	0,8375842	0,434217
amide	0,051008201	0,009125868	-0,041882333	13,58071585	0,8353024	0,435201
omycin	-0,041482507	0,006128639	0,047611146	12,97478787	0,8279704	0,438378
	0,044685387	0,050764053	0,006078666	13,09339981	0,8239779	0,44011
lfonamide	-0,024370601	0,071466214	0,095836815	12,21084765	0,821134156	0,441361
ine	0,100378615	0,03434137	-0,066037245	13,77238814	0,81792401	0,442769
,25-tetrol-3-glucuronide	-0,03009134	0,040537696	0,070629037	14,20454797	0,816573359	0,443631
-estradiol-2-S-glutathione	0,002285903	0,045679993	0,04339409	13,31457574	0,814292769	0,444367
oyl carnitine	0,024452557	-0,033699319	-0,058151876	13,08879967	0,813943251	0,444521
	-0,029718798	-0,051589297	-0,021870499	19,39400052	0,810042811	0,446245
	0,080204515	0,055613587	-0,024590928	12,2129261	0,809621744	0,446431
henyl)-8-[1-(2,4-dihydroxyphenyl)-3-(3,4-dihydroxyphenyl)-	-0,024030475	-0,036890232	-0,012859757	13,6441718	0,805405403	0,448303
	0,042300231	0,043834501	0,00153427	13,18418522	0,800533286	0,450475
lenoic acid	0,009307369	-0,065840005	-0,075147373	14,5657673	0,798385544	0,451437

ide	0,085945402	0,061511976	-0,024433426	12,94449435	0,796289208	0,452377
	0,045045707	0,011571203	-0,033474503	14,37235638	0,793710366	0,453536
3''-gallate	-0,029227226	-0,053151632	-0,023924406	14,78859099	0,793132153	0,453796
	0,060119773	0,087057839	0,026938066	14,34372885	0,79125483	0,454642
side monophosphate; Tolmetin glucuronide	-0,066175097	0,011174354	0,077349451	12,9505223	0,787480442	0,456349
y-3-butene	-0,023581008	-0,034795768	-0,01121476	12,16392313	0,786801603	0,456656
adecylbenzoic acid	0,042973522	-0,019462805	-0,062436327	13,54591941	0,784364257	0,457762
	-0,030900752	-0,02823882	0,002661932	12,41877531	0,784265145	0,457807
4-xylose	0,032039277	-0,028499336	-0,060538613	15,00839457	0,783388278	0,458206
	0,043120661	0,031811883	-0,011308778	13,6127189	0,780029884	0,459736
	0,049920575	0,041881904	-0,00803867	14,72900509	0,778674233	0,460355
oxytetradecanoyl)-D-glucosamine	-0,066975248	-0,010171401	0,056803848	14,13054371	0,777265009	0,460999
nobutanoate	0,038091374	0,040100445	0,002009072	13,12199848	0,776672735	0,461270
	-0,032670231	-	0,025044917	13,51076871	0,776081944	0,461541

		0,007625315				
methoxykynurenamine	0,011758637	0,177410559	0,165651921	18,45098602	0,768365985	0,465089
	-0,005609959	0,024468722	0,030078681	14,38034852	0,767968239	0,465273
	-0,027537481	-0,072306139	-0,044768658	11,98038169	0,767556874	0,465463
	0,154971101	0,147257385	-0,007713716	13,68132451	0,766853842	0,465788
hylpuromycin-5'-phosphate	0,025877449	0,088538313	0,062660864	13,38355561	0,765349244	0,466484
	0,004292706	-0,030718973	-0,035011679	11,91701044	0,762772331	0,467679
osatrienoic acid	-0,012617665	-0,068476947	-0,055859282	14,80487757	0,762535485	0,467789
te	0,061117089	0,005161161	-0,055955928	14,6182773	0,762269565	0,467912
enzoate	0,011495339	0,063198056	0,051702717	12,96682085	0,760638205	0,468670
	0,072156788	0,035786667	-0,036370121	13,07138104	0,760037902	0,468950
	-0,222861242	-0,058153946	0,164707296	12,49202189	0,759020677	0,469424
glucoside	-0,170800252	-0,01384949	0,156950762	13,75273065	0,753123175	0,472180
	-0,037209246	-0,026611189	0,010598057	12,82799647	0,749406996	0,473925

yline	0,028549316	0,054631398	0,026082081	13,91409859	0,748896051	0,4741662
ol	0,06513336	-0,02585577	-0,09098913	13,79788977	0,744430876	0,4762729
	-0,019050598	-0,060129047	-0,04107845	12,84363453	0,74157827	0,4776238
rilliant blue	0,132649807	0,079040616	-0,053609191	14,68661225	0,741501056	0,477660
ulic acid	0,056987073	0,088522397	0,031535325	12,68461338	0,740933838	0,4779295
	0,052707255	0,020545771	-0,032161484	13,56106234	0,740687438	0,4780464
	0,001040957	-0,024495168	-0,025536126	12,81049638	0,739903396	0,4784187
	0,052810702	0,002841742	-0,04996896	12,38389873	0,739343557	0,4786847
te	0,032910826	0,220941726	0,1880309	19,27682389	0,738070822	0,4792900
e	-0,064398918	-0,195161775	-0,130762857	15,13953876	0,737821237	0,4794088
eucine	0,00067824	0,082960603	0,082282363	14,74220658	0,736789532	0,4799001
	-0,06818118	0,021628619	0,089809799	14,07685737	0,735993406	0,4802797
	-0,068049445	-0,030625738	0,037423707	13,4222436	0,735331369	0,4805955
id	-0,018626207	0,152952856	0,171579063	13,94499537	0,732355667	0,4820176
	0,10253081	0,096455338	-0,006075473	13,23545459	0,731635728	0,4823623

pha,22E,24R)-3,5,9-Trihydroxy-23-methylergosta-7,22-	-0,018052566	-0,06135508	-0,043302514	13,49368716	0,731503259	0,482425
-1,2,3,6-tetrahydropyridine N-oxide	-0,032224622	-0,069542531	-0,037317909	13,50005419	0,728776359	0,483733
	0,11779718	0,045762915	-0,072034266	15,77998444	0,727931735	0,484139
axanthin B	-0,036619485	0,049197764	0,085817249	13,90864574	0,727837431	0,484185
nzoquinone	-0,053019725	-0,0399659	0,013053825	12,82452377	0,725838758	0,485147
	-0,01440614	-0,065669407	-0,051263267	13,92587974	0,72514994	0,485479
	-0,018113701	-0,040531093	-0,022417392	13,34946998	0,719008369	0,488448
adimicinone II	-0,079751876	-0,000233615	0,079518261	13,57865153	0,718098994	0,488890
	0,030351928	-0,021251916	-0,051603844	18,861692	0,717869264	0,489001
o-7-carbaguanine	0,003977939	-0,033452923	-0,037430862	14,17689052	0,717576788	0,489143
canoic acid	0,073352484	0,011158127	-0,062194356	16,52464055	0,714768266	0,490510
undecenoic acid	-0,047285634	-	0,029451592	12,70859295	0,712636725	0,491549

		0,017834043				
id	-0,079884174	-0,109914703	-0,030030529	14,10076827	0,711464257	0,4921223
	-0,092744077	-0,044067129	0,048676948	16,2230475	0,709766879	0,4929526
	-0,044720786	0,064859165	0,109579951	12,68999571	0,705610201	0,4949919
nide	0,008636151	-0,022999215	-0,031635366	12,48212404	0,699510161	0,4980001
de	-0,107450956	0,002586144	0,1100371	13,67421525	0,697178032	0,4991551
noside 7-glucoside	0,054131355	-0,002044597	-0,056175952	14,55396721	0,695629574	0,4999234
L-putrescine	-0,01808331	-0,048657153	-0,030573842	13,07046483	0,693631783	0,5009165
B	-0,086358991	-0,129788102	-0,043429111	14,90444525	0,690160104	0,5026469
	0,100975849	0,091043758	-0,009932091	14,37629248	0,689176665	0,503138
	-0,032342325	-0,059239191	-0,026896866	13,88666823	0,686558705	0,5044484
600) monoricinoleate	0,062272488	0,028279124	-0,033993365	13,66722873	0,679627078	0,5079341

	-0,053583283	-0,138191924	-0,084608641	13,28586429	0,677505058	0,5090060
eate	0,039327639	0,039046003	-0,000281636	14,00032041	0,673674518	0,5109468
c acid	-0,033014482	-0,06824863	-0,035234147	14,7046482	0,673171334	0,5112023
ine	0,033135614	0,052103457	0,018967843	13,65959037	0,672447197	0,5115703
-LD-PI-pool	-0,006126651	0,067835601	0,073962252	12,99111395	0,668246673	0,5137097
	-0,127064021	0,046975636	0,174039657	16,02084823	0,666398409	0,5146540
-4-dehydro-2,6-dideoxyglucose	-0,017983212	0,008764562	0,026747774	14,11042283	0,664542954	0,515603
	0,031135769	0,043087322	0,011951553	14,13301752	0,663896009	0,5159352
	0,040049136	0,076953395	0,036904258	13,69881609	0,65974173	0,5180693
	0,058153467	-0,039886626	-0,098040093	13,18734435	0,658605911	0,5186544
	0,010280849	0,046478946	0,036198098	12,23682468	0,658483363	0,5187175
	-0,008960417	0,042803136	0,051763552	17,15376035	0,657519549	0,5192146
	-0,011666486	0,054678832	0,066345319	12,93144706	0,653620589	0,5212301
	-0,065748895	-0,161544485	-0,09579559	13,97668581	0,653378225	0,5213557
	-0,001618644	0,132815928	0,134434573	16,54086155	0,651922092	0,5221106
	-0,077003237	-	0,06917643	13,05088863	0,648500128	0,5238891

		0,007826807				
	0,173161109	0,13971182	-0,03344929	14,42480103	0,645474127	0,525466
	-0,033252458	0,034528416	0,067780874	12,14430679	0,640133146	0,528263
	0,060235751	0,032916945	-0,027318806	13,59795747	0,63897412	0,528872
	-0,277286182	-0,058055794	0,219230388	16,52436764	0,633191104	0,531920
	0,034124555	-0,044383047	-0,078507602	13,06283549	0,631415787	0,532860
arabinosylxylose); 12-Hydroxynevirapine glucuronide	0,04558404	0,026201397	-0,019382642	14,00018563	0,629717257	0,533760
oxol-5-yl)-2-oxoacetic acid	0,00507926	-0,057447648	-0,062526908	12,63015347	0,626889754	0,535262
	0,018856523	-0,049824757	-0,068681281	18,80330892	0,626161112	0,535650
c	0,041931091	0,067239129	0,025308037	13,17697734	0,625920848	0,535778
an	-0,018578196	-0,030710234	-0,012132038	12,29496992	0,624519286	0,536525
	-0,04872211	-0,045414335	0,003307775	12,75013607	0,623402753	0,537121
ulfidosulfate	0,059470941	0,025260609	-0,034210332	13,12063146	0,621890242	0,537929

	0,010191738	0,049863166	0,039671428	13,13382794	0,620551354	0,538645
	-0,018526915	-0,034219381	-0,052746297	14,91346753	0,619308837	0,539311
ic acid	0,042505303	0,003381924	-0,039123379	13,01719424	0,617947077	0,540042
	-0,00745884	-0,021719686	-0,029178526	15,65634497	0,616811675	0,540652
	0,052273319	0,048587398	-0,003685921	12,98325663	0,614900663	0,541680
hydroxybenzoyl)-L-lysine	0,013790667	0,080845369	0,067054702	13,55965935	0,613339348	0,542521
	-0,034643289	0,010641927	0,045285215	15,61693017	0,607816253	0,545508
ide	0,031484326	0,018740289	-0,012744037	13,66691092	0,606908064	0,546001
FA12:0)	0,059993348	0,008406538	-0,05158681	16,51231036	0,605896562	0,546550
	0,049149315	0,006320791	-0,042828524	15,276558	0,604162302	0,547493
	0,035155887	0,046978083	0,011822196	13,02144659	0,602976945	0,548139
nophen sulfate	-0,131140468	0,010817553	0,141958021	16,96897408	0,601573312	0,548904
n 3-(3-methyl-gallate)	0,007714656	0,073872754	0,066158098	14,32109075	0,601052267	0,549189
	-0,028366037	-0,046932696	-0,018566659	12,7824543	0,600853923	0,549297
ole carboxylate	0,029825984	0,172706594	0,14288061	12,77605544	0,600017537	0,549754
	-0,028735166	-	0,011445754	11,72444956	0,597770497	0,550984

		0,017289412				
nosyl-(1->2)-galacturonide]	0,006680811	-0,02728271	-0,033963521	14,6260352	0,597458179	0,551155
ydropyridine-2-carboxylate	0,000687493	0,05181263	0,051125136	12,32923199	0,597191759	0,551301
	-0,016004981	-0,05254337	-0,036538389	13,38844117	0,596079834	0,551911
	-0,0912585	0,04121641	0,13247491	17,29685177	0,592730249	0,55375
e	-0,085945957	-0,025396769	0,060549188	17,83041823	0,591919218	0,554198
	-0,026798528	-0,028723257	-0,001924728	13,46621216	0,590340444	0,555069
	0,005047981	0,03926984	0,034221859	12,69721344	0,589561899	0,555499
	-0,035624071	-0,00585435	0,029769721	12,97832795	0,589145672	0,55572
	0,03023794	-0,012094186	-0,042332126	12,1234231	0,588173795	0,556266
ylic acid	0,039205673	0,031116611	-0,008089062	13,24781759	0,587709009	0,556523
te	-0,016288949	-0,062641711	-0,046352761	16,10903542	0,584936658	0,558060
	-0,233088985	-0,10862745	0,124461535	15,45218046	0,583498539	0,558858
ne	0,026524042	0,07327824	0,046754198	14,19095821	0,581517512	0,559960
	0,010752478	-	-0,028225154	13,14798069	0,579783428	0,56092

		0,017472676				
	-0,010531454	0,026183339	0,036714793	14,00892651	0,57668964	0,562655
ulfonate	0,01551017	0,085305582	0,069795413	14,10961571	0,576322697	0,562860
F	0,044741772	0,008588676	-0,036153096	14,61656984	0,573701344	0,564330
	0,030296433	-0,021093063	-0,051389495	14,88361011	0,571903505	0,565340
id	-0,017063799	-0,036775215	-0,019711416	13,86971753	0,570555893	0,566098
	0,029234087	0,037413731	0,008179644	11,63453338	0,568677657	0,567156
mmonio)but-2-enoate	-0,000591376	-0,03210391	-0,031512533	12,52108782	0,568175623	0,567439
esulfonic acid	0,063943246	0,014566657	-0,04937659	16,00062524	0,563086034	0,570319
3:1	-0,044643779	-0,024695664	0,019948115	15,34975377	0,556668032	0,573971
	-0,153544633	-0,010925963	0,14261867	14,09964212	0,552478424	0,576368
	0,021870471	-0,022511505	-0,044381977	14,2850691	0,551274848	0,577059
	-0,0058613	-0,054058042	-0,048196742	11,83621621	0,550988369	0,577223

	-0,028148641	0,013453441	0,041602082	13,53268873	0,550545789	0,5774777
"2b" aglycone	0,003082466	0,036159764	0,033077297	13,45258356	0,548891892	0,5784285
hyl)-4-oxo-4,5-dihydro-1H-imidazol-5-ide	0,021478561	0,064527509	0,043048948	14,43964476	0,548891614	0,5784286
	-0,05387991	-0,0622815	-0,008401591	13,08243078	0,547888609	0,5790060
	-0,014184409	-0,051127388	-0,065311797	14,49568502	0,544380526	0,5810301
	-0,023340036	-0,021677912	-0,045017948	13,6665845	0,543878836	0,5813201
	0,069464131	0,188275091	0,118810961	14,8737227	0,53970296	0,583740
	-0,012513456	0,014365008	0,026878465	14,49084255	0,536637673	0,5855228
nophen sulfate	0,036926818	0,15054291	0,113616091	16,67209685	0,536378325	0,5856739
	0,045004496	0,027531458	-0,017473038	11,85397699	0,531381343	0,5885927
nide	-0,084457037	-0,010941523	0,073515514	13,23520353	0,531136482	0,5887361
	-0,00090533	-0,026056132	-0,025150802	13,59724322	0,528885098	0,5900563
	-0,032848637	-0,006094277	0,02675436	13,46802227	0,527958287	0,590600
ngosine	0,006407768	-	-0,03637563	13,34865286	0,526677941	0,5913535

		0,029967862				
cine	-0,01862008	0,071268929	0,089889009	14,25874684	0,519625908	0,595517
	0,021432335	0,044785057	0,023352722	13,48959896	0,517955884	0,596507
galloylglucoside)	0,029165992	0,018230951	-0,01093504	13,86401466	0,514323665	0,598667
	0,048868296	0,09026327	0,041394974	15,20771681	0,512938719	0,599493
bubioside	-0,049168569	-0,005639513	0,043529056	13,91057831	0,508309349	0,602261
innamic acid	0,148275188	0,159884749	0,011609561	16,34340922	0,507744921	0,602599
	0,114334632	0,105686097	-0,008648535	15,17639574	0,506973704	0,603062
	0,039386501	0,043570985	0,004184484	13,76802856	0,503803582	0,604967
	0,071116918	0,223196429	0,152079511	17,88902834	0,502890399	0,605517
hyl ketone	0,014479977	0,030125461	0,015645483	13,92670514	0,502819451	0,605560
ecin	-0,046318693	0,022437911	0,068756604	13,15197466	0,501224548	0,606522
	0,033204702	0,000112065	-0,033092636	15,71194912	0,500330506	0,607062
	-0,060258647	-0,043906928	0,01635172	14,65078505	0,498936462	0,607904
	0,042537773	0,014802402	-0,027735371	14,0486794	0,49870654	0,608044
	-0,112960533	-0,036775859	0,076184674	13,45721885	0,497048722	0,609048

	0,034324095	0,021661461	-0,012662633	12,05482429	0,495542428	0,609961
	-0,031916688	-0,019788987	0,012127701	13,26590671	0,495124555	0,610215
xyphenyl)ethyl]-3-[4-methoxy-3-(sulfooxy)phenyl]prop-2-	0,04281268	0,000399505	-0,042413175	12,99272165	0,49400386	0,610896
	-0,100338003	-0,017606404	0,0827316	13,70379591	0,485893224	0,615847
meprazole	-0,228349549	-0,030163946	0,198185603	16,7323049	0,483258625	0,617464
	0,093857513	0,043247714	-0,050609799	14,51450617	0,483000552	0,617623
lucoside	0,02814024	0,019201251	-0,008938989	13,553944	0,479503408	0,619777
olin	-0,01590239	0,040523873	0,056426263	13,77298548	0,479145742	0,619997
	0,021297882	0,03231299	0,011015108	13,52617104	0,477411147	0,621069
	0,015144128	0,110261417	0,095117289	13,94337895	0,476254987	0,621784
oxy-16-heptadecen-4-one	0,045620047	0,033368744	-0,012251303	14,17915036	0,47527221	0,622393
e	-0,005776877	-0,029960916	-0,024184039	13,93053019	0,472713958	0,623980
	0,085762005	0,137184068	0,051422062	13,60708711	0,472627131	0,624034
	-0,002890369	-	-0,037001999	13,98692185	0,471188569	0,624928

		0,039892367				
	0,06666187	0,173968637	0,107306767	15,36648276	0,470189102	0,625550
dienoyl)-glycero-3-phosphate	0,043570555	0,020553424	-0,023017131	13,79178785	0,470098749	0,625606
	0,035611974	0,064647547	0,029035573	13,23805999	0,467091231	0,627482
	-0,001822725	-0,037240374	-0,035417649	13,40357073	0,464528794	0,629085
	-0,04472332	-0,054324743	-0,009601423	13,1830287	0,464012706	0,629408
	-0,057492285	-0,073320406	-0,015828121	14,23100241	0,463152215	0,629947
	-0,026832893	-0,04670486	-0,019871967	14,8903605	0,46310221	0,629979
5Z,8Z,11Z,14Z))	-0,0229467	-0,083233513	-0,060286813	16,17890227	0,462579132	0,630307
thyl-5-hydroxy-6-methoxy-1,4-benzoquinone	-0,043295558	-0,063598989	-0,020303431	13,86820486	0,458390208	0,632941
eta-didehydrophenylalanyl-L-leucyl]	0,017933263	0,044938604	0,027005341	14,42016085	0,453388883	0,636101
xose	0,08849364	0,051953416	-0,036540225	12,6614839	0,452461506	0,636688
	0,043282838	0,057208908	0,013926071	14,74983664	0,452397072	0,636729
dine nucleoside triphosphate	-0,024540498	-	0,017184693	13,65487236	0,451195968	0,637491

		0,007355805				
	-0,006506468	0,023094192	0,02960066	13,29998007	0,45024686	0,638094
	-0,057054432	-0,100605472	-0,04355104	12,88636589	0,449670767	0,638460
anosyl)-1,4-dihydronicotinamide	-0,088789466	-0,04613192	0,042657546	15,02907556	0,445432271	0,641160
zolyl)ethyl formate	-0,052829183	-0,069851846	-0,017022663	12,35534045	0,440628221	0,644234
oxymethylphosphinyl)butanoate	-0,031152895	-0,056317846	-0,025164951	12,9987595	0,4392329	0,645130
	-0,087774526	0,029269728	0,117044254	13,86123908	0,436712732	0,646751
	0,049392052	0,066054734	0,016662682	13,91667616	0,427287596	0,652850
	0,051831415	0,051311535	-0,00051988	16,40569572	0,425151	0,654241
	0,009049054	-0,019382409	-0,028431463	12,39773179	0,42327683	0,655463
	0,017594051	0,131621685	0,114027634	17,39541081	0,414626232	0,661135
ryl phosphate	-0,045255694	-0,055289337	-0,010033643	13,82828096	0,413951813	0,661579
	-0,066254907	-0,045700523	0,020554384	13,05091519	0,413249963	0,66204

	-0,041825263	-0,072767784	-0,030942521	15,39775598	0,412058106	0,662828
	0,004861611	0,044724347	0,039862736	13,00465602	0,410177168	0,6640712
se	0,045057251	0,034664235	-0,010393016	14,47670794	0,407886356	0,6655882
	-0,014410474	-0,007219533	-0,021630007	13,88460399	0,406241245	0,6666798
-Ls-aspartate; Dihydro-4,6-dimethyl-4H-1,3,5-dithiazine	0,049883357	0,034501944	-0,015381413	11,89651002	0,406093404	0,6667780
	0,009056402	0,083286198	0,074229797	13,79836573	0,405700543	0,6670389
	-0,016298746	-0,041051177	-0,057349923	14,80663184	0,405099642	0,6674383
e	0,032337276	0,02336683	-0,008970446	13,3500498	0,399455101	0,6712017
utan-2-one 4-P	0,013659015	0,070263997	0,056604982	12,36509731	0,399407014	0,671233
rboxymethyl)-C-hydroxycarbonimidoyl]-2-({5,11-dihydroxy-	-0,033985794	-0,00286136	0,031124434	13,31878858	0,395637116	0,6737594
	0,030433966	0,034036269	0,003602303	13,43049858	0,390518711	0,6772036
etylglycine	-0,058842303	-0,128015749	-0,069173446	12,97111477	0,389134887	0,6781379
iol glucuronide	-0,03522245	-0,023160374	0,012062076	13,5242714	0,386462359	0,6799459

	-0,027558811	0,021047952	0,048606763	12,9556845	0,385272875	0,6807521
eitol	0,036759029	-0,007977638	-0,044736667	12,85978048	0,385172388	0,6808203
oquinoxaline	-0,060284586	-0,032084117	0,028200469	11,95502035	0,384263487	0,6814371
nnose(2-)	0,034914499	0,031591835	-0,003322664	13,98199002	0,384012543	0,681607
	-0,005967271	-0,034410901	-0,02844363	13,51105561	0,383523525	0,6819396
	0,075069129	0,039791279	-0,03527785	20,11124407	0,383504864	0,6819523
	-0,035336335	-0,071207197	-0,035870862	13,1250198	0,381121158	0,6835738
	0,056134209	0,117078562	0,060944353	15,04071278	0,379883465	0,6844173
y-3-(phenylazo)-2,7-naphthalenedisulfonic acid	-0,024300287	-0,008597651	0,015702636	13,71567908	0,379473901	0,6846966
nyl)-2(3H)-furanone	0,022569287	0,002442751	-0,020126536	13,68874851	0,378491563	0,6853671
	0,035488051	0,046604849	0,011116798	13,7020003	0,377019521	0,6863731
ermidine; 3-[[5-Methyl-2-(1-methylethyl)cyclohexyl]oxy]-	-0,032331921	-0,024258211	0,00807371	12,73493444	0,376556084	0,6866901
1Z))	-0,028228325	-	-0,03494259	16,31134697	0,376270415	0,6868856

		0,063170915				
xo-4H-chromen-2-yl)phenyl]oxidanesulfonic acid	0,022196815	0,047597565	0,025400751	14,01154651	0,374327249	0,68821
	0,040235482	-0,018003079	-0,058238561	17,19357058	0,374248369	0,688270
Dimethyluric acid	0,06275351	0,101050214	0,038296704	17,40375095	0,370855258	0,690601
	-0,036814746	-0,024584853	0,012229893	13,91757614	0,366945534	0,69329
henylpentanoic acid	0,007455707	0,092520391	0,085064684	14,21625029	0,365099474	0,69457
	0,029844207	0,086319289	0,056475082	11,49811171	0,364805914	0,69477
	0,089327022	0,101382637	0,012055615	12,88054249	0,363995061	0,69533
	0,021823257	0,005425336	-0,016397922	13,01888202	0,361113734	0,69733
	0,049196999	-0,00745586	-0,056652859	13,82803899	0,360628304	0,69767
enyl-2-propenal	-0,014905799	0,017326052	0,032231851	13,77379891	0,359577556	0,69840
	0,033437961	0,007189436	-0,026248525	13,89784379	0,354466143	0,70197
xy-5-methoxyphenyl)ethyl]phenyl}oxidanesulfonic acid	-0,025345873	-0,005985798	0,019360075	13,66811147	0,354086632	0,70223
adienoic acid	0,006189298	0,032849171	0,026659872	13,90247216	0,352878278	0,70308
hiosulfate	0,010010257	-0,021991292	-0,032001549	11,39444818	0,348367348	0,70625

	-0,010656558	0,014084566	0,024741125	13,7818125	0,347368274	0,706956
	-0,047892467	-0,142824685	-0,094932218	17,04401016	0,346134279	0,707826
e	-0,00057015	-0,018719749	-0,018149599	11,86868995	0,344996	0,708629
	0,029308472	0,03032225	0,001013778	13,84080577	0,344616779	0,708897
	0,040767862	0,000374627	-0,040393235	16,0200739	0,344050914	0,709297
id	0,009031338	0,04227571	0,033244372	13,81915553	0,341532185	0,711080
	-0,021636365	0,033091721	0,054728086	15,01865711	0,339882644	0,712250
ecenoic acid	0,008386377	-0,014018373	-0,02240475	13,25209511	0,339799631	0,712309
{[2-oxo-6-(3-oxobutyl)-2H-chromen-7-yl]oxy}oxane-2-	-0,050778885	-0,022399371	0,028379514	12,92001102	0,33925593	0,712695
	0,044443136	0,052428706	0,00798557	13,53768619	0,336665315	0,714538
droxy-4-[(1E)-3-methylbut-1-en-1-yl]phenyl}ethenyl]pheny...	0,044148871	0,047255378	0,003106508	13,49172974	0,333715411	0,716642
	-0,046860688	-0,035271321	0,011589367	12,79919318	0,328834886	0,720137
	-0,016907993	-0,030950376	-0,014042384	12,98677475	0,327532184	0,721073

alactoside	-0,020411695	-0,017295898	0,003115797	13,39543867	0,327267427	0,721263
arboxylic acid	-0,011153988	0,021768283	0,03292227	13,7505018	0,326339966	0,721930
e	-0,06276619	-0,013828961	0,048937229	12,94075144	0,323513612	0,723967
ordinol	0,005234945	0,057650869	0,052415924	13,26900627	0,321572452	0,725369
-methyl-2-(4,8,12-trimethyl-3,7,11-tridecatrienyl)-2H-1-be...	-0,019655371	-0,038376583	-0,018721212	13,10057707	0,320751276	0,725963
decenyl)cyclobutanone	0,011197891	0,04334814	0,032150249	12,98871008	0,320526746	0,726126
idine	-0,024730266	-0,011246361	0,013483905	12,30463851	0,318589137	0,727530
ic acid	-0,031715149	-0,007563141	0,024152008	13,22433542	0,3182132	0,72780
id	0,09353519	0,052165638	-0,041369552	13,9050584	0,317260617	0,728494
olactone	-0,024949599	0,008164442	0,033114042	11,6558979	0,316170015	0,729287
4Z,7Z,10Z,13Z,16Z,19Z))	-0,049916396	-0,080820557	-0,030904161	16,01401316	0,315529732	0,729752
	-0,033709816	-0,050251553	-0,016541737	13,84491219	0,314299942	0,730648

acid	0,001423309	0,038017367	0,036594058	13,79075269	0,312951409	0,731631
	-0,024994949	-0,001855217	0,023139731	12,14381396	0,312273055	0,732126
	0,017392318	-0,020075513	-0,037467831	12,6493297	0,309970513	0,733808
-3,12-dihydroxy-24-oxo-7-(sulfooxy)cholan-24-yl]-Glycine	-0,006593376	0,016247992	0,022841368	13,12857816	0,302789783	0,739081
	0,03596481	-0,017985851	-0,053950661	15,86810447	0,302206393	0,739511
ecadienoic acid	0,015265107	-0,063224946	-0,078490053	16,45362118	0,300337858	0,740890
-2-deoxy-alpha-D-ribo-hex-3-uluronate	0,02116011	0,005844675	-0,015315435	14,02091057	0,298953543	0,741913
2-a]pyrazine	0,004860614	0,019071565	0,014210952	13,02477382	0,297731673	0,742818
phenyl)-7-(3,7-dimethylocta-2,6-dien-1-yl)-5-hydroxy-2-	0,005443255	-0,031194047	-0,036637301	13,65558197	0,296508543	0,743724
e	0,029605577	0,023950231	-0,005655346	13,54016264	0,294978916	0,744860
ol glucuronide	0,042535545	0,080174518	0,037638973	13,11209336	0,294824468	0,744974
an	0,108096165	0,164701276	0,056605111	13,64205972	0,294667283	0,745091
	0,041706163	0,020079532	-0,021626631	13,4661354	0,286368367	0,751283
	-0,0999659	-0,002852634	0,002852634	12,65383876	0,284515526	0,752672

		0,097113267				
	0,010408383	-0,017374374	-0,027782757	13,97045109	0,281431277	0,7549913
[(4-hydroxy-7-methoxy-2,2-dimethyl-3,4-dihydro-2H-1-	0,03522735	0,053909809	0,018682459	14,22176478	0,279980756	0,756084
ethyl-2-(methyldithio)propanal	0,055763694	-0,003084812	-0,058848506	16,26088282	0,27949705	0,7564491
curonide	-0,046407612	-0,022133327	0,024274285	14,44180015	0,276592563	0,7586434
misinin	0,013046311	-0,026048261	-0,039094572	15,34573264	0,274254444	0,7604146
quine	-0,028613875	-0,023980419	0,004633456	12,59320668	0,272888789	0,7614510
	0,014651937	0,030683242	0,016031305	11,62988852	0,266943758	0,7659795
	-0,006774768	-0,050306156	-0,043531388	16,13815753	0,263735972	0,7684342
	-0,013777621	-0,025935983	-0,012158363	17,50327075	0,260621373	0,7708253
d (ABA)	0,032010436	0,006729502	-0,025280934	15,05018644	0,260360852	0,771025

	-0,027107606	-0,002763967	0,024343638	14,12805846	0,259525631	0,771668
)	0,018180608	0,024456884	0,006276276	12,97078765	0,257177109	0,7734781
	-0,062418534	-0,036162949	0,026255584	13,91430984	0,256025846	0,7743669
	0,024392525	-0,010726219	-0,035118744	15,01969191	0,252395758	0,7771761
	0,040428871	0,030993722	-0,00943515	14,90590384	0,252098284	0,7774068
ate	0,028252909	-0,011260625	-0,039513534	13,88023045	0,251617952	0,7777794
nic acid	0,022341312	-0,005686303	-0,028027615	16,29186264	0,251298127	0,7780276
	-0,017162612	-0,039510687	-0,022348074	15,52735664	0,24761639	0,7808904
cid	0,054946362	0,060883091	0,005936729	18,85417128	0,246795388	0,7815303
dospermatine	0,012801486	-0,035739493	-0,048540979	18,65186757	0,24649749	0,7817625
	-0,027349858	-0,014803602	0,012546256	11,48676224	0,244369426	0,7834240

	0,013285055	0,109399443	0,096114388	15,11351897	0,238810576	0,7877809
ate	0,003745953	0,023696855	0,019950902	13,66112739	0,23664165	0,7894874
	0,016045531	-0,00366082	-0,019706351	13,25418413	0,231941378	0,7931985
ne	-0,025248736	-0,018603143	0,006645593	13,78566882	0,231678227	0,7934068
ate	-0,015083372	-0,018698958	-0,003615586	13,17905336	0,230293326	0,7945039
Dodecatrien-1-ol	-0,033194538	-0,013890538	0,019304	13,1147492	0,228298678	0,7960868
	-0,039105067	-0,02199249	0,017112577	13,1048436	0,22734619	0,7968437
yl-leucyl-phenylalanyl-methylester	0,017728331	0,017257356	-0,000470975	13,10975046	0,226680102	0,7973735
	0,031045311	0,012876911	-0,0181684	14,04543621	0,226093985	0,7978400
''-methoxy-8-prenylflavone 3-[rhamnosyl-(1->6)-	-0,001371393	-0,027218	-0,025846607	13,60556014	0,224814367	0,7988593
y-4-methoxyphenyl)propanoic acid	0,004578011	-0,013018781	-0,017596792	13,9904779	0,221543146	0,8014712
	-0,027575724	-0,028214163	-0,000638439	11,99238457	0,221251818	0,8017042
ucose(2-)	0,013653791	0,011652292	-0,002001499	13,97371083	0,220236852	0,8025166

	0,017173275	-0,006431264	-0,023604538	11,39537915	0,220184049	0,802558
oxy-3,8''-bilign-7-ene-3'',5-dimethoxy-4'',9,9''-triol ...	0,015648949	0,027492403	0,011843454	13,42276348	0,219136022	0,803398
	-0,003848532	0,016364666	0,020213198	12,38690403	0,218392571	0,803994
	0,025776669	0,02293436	-0,002842309	14,68362584	0,213933455	0,807580
	-0,004507088	-0,026463984	-0,021956896	13,90795984	0,213781258	0,807703
2-(1-hydroxy-3-methoxy-4-oxocyclohexa-2,5-dien-1-yl)-6-	0,004555915	-0,018921938	-0,023477853	14,90851206	0,21302588	0,808312
-methoxy-8-prenylflavan 2'',7-diglucoside	0,010341633	0,020806734	0,010465101	13,51786484	0,2125414	0,808703
	-0,072067126	0,019964428	0,092031554	12,92261238	0,212007924	0,809133
acid	-0,055597937	-0,037489956	0,018107982	16,97670567	0,211961316	0,809171
c acid	-0,026444633	-0,010728992	0,015715641	12,17005135	0,2116889	0,809391
	-0,018696996	-0,010331161	0,008365835	13,48809768	0,208639276	0,811858
	-0,035105988	0,009196803	0,04430279	14,05889646	0,206982926	0,813201
d	0,02682868	0,005385491	-0,021443189	14,07662661	0,203321916	0,816178

	-0,023408149	-0,023696984	-0,000288835	14,77807769	0,195702392	0,822408
lalanine	0,02441044	0,023832337	-0,000578103	12,54902726	0,194915921	0,823054
	-0,00522066	-0,019112585	-0,013891925	13,89645404	0,192641875	0,824925
methyl-2-(2-methylpropyl)thiazole	-0,00358093	-0,049418088	-0,045837158	11,80333478	0,189273797	0,827703
	0,002893538	0,024803953	0,021910415	12,7632213	0,188024863	0,828735
	0,009342958	0,022201634	0,012858676	13,76262485	0,187640644	0,829053
l	0,006880955	-0,048261407	-0,055142362	15,281853	0,186072915	0,830351
nthate	-0,007380202	-0,015381745	-0,008001544	13,23922039	0,182611028	0,833226
	-0,018971967	-0,013314882	0,005657085	13,54168195	0,182491854	0,833325
etone	-0,012943586	-0,021625419	-0,008681833	12,3641235	0,18186361	0,833848
ic acid	-0,012920954	-0,019174312	-0,006253357	15,23696957	0,181796627	0,833903

nyl-delta-N,N-Dimethylguanidynol) valeric acid	0,000939507	0,023211593	0,022272086	12,40601736	0,175975436	0,838764
	-0,035456591	-0,021675789	0,013780802	14,15106444	0,175311647	0,839320
	0,002601058	-0,022782855	-0,025383913	13,79746674	0,170607967	0,843270
	-0,0290628	0,011760089	0,040822889	14,34071061	0,17042911	0,843421
ydroridentin B	-0,014976543	-0,019622858	-0,004646316	13,5384517	0,169379054	0,844305
ole	-0,028687079	0,020116408	0,048803487	11,98562068	0,168568246	0,844989
side	-0,005315061	0,025966512	0,031281573	13,45342962	0,168390002	0,845139
sphoethyl)thiazole	0,01560957	0,017574818	0,001965248	12,33591999	0,168129989	0,845359
	0,022392457	-0,005514255	-0,027906712	14,05289069	0,165326864	0,847728
	-0,023643514	-0,010455745	0,013187769	13,19254336	0,164260217	0,848631
p-coumaroylglucoside)	0,014749368	0,015430597	0,000681228	13,11309096	0,163511444	0,849266
phospho-D-ribosylamino)pyrimidin-4(3H)-one; 5-[(6-	0,035513729	0,017740089	-0,01777364	15,48434332	0,161365913	0,851087
{[1-(4-methoxyphenyl)pentan-3-yl]oxy}oxane-2-carboxylic	-0,011141221	0,094162685	0,105303906	19,45853239	0,161047565	0,851358

hyltetracosanoic acid	-0,021397176	-0,015718444	0,005678732	13,71816397	0,157282971	0,8545643
	-0,014929382	-0,04096229	-0,026032908	12,86059095	0,156918694	0,8548752
	-0,021554976	-0,004129647	0,017425329	12,14666445	0,156474711	0,8552542
9Z,12Z))	-0,03239111	-0,05591264	-0,02352153	16,11631333	0,155872356	0,8557688
	-0,022135281	0,011877052	0,034012333	12,52608131	0,154837599	0,8566534
mide	-0,003161295	-0,020053656	-0,016892361	12,38515909	0,153370144	0,8579096
	0,022180585	0,022609933	0,000429348	13,22173847	0,152963181	0,8582583
xyphenyl)propanoic acid	-0,042260107	0,007865314	0,050125422	17,33967612	0,150904412	0,8600244
	-0,033709621	-0,018244938	0,015464683	13,42328865	0,148905611	0,8617427
	0,013108754	0,017573697	0,004464943	13,09098495	0,148065895	0,8624656
2-a]pyrazine	-0,019602043	-0,019706082	-0,000104039	12,63352871	0,144721115	0,8653511
	0,009699018	-0,011141613	-0,020840632	13,53211205	0,141998048	0,8677074

	-0,023208562	-0,027056925	-0,003848363	12,20075766	0,140509214	0,868998
lbenzoic acid glucoside	0,055549485	0,068964733	0,013415248	14,83145234	0,138766745	0,870512
xyphenyl)-2-hydroxy-3-[3,5,7-trihydroxy-2-(3-	0,011479085	0,01466872	0,003189635	13,83330859	0,138646963	0,870616
	-0,026121574	0,0025014	0,028622974	13,26675775	0,137588977	0,871536
xy-6-methyl-5-oxooxan-2-yl)-5-hydroxy-2-(3-	-0,011631196	0,00082963	0,012460826	13,56387387	0,136618155	0,872381
	0,099451482	0,001103496	-0,098347986	13,73929651	0,135464902	0,873387
	0,006232688	0,018454206	0,012221518	13,68397869	0,132889159	0,875636
	-0,009510974	-0,000266126	0,009244848	13,51042031	0,132722814	0,875782
hyl-2,3-furandione	0,004448327	0,018578877	0,01413055	12,92721563	0,127312433	0,880527
	-0,005029902	-0,01620685	-0,011176948	13,38658205	0,125781789	0,881874
a-D-glucuronopyranoside	-0,015125766	-0,004814794	0,010310972	13,98773728	0,124556024	0,882954
sterone	0,012462832	-0,003261864	-0,015724696	13,48657546	0,122143264	0,885085
	0,005059688	0,015565322	0,010505634	16,60281334	0,118435084	0,888369

5-trimethoxyphenyl)propanoic acid	-0,053590721	-0,017864118	0,035726603	16,36385238	0,114042244	0,892276
sanoic acid	-0,020957302	-0,033711964	-0,012754663	13,73690217	0,112993844	0,893211
side	0,00097674	-0,010249359	-0,011226099	13,75200021	0,109685175	0,896168
de	-0,010889505	-0,017056751	-0,006167246	13,44690829	0,109145024	0,896651
cid	0,016223229	0,015809025	-0,000414204	13,47385142	0,106583968	0,898948
ns-2-cis-6-nonadienamide	0,038353691	0,022837654	-0,015516037	12,01544729	0,105576663	0,899853
	0,026528159	0,005353863	-0,021174296	16,5209883	0,103831268	0,901424
	-0,046706632	-0,046182123	0,000524509	13,15257113	0,103417344	0,901797
	-0,025181002	0,001323716	0,026504718	15,78762595	0,100176601	0,904721
anesulfenothioic acid; Hypoxanthine	0,019411204	-0,008198817	-0,02761002	17,02094763	0,097605213	0,907048
ine	0,006788562	-0,007706904	-0,014495466	13,58074974	0,097112715	0,907495
	0,016015831	0,018300216	0,002284385	13,9467474	0,096490448	0,908059

	0,016685951	0,009551482	-0,007134468	12,44890806	0,095418919	0,909032
	0,008384039	0,014160654	0,005776614	12,63717405	0,093029882	0,911204
henylhydrazine	-0,023339157	-0,014802027	0,00853713	13,15804021	0,092656285	0,911544
	-0,006430161	0,009144462	0,015574623	13,56759162	0,08900437	0,914876
	0,016007869	0,015810389	-0,00019748	12,88489738	0,088046397	0,915752
3,17-beta-sulfate	0,007482133	-0,012025524	-0,019507657	13,00777494	0,086482961	0,917184
	-0,015919307	-0,024382227	-0,00846292	14,92872519	0,086316748	0,917336
	-0,012380728	0,00322563	0,015606359	13,58622654	0,083513051	0,919910
	0,013069823	0,003820605	-0,009249217	12,855543	0,081223145	0,922017
etrahydro-1-methyl-beta-carboline-3-carboxylic acid	-0,015004515	0,015432538	0,030437053	14,47754384	0,080698574	0,922500
o	-0,005178553	0,016147507	0,021326061	13,66000224	0,07893883	0,924124
({2-[6-(2-methylbut-3-en-2-yl)-7-oxo-2H,3H,7H-furo[3,2-g...	0,003584557	-0,009606451	-0,013191009	13,92644506	0,077172858	0,925756
; 1-Hydroxypyrene	0,039625252	0,011342575	-0,028282677	13,97570282	0,077056078	0,92586
ntadienoic acid	-0,017194187	-0,003775266	0,013418921	16,3989151	0,075572488	0,927238

hine dinucleotide	0,001505729	0,010444713	0,008938984	13,47731214	0,072347354	0,9302312
c acid	0,00198067	0,012788184	0,010807515	13,5474782	0,061863043	0,9400290
	0,006243947	0,01829087	0,012046923	13,86360085	0,060994677	0,9408451
	0,002895478	0,024555226	0,021659748	14,18841495	0,060639869	0,9411788
	-0,009420216	-0,001548761	0,007871455	12,76450707	0,059272838	0,9424656
ucuronide	0,05069316	0,013203838	-0,037489322	17,06527008	0,057914759	0,9437456
	0,021257431	0,01277169	-0,008485741	14,23662125	0,056912914	0,9446911
ndrosterone-3-glucuronide	-0,002770976	0,018597524	0,021368499	14,5811862	0,056301726	0,9452683
l-isochromen-3-yl)but-3-en-2-yl]oxy}sulfonic acid	0,016896958	-0,001671936	-0,018568893	12,97622731	0,055548457	0,9459802
id; Dapiprazole	-0,002222301	0,008523653	0,010745954	12,86224324	0,051284236	0,9500206
	-0,006141417	-0,013662866	-0,007521449	12,44684799	0,049384093	0,9518266
10:0)	0,026129159	0,045758663	0,019629504	17,86469142	0,04677393	0,9543132
-(3-hydroxyphenyl)-3,4-dihydro-2H-1-benzopyran-4-yl]-2-	0,005014698	0,004866584	-0,000148114	13,28489583	0,036365632	0,9642938
	0,010429741	0,012673993	0,002244252	13,2612738	0,035383978	0,9652405
	-0,01274411	-0,00252601	0,0102181	15,37527774	0,033556264	0,9670057

n A	0,006247845	0,007614736	0,001366892	13,89051547	0,031672381	0,968828
glycone	-0,008198498	0,000873344	0,009071841	13,45839314	0,026196146	0,974147
	0,032476139	0,009881923	-0,022594216	12,86337676	0,025272674	0,975047
	0,027203151	0,005039527	-0,022163624	14,0413677	0,025214717	0,975103
	-0,007260343	0,000500169	0,007760513	13,54741665	0,022233286	0,978014
propylphenol	-0,00974571	0,004418867	0,014164576	15,47390407	0,01883077	0,981347
	0,012448058	0,008946226	-0,003501832	12,97106519	0,018627809	0,981546
	-0,004602741	0,000571915	0,005174656	14,0880322	0,015710762	0,984413
rboxymethyl)-C-hydroxycarbonimidoyl]-2-[(1-hydroxy-2,4-	-0,012175485	-0,010202287	0,001973198	13,35418954	0,015012634	0,985100
lucosinolate	0,009523509	0,003045465	-0,006478044	13,26799592	0,014817267	0,985293
ydroxy-8-oxo-6-octenoyl)-sn-glycero-3-phosphatidylcholine	-0,00662792	-0,002316865	0,004311055	13,32446886	0,010304235	0,989749
lene)-1,6-dioxaspiro[4.4]non-3-ene	0,028833888	0,028618823	-0,000215066	15,27588565	0,010277868	0,989775
ate	-0,003898697	-0,000500146	0,003398551	12,86471318	0,009425438	0,990619
ate	0,002744144	0,006029029	0,003284886	13,39265853	0,00731957	0,992707
onylglucoside) 5-glucoside	-0,003044185	0,0001092	0,003153385	13,81488947	0,006816585	0,993206
side	-0,000526042	-0,00315715	-0,002631109	13,46377066	0,004539425	0,995470

5. Πίνακας 5: Λίστα των σημαντικών μεταβολιτών από όλες τις αναλύσεις

	0,003773743	0,011854919	0,008081176	13,74148534	0,004300638	0,995708
-2-pentanone	0,010615	0,007381007	-0,003233994	12,93245426	0,004259632	0,995749
	-0,004442314	-0,005156812	-0,000714498	16,73731352	0,001182571	0,998818
trihydroxy-leukotriene B4	0,001655633	-0,000229974	-0,001885607	14,01300587	0,00107813	0,998922

Η παρούσα μελέτη αξιολόγησε 1394 μεταβολίτες για τον εντοπισμό ενδοτύπων σήψης μεταξύ τριών ομάδων ασθενών, δηλαδή MALS, ανοσοπαράλυσης και μη ταξινομημένων. Τα πινακοποιημένα αποτελέσματα αυτής της αξιολόγησης παρουσιάζονται στον πίνακα 4. Η τιμή p που χρησιμοποιήθηκε στην ανάλυση ορίστηκε σε p <0,05. Ο πίνακας παρέχει μια σαφή ομαδοποίηση των μεταβολιτών, η οποία είναι ζωτικής σημασίας για την ταυτοποίηση των ενδοτύπων σήψης. Τα ευρήματα μπορεί να έχουν σημαντικές επιπτώσεις στη διαχείριση και τη θεραπεία της σήψης.

MALS: σύνδρομο ενεργοποίησης μακροφάγων

Name	All	MALS vs Immunoparalysis	MALS vs Unclassified	Immunoparalysis vs Unclassified
Homovanillic acid	**1.236E-08**	**0.001811309**	**1.49489E-09**	**0.001201948**
Thiothixene	**5.399E-07**	**0.020978485**	**7.19764E-08**	**0.000566715**
Cortisol 21-sulfate	**5.399E-07**	**0.020978485**	**7.19764E-08**	**0.000725542**
Salsoline-1-carboxylate	**1.07E-06**	**0.009621543**	**1.50567E-07**	**0.007682591**
3-Methoxy-4-hydroxyphenylethyleneglycol sulfate	**1.166E-06**	**0.01640589**	**1.53392E-07**	**0.003027355**
PA(8:0/16:0)	**2.85066E-06**	0.279177647	**1.68822E-06**	**1.01912E-05**
4-Aminohippuric acid	**6.32684E-06**	**0.01640589**	**1.18154E-06**	**0.011739735**
3-Methyleneoxindole	**6.32684E-06**	**0.001811309**	**2.42789E-06**	0.159696204
LysoPC(15:0)	**1.69902E-05**	0.363631478	**1.00133E-05**	**2.41565E-05**
(3R,2'S)-Myxol 2'-alpha-L-fucoside	**2.38793E-05**	**0.020978485**	**4.04906E-06**	**0.017849601**
PC(22:4(7Z,10Z,13Z,16Z)/22:6(4Z,7Z,10Z,13Z,16Z,19Z))	**2.89171E-05**	0.072897487	**4.83436E-06**	**0.003430093**
2-Hydroxyestradiol-3-methyl ether	**3.68992E-05**	0.226391745	**1.06906E-05**	**0.000243543**
4-Acetamidobutanoate	**5.82431E-05**	**0.031706682**	**1.00133E-05**	**0.024588722**
Hippurate	**6.13316E-05**	**0.01640589**	**1.25154E-05**	0.069465621

Carnosol	**0.000156335**	0.193496278	**3.53891E-05**	**0.001290564**
beta-D-Galactosyl-beta-1,4-N-acetyl-D-glucosaminylglycopeptide	**0.00019487**	0.235767957	**5.08073E-05**	**0.000965876**
Arginyl-Cysteine	**0.000196833**	0.348954766	**7.11598E-05**	**0.000319176**
Coumarate	**0.000261829**	**0.01640589**	**7.36873E-05**	0.219150576
Hypaconitine	**0.000273939**	0.234958405	**6.73457E-05**	**0.001448275**
Inodxyl glucuronide	**0.00031281**	0.138993044	**6.34814E-05**	**0.006596257**
PC(DiMe(11,3)/MonoMe(11,5))	**0.000334069**	0.151025163	**6.73457E-05**	**0.006037032**
PC(14:1(9Z)/22:2(13Z,16Z))	**0.000384392**	**0.041576222**	**7.46184E-05**	0.076165069
Tetradecanoyl-CoA	**0.000494511**	0.368240738	**0.000175158**	**0.000648755**
PG(a-13:0/i-22:0)	**0.000532882**	0.075167015	**9.23909E-05**	**0.03157944**
Zeaxanthin diglucoside	**0.000542684**	0.420510727	**0.000225217**	**0.000469985**
Sulpyrine	**0.000595904**	0.280243124	**0.000168427**	**0.001827406**
2-Phenylacetamide	**0.000797031**	0.10364244	**0.000150031**	**0.023383279**
Soyasaponin II	**0.001130969**	0.153558966	**0.000215257**	**0.015182801**
Sulfoacetyl-CoA	**0.001130969**	0.481505815	**0.000427882**	**0.00064252**
Quinquenoside L1	**0.001130969**	0.193496278	**0.000225217**	**0.009343824**
X-206	**0.001130969**	0.179186867	**0.000225217**	**0.012791206**
Norepinephrine sulfate	**0.001130969**	0.418440247	**0.000383642**	**0.001071278**

PA(15:0/20:3(5Z,8Z,11Z))	**0.00118624**	0.295219214	**0.000293096**	**0.003182523**
CDP-DG(a-13:0/i-22:0)	**0.001248029**	0.193496278	**0.000253559**	**0.010142916**
Cyclotricuspidoside C	**0.001248504**	0.13654484	**0.000242909**	**0.02727204**
PS(DiMe(11,5)/DiMe(13,5))	**0.001308865**	0.102896553	**0.000254334**	**0.044354393**
Pelargonidin 3-sophoroside 5-glucoside	**0.001308865**	0.247548328	**0.000293096**	**0.0064304**
Trihexosylceramide (d18:1/12:0)	**0.001308865**	0.479203033	**0.000542948**	**0.00087846**
Trandolaprilat	**0.001396374**	0.280243124	**0.000351659**	**0.004750763**
Carbamoyl phosphate	**0.001396374**	0.58249162	**0.000757811**	**0.000504862**
4-Hydroxyphenylpyruvic acid	**0.001413685**	0.102896553	**0.000293096**	**0.048422075**
Mycothione	**0.001557074**	0.543742125	**0.000757811**	**0.000719548**
Hericene A	**0.001648155**	0.171483956	**0.00034337**	**0.022045707**
Glyoxylic acid	**0.00187447**	0.348954766	**0.000514809**	**0.003754589**
Asparagoside F	**0.001915105**	0.09549316	**0.000401681**	0.071080345
Hexuronate	**0.001937282**	0.451138179	**0.000752083**	**0.00166035**
6-(2-amino-2-carboxyethyl)-4-hydroxybenzothiazole	**0.001937282**	**0.041576222**	**0.00061431**	0.296441244
10,12-Tritriacontanedione	**0.001937282**	0.084447382	**0.000417717**	0.08837054
beta-Damascenone	**0.00194895**	0.15130378	**0.000415372**	**0.033715647**
LPA(a-25:0/0:0)	**0.002000033**	0.193496278	**0.000427258**	**0.02221787**

Magnoloside C	**0.002192834**	0.687180976	**0.00161645**	**0.00049469**
Gein	**0.002360756**	**0.042376073**	**0.000757811**	0.328241238
PE(22:4(7Z,10Z,13Z,16Z)/P-18:1(11Z))	**0.002383283**	0.072897487	**0.000611487**	0.156479472
PA(16:0/22:6(4Z,7Z,10Z,13Z,16Z,19Z))	**0.002400098**	0.072897487	**0.00061431**	0.165412928
gamma2-Solamarine	**0.002513929**	0.365170261	**0.000757811**	**0.004633624**
Riccionidin A	**0.002513929**	0.643002472	**0.00161645**	**0.000764417**
Acetylornithine	**0.002994966**	0.419503859	**0.000999919**	**0.003451605**
1-(beta-D-Glucopyranosyloxy)-3-octanone	**0.003345762**	**0.020978485**	**0.002567808**	0.972930124
PS(20:2(11Z,14Z)/24:1(15Z))	**0.003466874**	0.193496278	**0.000752083**	**0.032818115**
1-(Isothiocyanatomethyl)-4-methoxybenzene	**0.00374881**	0.198047356	**0.000760594**	**0.030757834**
N-tert-Butyloxycarbonyl-deacetyl-leupeptin	**0.004164755**	0.193496278	**0.000849481**	**0.040975129**
18-Oxocortisol	**0.004164755**	0.076501908	**0.001022553**	0.191161235
Vindesine	**0.004301922**	0.282596909	**0.001022553**	**0.014697672**
Tragopogonsaponin L	**0.004301922**	0.526971616	**0.001652894**	**0.002490736**
Methyl-Lys	**0.00441674**	0.495373659	**0.001625495**	**0.0031164**
6-Dehydrotestosterone glucuronide	**0.004639861**	0.270287865	**0.001047424**	**0.019687567**
PE(14:0/14:1(9Z))	**0.004639861**	**0.041576222**	**0.001939111**	0.571184839
L,L-Cyclo(leucylprolyl)	**0.004658446**	0.239922446	**0.001028736**	**0.027000941**
Arachidonic acid	**0.004676688**	0.570707332	**0.002010572**	**0.002191086**

LPA(0:0/16:0)	**0.004900141**	0.819813542	**0.004187712**	**0.000558337**
4-(1,1,3,3-Tetramethylbutyl)-phenol	**0.005093973**	0.448622284	**0.001652894**	**0.005042265**
PS(15:0/20:4(5Z,8Z,11Z,14Z))	**0.005093973**	0.077625733	**0.00147866**	0.231087129
MG(P-18:0e/0:0/0:0)	**0.00510366**	0.423820751	**0.001634711**	**0.006104021**
[3-(6-hydroxy-4-{5-[(E)-2-[6-hydroxy-3-(3-hydroxyphenyl)-2-(4-hydroxyphenyl...	**0.00510366**	0.802494632	**0.004187712**	**0.000683733**
alpha-Ionol O-[arabinosyl-(1->6)-glucoside]	**0.00510366**	0.419503859	**0.001625495**	**0.006614333**
Malate	**0.00510366**	0.072897487	**0.001620744**	0.307967313
1,8-Diazacyclotetradecane-2,9-dione	**0.005545174**	0.368680382	**0.001620744**	**0.010381879**
Triose	**0.005545174**	0.194504619	**0.001302388**	0.050298383
PIP2(16:0/20:4(5Z,8Z,11Z,14Z))	**0.005808681**	0.423820751	**0.001823032**	**0.006933286**
Hericenone C	**0.006026948**	**0.04454734**	**0.002660579**	0.623702819
Metixene	**0.006073825**	0.304636504	**0.00161645**	**0.020087208**
LysoPE(0:0/16:0)	**0.006073825**	0.153024968	**0.001516064**	0.097601101
Glycogen	**0.006655079**	0.073051015	**0.002127406**	0.367698007
Succinyl sulfathiazole	**0.006868909**	0.519483155	**0.002505835**	**0.004805375**
Protoveratrine B	**0.006868909**	0.894994586	**0.023603664**	**0.00018737**
L-cis-Cyclo(aspartylphenylalanyl)	**0.006868909**	0.063407655	**0.002685825**	0.538251761
CDP-DG(18:2(9Z,11Z)/a-15:0)	**0.006868909**	0.198047356	**0.001625495**	0.060910014

Punigluconin	**0.007237542**	0.591702659	**0.00297989**	**0.003430625**
Tetrahydroaldosterone-3-glucuronide	**0.007478937**	0.659645979	**0.00355782**	**0.002498569**
Nicotinate	**0.007478937**	0.247855413	**0.001773023**	**0.038773728**
2,4-Di-tert-butylphenol	**0.007579645**	0.670368581	**0.003803764**	**0.002510802**
Serinyl-Valine	**0.007579645**	0.604053883	**0.003225975**	**0.003551081**
Isofucosterol 3-O-[6-O-Octadecanoyl-b-D-glucopyranoside]	**0.007579645**	0.284252115	**0.001909336**	**0.029517261**
Goniodomin A	**0.007579645**	0.15130378	**0.00188536**	0.127845468
2-Methylglutaric acid	**0.007579645**	0.063407655	**0.00320816**	0.581651594
Kinetensin 1-7	**0.007579645**	0.193496278	**0.001823032**	0.074854424
PG(18:0/20:3(5Z,8Z,11Z))	**0.007729166**	0.075167015	**0.002630979**	0.390293584
24-Hydroxycalcitriol	**0.007747471**	0.787202476	**0.005513807**	**0.0014329**
Methacycline	**0.007844846**	0.348954766	**0.002127406**	**0.020466712**
Toluene-cis-dihydrodiol	**0.007844846**	0.483667338	**0.002685825**	**0.007447761**
CMP	**0.007844846**	**0.041576222**	**0.00584543**	0.984275353
3,6-Dihydro-4-(4-methyl-3-pentenyl)-1,2-dithiin	**0.0081027**	0.281269803	**0.002082982**	**0.033402866**
Tyrosine	**0.008186508**	0.087381883	**0.002630979**	0.336221244
4-Amino-1-piperidinecarboxylic acid	**0.008200148**	0.489439792	**0.002880538**	**0.007539964**
Phenyl acetate	**0.008200148**	0.071975461	**0.003515648**	0.574971144

Pyrithione zinc	**0.008593283**	0.530512095	**0.00320816**	**0.006276574**
(+/-)-3-[(2-methyl-3-furyl)thio]-2-butanone	**0.008606643**	0.237643299	**0.002127406**	0.058875724
Salicifoline	**0.008881856**	0.354798867	**0.002505835**	**0.021609426**
xi-7-Hydroxyhexadecanedioic acid	**0.008955263**	0.320865294	**0.002464734**	**0.028879033**
Topotecan	**0.009362**	0.354798867	**0.002567808**	**0.022919337**
5a-Cholesta-8,24-dien-3-one	**0.009885305**	0.709928301	**0.005450459**	**0.003036283**
Venoterpine	**0.009885305**	0.18988181	**0.002505835**	0.12243712
Ethyl glucuronide	**0.009885305**	0.218152961	**0.002505835**	0.081860949
Prinomide	**0.009885305**	0.247548328	**0.002505835**	0.056476052
Annonisin	**0.010961272**	0.247548328	**0.002630979**	0.066453547
CDP-DG(16:1(9Z)/20:4(5Z,8Z,11Z,14Z))	**0.012037362**	0.365170261	**0.003166795**	**0.025831621**
Mabioside E	**0.012228497**	0.247548328	**0.002880538**	0.067479777
Maleimide	**0.012252092**	0.072897487	**0.005642013**	0.671492938
DG(14:1(9Z)/22:2(13Z,16Z)/0:0)	**0.012252092**	0.141025654	**0.003321716**	0.25018944
PS(20:3(5Z,8Z,11Z)/24:1(15Z))	**0.012488568**	0.271115115	**0.00297989**	0.059377637
Saccharin	**0.0138111**	0.219445622	**0.00320816**	0.103913292
3''-Ketolactose	**0.0138111**	0.23899319	**0.00320816**	0.088662881
Uvaricin	**0.014716436**	0.41414867	**0.003897996**	**0.02316257**
Phosphatidylinositol-3,4,5-trisphosphate	**0.014716436**	0.200995361	**0.003457074**	0.127626169

N-Acetylglutamine	**0.014764523**	0.496891362	**0.004684787**	**0.013335662**
Oxytocin	**0.014824384**	0.519483155	**0.004806469**	**0.011986265**
TG(16:0/16:0/20:4(5Z,8Z,11Z,14Z))	**0.01495079**	0.218152961	**0.003515648**	0.116863482
PE(14:0/22:5(4Z,7Z,10Z,13Z,16Z))	**0.015215476**	0.072897487	**0.007974617**	0.794750329
Estradiol	**0.015414461**	0.607742268	**0.005955523**	**0.00788069**
Kni 102	**0.015479363**	0.201553955	**0.003716272**	0.133866591
TG(18:3(9Z,12Z,15Z)/18:2(9Z,12Z)/18:3(9Z,12Z,15Z))	**0.015987635**	0.41414867	**0.004263632**	**0.026088917**
PA(15:0/20:0)	**0.016263366**	0.270287865	**0.003816438**	0.077824274
4-Pyridoxate	**0.016704064**	0.247548328	**0.003897996**	0.096865981
PIP2(16:0/22:3(10Z,13Z,16Z))	**0.0169872**	0.280016436	**0.003977152**	0.073467463
8-Oxodeoxycoformycin	**0.017132078**	0.451138179	**0.004975536**	**0.020111181**
Alliospiroside D	**0.017370734**	0.418440247	**0.004697802**	**0.027262986**
Carnosic acid	**0.017535501**	0.320865294	**0.00422978**	0.056066628
Arginyl-Arginine	**0.01880653**	0.365170261	**0.004697802**	**0.042170555**
N-lactoyl-Tryptophan	**0.019290196**	0.479203033	**0.005741554**	**0.020255069**
Lactate	**0.019290196**	0.193496278	**0.004745262**	0.184896933
Biotinyl-CoA	**0.019290196**	0.32669729	**0.004697802**	0.058319027
Edetic Acid	**0.019540887**	0.659645979	**0.008288621**	**0.007921126**

Cortolone-3-glucuronide	**0.020063104**	0.886683172	**0.017071779**	**0.002552571**
Nootkatol	**0.020063104**	0.181690865	**0.005366106**	0.241482059
Tyramine	**0.020405692**	0.15130378	**0.005921982**	0.332716486
Cerulenin	**0.020592996**	0.15130378	**0.005921982**	0.325408754
Secogalioside	**0.02116422**	0.919177035	**0.020365178**	**0.002275746**
Inosine	**0.021486827**	**0.042784369**	0.053102494	0.311756605
Cevimeline	**0.021625591**	0.452772238	**0.006211909**	**0.025973157**
PC(18:4(6Z,9Z,12Z,15Z)/P-16:0)	**0.021625591**	0.193496278	**0.005649749**	0.220318771
Alpha-CEHC	**0.021625591**	0.076501908	**0.011913196**	0.848961506
Methionine	**0.022711145**	0.218862817	**0.00566441**	0.171512841
2-Vinylthiophene	**0.023777926**	0.41234943	**0.006188161**	**0.040536682**
24,25-Dihydroxyvitamin D	**0.024007573**	0.675780751	**0.010428937**	**0.009490796**
N-a-Acetylcitrulline; 5-Hydroxysebacate	**0.024007573**	0.075167015	**0.016104804**	0.991595738
2-Arachidonylglycerol	**0.024089524**	0.354798867	**0.00595882**	0.059461522
6-[4-(5,7-dihydroxy-6-{4-hydroxy-6-methyl-5-oxo-3-[(3,4,5-trihydroxy-6-meth...	**0.025021472**	0.479203033	**0.007511064**	**0.027022068**
3-O-Sulfogalactosylceramide (d18:1/20:0)	**0.025021472**	0.144568538	**0.008288621**	0.447933128
Protobassic acid	**0.025021472**	0.149217868	**0.008248507**	0.431533653
Diethylene glycol	**0.025187**	0.087428535	**0.012704585**	0.804360767

(1R,2R)-3-[(1,2-Dihydro-2-hydroxy-1-naphthalenyl)thio]-2-oxopropanoic acid	**0.025241647**	0.15130378	**0.007974617**	0.39185854
(±)-3-Hydroxynonanoic acid	**0.025246916**	0.659645979	**0.010708777**	**0.010862265**
PE(22:6(4Z,7Z,10Z,13Z,16Z,19Z)/P-18:1(11Z))	**0.025908875**	0.174215011	**0.007829414**	0.332476218
Pentoxifylline	**0.027583841**	0.440337542	**0.007851806**	**0.037281433**
Trigoforin	**0.027583841**	0.489439792	**0.008288621**	**0.027980734**
Novapikromyin	**0.027616725**	0.393341608	**0.007412296**	0.053531359
Dehydroalanine	**0.028130621**	0.443307065	**0.007974617**	**0.038021284**
Pratenol B	**0.028130621**	0.110968497	**0.012104385**	0.668490078
Docosadienoate (22:2n6)	**0.028182466**	0.599222068	**0.010490206**	**0.01661756**
N-Nonanoylglycine	**0.028182466**	0.320865294	**0.007245993**	0.093466767
Saponin H	**0.028832423**	0.331458173	**0.007440864**	0.085823482
CE(5D5)	**0.02926571**	0.15130378	**0.010107078**	0.462829874
(R)-3-Hydroxy-hexadecanoic acid	**0.030076672**	0.790999138	**0.017677941**	**0.006743333**
Fumarate	**0.030796671**	0.102896553	**0.01576255**	0.812366998
TG(14:0/22:6(4Z,7Z,10Z,13Z,16Z,19Z)/o-18:0)	**0.031072012**	0.308372106	**0.007958819**	0.111560128
Eremopetasitenin B2	**0.031257707**	0.44793982	**0.009005987**	**0.041403157**
2-Benzoxazolol	**0.031257707**	0.477120316	**0.009415411**	**0.036462**
Glutamylthreonine	**0.031257707**	0.640799941	**0.01231852**	**0.01561532**

Epinephrine sulfate	**0.031257707**	0.418440247	**0.008514594**	0.051834078
(R)-2-Methylimino-1-phenylpropan-1-ol	**0.031257707**	0.138993044	**0.01231852**	0.595939748
3-Aminobutyrate	**0.031257707**	0.209782816	**0.008793026**	0.257166062
5''-Carboxy-gamma-chromanol	**0.031393706**	0.075167015	**0.026938549**	0.804989907
1,4''-Bipiperidine-1''-carboxylic acid	**0.031659853**	0.599222068	**0.011776863**	**0.019401707**
2,3-Dimethyl-2-cyclohexen-1-one	**0.031659853**	0.113572347	**0.014932197**	0.728070694
Methyl 3,4-dihydroxy-5-prenylbenzoate 3-glucoside	**0.032061091**	0.756898662	**0.01682608**	**0.009412245**
4-Amino-2-methyl-5-phosphomethylpyrimidine	**0.032061091**	0.542072593	**0.010866174**	**0.026333352**
Bufotenin	**0.032453433**	0.896714786	**0.026531394**	**0.004556308**
Glycylproline	**0.033502532**	0.813543196	**0.021232107**	**0.006981688**
SM(d18:1/22:1(13Z))	**0.033724068**	0.181690865	**0.011220479**	0.407902223
Phenylacetaldehyde	**0.034465621**	0.365170261	**0.009308049**	0.082534186
L-N-(1H-Indol-3-ylacetyl)glutamic acid	**0.034495111**	0.775897596	**0.018600055**	**0.009605537**
Hydroxyethylpromethazine	**0.034495111**	0.932304492	**0.031500901**	**0.004112675**
Phenprocoumon	**0.034623071**	0.955619605	**0.03519799**	**0.003683143**
Lumequoylacetone	**0.035708994**	0.280016436	**0.009706801**	0.161532671
(3Z,6Z)-3,6-Nonadien-1-ol	**0.035708994**	0.251550309	**0.009944311**	0.196964519
Azelaic acid	**0.035708994**	0.440337542	**0.010554509**	0.052163849

SR 49498	**0.036030119**	0.181690865	**0.012304415**	0.435222508
L-2-Amino-4-methylenepentanedioic acid	**0.036050479**	0.871590492	**0.026213213**	**0.006106282**
Aspartate	**0.036643705**	0.865556773	**0.025840983**	**0.006459729**
2,3,4,7,8,9,15,22,23,28-decahydroxy-14-(hydroxymethyl)-13,25,32,35-tetraoxa...	**0.037332065**	0.800157638	**0.022311984**	**0.008743933**
Tetrahydroharmol	**0.037332065**	0.237643299	**0.010866174**	0.251609252
(Z)-9-Cycloheptadecen-1-one	**0.038090181**	0.516119752	**0.012274584**	0.037574263
Diosmin	**0.038363916**	0.730694651	**0.018600055**	0.013276609
PGP(18:0/18:2(9Z,12Z))	**0.038589761**	0.163221948	**0.014932197**	0.539514783
Cinnamate	**0.040085727**	0.110968497	**0.023307758**	0.915042589
(-)-Nopol	**0.040603482**	0.813543196	**0.02465631**	**0.008999933**
Mevalonate	**0.040603482**	0.382153595	**0.011263323**	0.089442877
1'-Hydroxy-gamma-carotene	**0.040603482**	0.365170261	**0.011262671**	0.097803462
Hydroxyglutarate	**0.041608278**	0.103413208	**0.028073709**	0.958530573
Hydantoin-5-propionic acid	**0.042152348**	0.677682558	**0.018063835**	**0.018985022**
C9:1	**0.042152348**	0.418440247	**0.012104385**	0.073941078
PE(14:0/22:6(4Z,7Z,10Z,13Z,16Z,19Z))	**0.042152348**	0.354798867	**0.011750758**	0.115129422
Lasiodine A	**0.042726955**	0.218152961	**0.013108508**	0.332492725
3,3''-Thiobispropanoic acid	**0.043543544**	0.437070641	**0.01266944**	0.06566645

Indolelactic acid	**0.043643658**	0.244187634	**0.012833674**	0.279479677
DG(18:0/22:4(7Z,10Z,13Z,16Z)/0:0)	**0.044289222**	0.280243124	**0.01231852**	0.198789022
Gamma-Tocopherol	**0.045437151**	0.247548328	**0.013284139**	0.279478265
a-Methyldopa mono-O-sulfate	**0.046126367**	0.521187758	**0.014932197**	**0.044391012**
O-phosphonato-L-homoserine(2-)	**0.047466695**	0.985157061	0.05334748	**0.004512161**
C26:0	**0.047466695**	0.331234422	**0.012940399**	0.148778016
PC(15:0/18:4(6Z,9Z,12Z,15Z))	**0.047466695**	0.075167015	0.170254804	0.161602108
Corchoroside A	0.051424618	0.65648626	**0.020334054**	**0.026005215**
DG(14:1(9Z)/16:1(9Z)/0:0)	0.051424618	0.230540715	**0.016112483**	0.353083771
Tuliposide B; Edetic Acid	0.052455405	0.713385065	**0.022836628**	**0.02051379**
N-Acetylneuraminic acid	0.053279315	0.393341608	**0.014932197**	0.108204966
2-Deoxystreptidine	0.054250585	0.15130378	**0.025609796**	0.775175686
Prostaglandin E2	0.054774653	0.659645979	**0.021338818**	**0.02739916**
Aminophenol	0.054774653	0.393341608	**0.015333632**	0.113563616
Isoleucyl-Isoleucine	0.055979618	0.570633409	**0.019138548**	**0.041803167**
Sulfaphenazole	0.056933389	0.636254494	**0.021338818**	**0.031796838**
5-Hydroxymethyluracil	0.056933389	0.983407613	0.066969685	**0.005036056**
5-Hydroxy-7-(4-hydroxy-3-methoxyphenyl)-1-phenyl-3-heptanone	0.056933389	0.274811544	**0.01682608**	0.267982832

Delavirdine	0.057828048	0.193496278	**0.022836628**	0.598106854
Tetraethylene glycol	0.057828048	0.247548328	**0.017893048**	0.319005635
Docosatrienoic acid	0.059481451	0.883888565	**0.039062335**	**0.010501069**
3-Hydroxy-1-phenyl-1-eicosanone	0.059481451	0.479364253	**0.018127418**	0.071533868
13-L-Hydroperoxylinoleic acid	0.065041681	0.514730854	**0.020127088**	0.065709798
Callystatin A	0.065129599	0.320865294	**0.018600055**	0.220776251
Methylthioglycolic acid	0.067460296	0.229879981	**0.022607741**	0.44966036
Homodolicholide	0.067728104	0.320865294	**0.019263479**	0.228956363
Leonuridine	0.068570089	0.787202476	**0.032974154**	**0.018878934**
2-Hydroxymethylserine; Adenine	0.068587327	0.354798867	**0.019263479**	0.178713526
N6,N6,N6-Trimethyl-L-lysine	0.068816316	0.521187758	**0.021338818**	0.066210459
Nb-Feruloyltryptamine	0.069962708	0.570633409	**0.023001484**	0.052787731
CE(18:1(9Z))	0.069962708	0.330047969	**0.020121446**	0.216267102
Anthopleurine	0.069973931	0.486057063	**0.021232107**	0.080250944
3-Dehydroquinate; 5-(Methylthio)-2-[(methylthio)methyl]-2-pentenal	0.071247184	0.607947827	**0.024634567**	**0.045733445**
[6]-Gingerdiol 3,5-diacetate	0.071638626	0.677682558	**0.027288904**	**0.033946948**
Orcinol	0.071638626	0.445798574	**0.021216786**	0.103603932
7,8,8,12,13,21,22-heptahydroxy-19-	0.071638626	0.570633409	**0.023603664**	0.054957424

(hydroxymethyl)-2,17,20,23-tetraoxapentac...				
BILA 2185BS	0.072402555	0.565279417	**0.023603664**	0.056859995
Dopamine	0.072736465	0.516119752	**0.0226393**	0.074368628
Ribothymidine	0.073984928	0.424380195	**0.021338818**	0.117214324
1-Cyclohexyl-11-heneicosanone	0.077023407	0.715441716	**0.031066129**	**0.03115841**
Trilostane	0.077051068	0.955619605	0.063768969	**0.009782395**
Saphenamycin	0.07989363	0.445798574	0.521847757	**0.004156438**
1-Methylnaphthalene	0.080509643	0.41414867	**0.022844553**	0.147909703
S-Decyl GSH	0.080632196	0.423820751	**0.023085334**	0.127933215
2-Octaprenylphenol	0.080938719	0.279177647	**0.024888264**	0.357442316
2-Hydroxy-imipramine glucuronide	0.081968035	0.673902532	**0.030337108**	**0.040531227**
Cyclohexenone	0.082691186	0.785653423	**0.037707227**	**0.025122492**
11-Dehydrocorticosterone	0.083791512	0.218152961	**0.031500901**	0.602769028
2,3-Dimethylthiophene	0.086005599	0.631733028	0.313821764	**0.004215778**
N(tele)-methylhistaminium; Sulcatone	0.086005599	0.424637124	**0.02465631**	0.135880881
Anthranilate	0.086152409	0.193496278	**0.037208159**	0.740539663
PE(14:0/P-16:0)	0.086152409	0.415302688	**0.02465631**	0.157569489
Terpendole I	0.086671168	0.281269803	**0.026938549**	0.360578112
Patellamide A	0.087231829	0.247548328	**0.030003123**	0.495897994

1-Palmitoyl-2-(5-hydroxy-8-oxo-6-octenedioyl)-sn-glycero-3-phosphatidylcholine	0.087327301	0.659645979	**0.031917385**	**0.046676782**
Zearalenone 4-sulfate	0.087327301	0.985157061	0.089401628	**0.009029624**
Leucomycin V	0.087327301	0.501914478	**0.026531394**	0.096458195
3''-N-Acetyl-4''-O-(9-octadecenoyl)fusarochromanone	0.087327301	0.247548328	**0.029921101**	0.47715903
S-Inosyl-L-homocysteine	0.087327301	0.473576833	**0.026230867**	0.113865994
1-(Methylthio)propyl propyl disulfide	0.087639591	0.720988472	**0.035777034**	**0.036313429**
Benzamide	0.087666877	0.955619605	0.101410226	**0.007945123**
Dracorubin	0.090313693	0.913930493	0.062754955	**0.014942691**
3-Methyldioxyindole	0.090313693	0.198047356	**0.039746947**	0.75342241
Histidinol	0.091398964	0.563114203	**0.029639206**	0.077034982
Epothilone C	0.091398964	0.433914303	**0.026938549**	0.144936145
Penitrem D	0.091398964	0.247548328	**0.032314588**	0.509573774
4-ethylphenylsulfate	0.092936883	0.377541901	**0.027229687**	0.215850908
2,3-Butanediol glucoside; Histidinyl-Proline	0.093114909	0.415302688	**0.027229687**	0.173947091
Hexadecanedioic acid	0.093114909	0.320865294	**0.02874544**	0.320955296
Pentanoic acid	0.094470176	0.779081564	**0.042772061**	**0.031607735**
Myricetin 7-(6''''-galloylglucoside)	0.094470176	0.944023279	0.114369403	**0.008270651**

Endoxifen O-glucuronide	0.094470176	0.823551694	0.050809987	**0.023807438**
N-Heptanoylglycine	0.094470176	0.253130611	**0.033289818**	0.500510916
N-Acetyl-2,3-dihydro-1H-pyrrole	0.094771832	0.330047969	**0.02948397**	0.306604429
PS(DiMe(11,3)/MonoMe(13,5))	0.094771832	0.365170261	**0.028604324**	0.239215244
Acamprosate	0.096097295	0.525304145	**0.030379567**	0.097947155
Thien-2-ylacetate	0.096097295	0.418440247	**0.02874544**	0.17578202
8,11,14-Eicosatrienoic acid	0.096499082	0.606755893	**0.033289818**	0.06873541
Naltriben	0.096903817	0.354798867	**0.029842584**	0.27527715
NONOate; D-2-Hydroxyisocaproate	0.098252977	0.575578088	**0.032909531**	0.079513973
Carthamin	0.098657694	0.913845174	0.06832009	**0.017268078**
3,4-Dimethyl-5-pentyl-2-furantridecanoic acid	0.099992074	0.824482436	0.053491496	**0.025680192**
6''''-Malonylapiin	0.101195393	0.981474277	0.090721355	**0.012832947**
Campesterol 6''-(9Z-octadecenoyl)-glucoside	0.101195393	0.247548328	**0.039746947**	0.609373698
Spinoside A	0.101195393	0.608518318	**0.035691691**	0.071106929
2-Hydroxymethylclavam	0.101376501	0.521187758	**0.032409371**	0.108045312
12-Ketodeoxycholic acid	0.101713202	0.913930493	0.070163693	**0.018100359**
Musaroside	0.102105482	0.393341608	**0.031293315**	0.222230159
Musabalbisiane A	0.106852765	0.65648626	**0.03930058**	0.062455787
Calystegin B2	0.108641078	0.921971258	0.073893646	**0.019005668**

MG(0:0/20:3(11Z,14Z,17Z)/0:0)	0.108880576	0.292981636	**0.037208159**	0.441713993
Nitrosonornicotine	0.109087026	0.607742268	**0.037707227**	0.079051203
1-Piperazinecarbodithioic acid	0.109099486	0.89207361	0.068633586	**0.021928673**
2-Dodecylbenzenesulfonic acid	0.111048984	0.247548328	**0.044993264**	0.63915051
PC(o-22:2(13Z,16Z)/22:3(10Z,13Z,16Z))	0.111814717	0.597449168	**0.03806031**	0.085284083
3-Sulfinoalanine	0.113015255	0.896714786	0.071982518	**0.022233913**
Homodolichosterone	0.113015255	0.378316721	**0.035267996**	0.267806701
MG(0:0/22:4(7Z,10Z,13Z,16Z)/0:0)	0.114239265	0.377965663	**0.035691691**	0.272127315
N-[(3a,5b,7b)-7-hydroxy-24-oxo-3-(sulfooxy)cholan-24-yl]-Glycine	0.115693183	0.800505597	0.056684073	**0.034741269**
Zizyphine A	0.115886468	0.445798574	**0.035777034**	0.182888715
Bimatoprost	0.115886468	0.393341608	**0.035896331**	0.251786884
Dihydrofukinolide	0.116125608	0.893663852	0.072593974	**0.023674253**
Tryptophan	0.117681154	0.646753919	0.363202615	**0.007456023**
Potassium acetate	0.117681154	0.906365843	0.07826377	**0.022869922**
Gentisic acid	0.117681154	0.724408074	**0.049682219**	0.053124578
(3S,5S)-Carbapenam-3-carboxylic acid	0.117681154	0.506944173	**0.037707227**	0.138694358
Endoxifen sulfate	0.117681154	0.400996379	**0.037208159**	0.251970008
6-methoxy-3-methyl-2-all-trans-decaprenyl-1,4-	0.117681154	0.279867198	**0.044915839**	0.546845615

benzoquinol				
TG(20:4(5Z,8Z,11Z,14Z)/20:4(5Z,8Z,11Z,14Z)/22:6(4Z,7Z,10Z,13Z,16Z,19Z))	0.117681154	0.47827526	**0.037357485**	0.162423682
Linocinnamarin	0.117681154	0.688023101	**0.046901536**	0.062125943
Aromatic aldehyde	0.119415161	0.677829997	**0.04689657**	0.065720259
(Iso)Citrate	0.12213536	0.608518318	0.41762762	**0.008064309**
(4-{[2-methoxy-4-(prop-2-en-1-yl)phenoxy]carbonyl}phenyl)oxidanesulfonic acid	0.124514227	0.280209037	**0.048638747**	0.567294488
1,4-Dimethoxyglucobrassicin	0.124809688	0.584595579	**0.042772061**	0.102413379
2-Amino-4-oxo-4-alpha-hydroxy-6-(erythro-1'',2'',3''-trihydroxypropyl)-5,6,...	0.124939759	0.363631478	**0.041151759**	0.339573353
Lauroyl peroxide	0.125425737	0.388095403	**0.040587025**	0.29626518
Protriptyline	0.127447033	0.886835545	0.179799775	**0.011181604**
Rifamycin Z	0.128025316	0.365170261	**0.042447602**	0.337605416
Asparagine	0.128025316	0.423820751	**0.040767523**	0.228523809
Irbesartan	0.128128308	0.355440175	**0.042772061**	0.362207349
Acetaldehyde diisoamyl acetal	0.128225751	0.530512095	**0.042772061**	0.136675527
7-hydroxy-1-oxo-1H-isochromene-3-carboxylic acid	0.131353912	0.944023279	0.096077161	**0.02292852**

N-(3-acetamidopropyl)pyrrolidin-2-one	0.131353912	0.479364253	0.61501431	**0.010721597**
Dihydroxy-Val	0.131353912	0.446646368	**0.042772061**	0.214576081
Erythro-4-hydroxy-L-glutamate(1-)	0.134966738	0.896714786	0.085486247	**0.02913389**
trans-4-Hydroxycyclohexanecarboxylate	0.135714385	0.900415111	0.08802633	**0.028579436**
10-Undecenal	0.138443173	0.960125592	0.10602258	**0.022191836**
6-Carboxyhexanoyl-CoA	0.141163594	0.393341608	**0.048408572**	0.326808
UDP-2,4-bis(acetamido)-2,4,6-trideoxy-beta-L-altropyranose	0.155662358	0.885914148	0.090721355	**0.036859305**
Ethoxysulfuron	0.155662358	0.955619605	0.15923482	**0.018619158**
3,5-Dinitrosalicylic acid; Thiolutin	0.155662358	0.877127528	0.089675921	**0.039017684**
Sedoheptulose; 1,3,7-Trimethyluric acid	0.156222276	0.896714786	0.095833102	**0.035088746**
Furoic acid	0.158473313	0.623092487	0.473902531	**0.012703398**
Isorhamnetin 7-glucoside	0.160709714	0.955619605	0.168250906	**0.019330556**
1,4-Dimethyl-7-ethylazulene	0.160709714	0.516119752	0.623612105	**0.014561678**
Asparaginyl-Hydroxyproline	0.167920609	0.921632412	0.198079812	**0.01854868**
3-Hydroxydodecanoic acid	0.176950602	0.885914148	0.099618474	**0.044008508**
C24:4	0.176950602	0.970556778	0.132757527	**0.029416131**
1-(Hydroxymethyl)-5,5-dimethyl-2,4-imidazolidinedione	0.181067553	0.956254683	0.127852632	**0.032047139**

(R)-3-Hydroxy-Octadecanoic acid	0.182514556	0.925334257	0.114245403	**0.038698579**
C3:0 (Propionic acid)	0.184236379	0.938872759	0.120480512	**0.03642803**
Phthalate	0.188910589	0.897865718	0.111163152	**0.044611978**
5''-(3'',4''-Dihydroxyphenyl)-gamma-valerolactone sulfate	0.189591643	0.896714786	0.111163152	**0.04525954**
Citrulline	0.189591643	0.871590492	0.253969607	**0.019587491**
Heptadecanoic acid	0.197586453	0.955619605	0.136945713	**0.037626031**
10-Hydroxymyristic acid methyl ester	0.201349901	0.982650914	0.173591204	**0.030330375**
2-Methylbutyrylglycine	0.202478929	0.974158475	0.179799775	**0.029671613**
Cycloheptanecarboxylic acid	0.203787838	0.970556778	0.151210448	**0.03629863**
5-Hydroxypentanoic acid	0.204419761	0.354798867	0.976298338	**0.041430666**
ADP	0.209498113	0.787202476	0.34971321	**0.021063443**
4-Oxoretinal	0.209799948	0.94780141	0.213621425	**0.028238759**
Ceanothine C	0.221371287	0.486057063	0.765334875	**0.027638703**
TG(15:0/18:1(9Z)/16:1(9Z))	0.234965082	0.795314986	0.362731246	**0.02554897**
D-Urobilin	0.234965082	0.391266195	0.999158253	**0.047125417**
NIK250	0.235921452	0.787202476	0.379315153	**0.025807492**
6-Keto-decanoylcarnitine	0.23597462	0.845752558	0.322445815	**0.027546152**
1-Palmitoylglycerophosphoinositol	0.24896806	0.960125592	0.227392747	**0.038868581**

Indole	0.250171514	0.426335827	0.941583449	**0.044939398**
Carnitine	0.250171514	0.984035053	0.193660692	**0.047901758**
3-Methyl-3-butenyl apiosyl-(1->6)-glucoside	0.253037742	0.776070583	0.427040773	**0.029500546**
Propyl 1-(propylsulfinyl)propyl disulfide	0.255159819	0.942867861	0.253969607	**0.039620924**
2-Methyl-1-methylthio-2-butene	0.256997051	0.49180725	0.828823034	**0.040439075**
Resolvin D2	0.256997051	0.970556778	0.232230625	**0.044230125**
Butynal	0.259475011	0.800099397	0.397732982	**0.032841052**
Triphenyl phosphate	0.270893073	0.972821193	0.236529049	**0.049007381**
Ethyl isovalerate	0.271546089	0.966176265	0.244623903	**0.047889678**
3,4-Dihydroxyphenylglycol	0.287144589	0.949672996	0.276045946	**0.049298588**
N-Decanoylglycine	0.293733838	0.904277133	0.322841121	**0.046555782**
2-Naphthol	0.318334485	0.801538666	0.45647927	**0.046960832**
Uracil	0.323601307	0.730694651	0.562505123	**0.047988071**

Ο Πίνακας 5 παρουσιάζει μια ολοκληρωμένη επισκόπηση των σημαντικότερων μεταβολιτών που εντοπίστηκαν σε πολλαπλές δοκιμές μεταξύ τριών αποκλινουσών ομάδων ασθενών, δηλαδή του MALS, της ανοσοπαράλυσης και του μη ταξινομημένου. Αυτός ο πίνακας παρέχει πολύτιμες πληροφορίες και λεπτομερή κατανόηση των μεταβολικών διαφορών μεταξύ αυτών των τριών κοόρτων, οι οποίες θα μπορούσαν ενδεχομένως να βοηθήσουν στην ανάπτυξη βελτιωμένων στρατηγικών θεραπείας και θεραπειών. Οι πληροφορίες που παρουσιάζονται βασίζονται σε αυστηρές στατιστικές αναλύσεις, εξασφαλίζοντας υψηλό βαθμό ακρίβειας και συνάφειας.

MALS: σύνδρομο ενεργοποίησης μακροφάγων

6. Πίνακας 6: Μεταβολίτες που διαφοροποιούνται μεταξύ ασθενών με σύνδρομο τύπου ενεργοποίησης μακροφάγων (MALS) έναντι ασθενών με ανοσοπαράλυση που προκαλείται από σήψη

	logFC	AveExpr	t	p-value	Adjsuetd p-value	B

3-Methyleneoxindole	0.366896308	16.04855505	4.834686989	2.60E-06	**0.001811309**	4.395022507
Homovanillic acid	0.503778862	16.07956484	4.895629871	1.97E-06	**0.001811309**	4.642507005
Salsoline-1-carboxylate	0.414179913	13.88482656	4.357579562	2.07E-05	**0.009621543**	2.543131555
Hippurate	0.538885156	16.7750628	4.017316967	8.24E-05	**0.01640589**	1.319036464
4-Aminohippuric acid	0.26472994	13.63093899	4.022629307	8.07E-05	**0.01640589**	1.337506849
3-Methoxy-4-hydroxyphenylethyleneglycol sulfate	0.373704278	14.5815457	4.037223375	7.62E-05	**0.01640589**	1.388354757
Coumarate	0.246526051	14.15080155	4.076924248	6.51E-05	**0.01640589**	1.527463334
(3R,2'S)-Myxol 2'-alpha-L-fucoside	-0.114390277	13.89540111	-3.836809282	0.0001655 4	**0.020978485**	0.703775849
Thiothixene	0.284467161	13.25658427	3.85751279	0.0001529	**0.020978485**	0.77311809

			3	97		4
Cortisol 21-sulfate	0.362694129	14.66918907	3.88666968	0.000136852	**0.020978485**	0.871314618
1-(beta-D-Glucopyranosyloxy)-3-octanone	0.451501788	13.41981774	3.911855908	0.000124222	**0.020978485**	0.956646683
4-Acetamidobutanoate	0.242766347	14.18530563	3.703377308	0.000272941	**0.031706682**	0.264586828
PC(14:1(9Z)/22:2(13Z,16Z))	-0.137852981	15.42934488	-3.57287206	0.000439291	**0.041576222**	-0.151906186
PE(14:0/14:1(9Z))	-0.088997924	13.10593253	-3.55044453	0.000476099	**0.041576222**	-0.222166334
6-(2-amino-2-carboxyethyl)-4-hydroxybenzothiazole	0.226608007	12.71863605	3.549797719	0.000477202	**0.041576222**	-0.224186887
CMP	0.139376981	12.79885821	3.580987452	0.000426644	**0.041576222**	-0.12638713

						2
Gein	0.144575745	13.34779126	3.527477571	0.000516781	**0.042376073**	-0.293714131
Inosine	0.33185716	14.42846913	3.508696303	0.000552452	**0.042784369**	-0.351919225
Hericenone C	-0.090463444	13.14737898	-3.481988172	0.000607173	**0.04454734**	-0.434219465
L-cis-Cyclo(aspartylphenylalanyl)	0.184702829	13.99936179	3.364107571	0.000915088	0.063407655	-0.790818182
2-Methylglutaric acid	0.144944113	14.8031164	3.35159321	0.000955209	0.063407655	-0.82803531
Phenyl acetate	0.093438226	15.70146442	3.300691609	0.001135911	0.071975461	-0.97814056
PC(22:4(7Z,10Z,13Z,16Z)/22:6(4Z,7Z,10Z,13Z,16Z,19Z))	-0.126593515	14.79242561	-3.26833529	0.001266819	0.072897487	-1.07249056

			9			5
PE(14:0/22:5(4Z,7Z,10Z,13Z,16Z))	-0.117670284	14.70941682	-3.24340521 8	0.0013771 06	0.072897487	-1.14461846 1
PA(16:0/22:6(4Z,7Z,10Z,13Z,16Z,19Z))	-0.088753513	13.9628542	-3.24050738 2	0.0013904 88	0.072897487	-1.15297039 5
Maleimide	-0.112761359	12.88464554	-3.23809161 7	0.0014017 37	0.072897487	-1.15992782 4
Malate	0.241421307	14.66023168	3.23538728 8	0.0014144 3	0.072897487	-1.16771079 9
PE(22:4(7Z,10Z,13Z,16Z)/P-18:1(11Z))	-0.140336838	19.2610386	-3.22499089 5	0.0014642 25	0.072897487	-1.19757697 6
Glycogen	0.14222435	13.77449914	3.21378577	0.0015197 13	0.073051015	-1.22966981 5

N-a-Acetylcitrulline; 5-Hydroxysebacate	0.178445254	13.81471336	3.18969259	0.001645692	0.075167015	-1.298335615
PG(a-13:0/i-22:0)	-0.150143106	16.55862372	-3.173999508	0.001732882	0.075167015	-1.342811027
PG(18:0/20:3(5Z,8Z,11Z))	-0.115615073	15.90558454	-3.162609667	0.001798822	0.075167015	-1.374966986
PC(15:0/18:4(6Z,9Z,12Z,15Z))	-0.222640999	17.63010502	-3.162360474	0.0018002 9	0.075167015	-1.375669347
5''-Carboxy-gamma-chromanol	0.171511655	13.44830751	3.156800318	0.001833342	0.075167015	-1.391327901
Alpha-CEHC	0.351008703	13.78934956	3.138486133	0.001946221	0.076501908	-1.442728674
18-Oxocortisol	0.205449711	13.88589821	3.13387163	0.0019756	0.076501908	-

			4	59		1.455637196
PS(15:0/20:4(5Z,8Z,11Z,14Z))	-0.104405136	14.72134394	-3.120939373	0.002060367	0.077625733	-1.491722278
10,12-Tritriacontanedione	-0.101718883	13.06772743	-3.086578479	0.002302009	0.084447382	-1.586944255
Tyrosine	0.259216869	17.80671021	3.067822784	0.002444687	0.087381883	-1.638517768
PE(16:0/22:6(4Z,7Z,10Z,13Z,16Z,19Z))	-0.226748218	17.81786932	-3.058657028	0.002517338	0.087428535	-1.663617631
Diethylene glycol	0.202908058	11.56326376	3.051990008	0.002571427	0.087428535	-1.681832045
Asparagoside F	-0.075364322	13.9039025	-3.01657508	0.002877125	0.09549316	-1.77798076

						8
PS(DiMe(11,5)/DiMe(13,5))	-0.088968941	14.19590642	-2.98472525	0.003180233	0.102896553	-1.863578153
Fumarate	0.185637158	12.94859268	2.976542078	0.003262708	0.102896553	-1.885436968
4-Hydroxyphenylpyruvic acid	0.131441258	13.26040757	2.97081181	0.003321625	0.102896553	-1.900711021
Hydroxyglutarate	0.170398193	14.94213816	2.962154681	0.003412488	0.103413208	-1.923735689
1-(Methylsulfinyl)propyl 1-propenyl disulfide	0.168357095	13.06803366	2.950963879	0.0035333 2	0.10364244	-1.953408047
2-Phenylacetamide	0.353047181	14.52207622	2.947749082	0.003568 75	0.10364244	-1.961913098

Pratenol B	0.264116649	13.4154237	2.917447246	0.003919053	0.110968497	-2.041662893
Cinnamate	0.165636372	15.26049049	2.912412271	0.003980219	0.110968497	-2.054841116
2,3-Dimethyl-2-cyclohexen-1-one	-0.103273702	12.32534188	-2.898398414	0.004155086	0.113572347	-2.091410308
Cyclotricuspidoside C	-0.078889596	13.84813746	-2.831311874	0.005093495	0.13654484	-2.26422952
(R)-2-Methylimino-1-phenylpropan-1-ol	0.598442737	12.90908715	2.813561853	0.005372171	0.138993044	-2.309332023
PE(18:1(11Z)/22:6(4Z,7Z,10Z,13Z,16Z,19Z))	-0.169241021	15.91719785	-2.808486137	0.005454371	0.138993044	-2.322181297
Inodxyl glucuronide	0.223640159	13.12576536	2.80667711	0.0054839	0.138993044	-

				44		2.326755717
DG(14:1(9Z)/22:2(13Z,16Z)/0:0)	-0.080621408	13.546677	-2.79577276	0.005665306	0.141025654	-2.3542716
3-O-Sulfogalactosylceramide (d18:1/20:0)	-0.146587187	15.22482005	-2.777140084	0.005987858	0.144568538	-2.401060372
Marcanine A	0.258451227	13.81552483	2.775611447	0.006015047	0.144568538	-2.40488614
Protobassic acid	-0.106059653	14.13744563	-2.75912192	0.006315534	0.149217868	-2.446031287
PC(DiMe(11,3)/MonoMe(11,5))	-0.101327388	14.31406233	-2.749329062	0.006500366	0.151025163	-2.470359486
MG(0:0/22:5(4Z,7Z,10Z,13Z,16Z)/0:0)	-0.092730257	13.16650381	-2.730950042	0.006860537	0.15130378	-2.515802128
Tyramine	0.719499365	14.43612528	2.72498002	0.0069813	0.15130378	-

			3	59		2.530502471
CE(5D5)	-0.082112502	13.37315802	-2.72393343	0.007002738	0.15130378	-2.533076494
beta-Damascenone	-0.102395022	12.75399533	-2.713779598	0.007213241	0.15130378	-2.558001582
Cerulenin	0.210682934	12.84899067	2.71050368	0.007282366	0.15130378	-2.566024735
(1R,2R)-3-[(1,2-Dihydro-2-hydroxy-1-naphthalenyl)thio]-2-oxopropanoic acid	0.129752644	14.35069479	2.708723968	0.007320171	0.15130378	-2.570379717
2-Deoxystreptidine	0.213732628	14.07220607	2.708013563	0.007335331	0.15130378	-2.572117349
Goniodomin A	-0.079694486	14.08852483	-2.70589293	0.007380672	0.15130378	-2.57730183

			8			1
LysoPE(0:0/16:0)	-0.145005764	16.01257959	-2.696966545	0.007574407	0.153024968	-2.599083693
Soyasaponin II	-0.087865442	14.053984	-2.690796265	0.007710995	0.153558966	-2.614101172
PGP(18:0/18:2(9Z,12Z))	-0.126882881	15.57328035	-2.664711811	0.008313313	0.163221948	-2.677233785
C12:1	0.189313367	14.14576012	2.659794042	0.008431509	0.163243378	-2.689072341
3-(O-Geranylgeranyl)-sn-glycerol 1-phosphate	0.14345925	13.24792861	2.640946889	0.008898634	0.169927345	-2.734254874
Hericene A	-0.094960341	13.48649099	-2.632973616	0.009103166	0.171483956	-2.753279346

PE(22:6(4Z,7Z,10Z,13Z,16Z,19Z)/P-18:1(11Z))	-0.129939586	16.02345542	-2.622693106	0.009373118	0.174215011	-2.77772993
X-206	-0.12275187	15.60574715	-2.608082342	0.009769155	0.179186867	-2.812326058
SM(d18:1/22:1(13Z))	-0.101304656	14.87122283	-2.595574323	0.010120006	0.181690865	-2.841800082
SR 49498	0.208116667	13.66840222	2.593758593	0.010171928	0.181690865	-2.846067708
Nootkatol	-0.067976003	13.42476709	-2.589425069	0.010296685	0.181690865	-2.8562418
Venoterpine	0.159897035	12.80212903	2.569205665	0.010897091	0.18988181	-2.903502332
Delavirdine	0.117171142	13.13170446	2.54895824	0.0115295	0.193496278	-

			2	46		2.950481568
LPA(a-25:0/0:0)	-0.085744179	14.18620033	-2.546970826	0.011593361	0.193496278	-2.955074161
Dihydroclavaminic acid	0.155378945	13.71088037	2.544634751	0.011668774	0.193496278	-2.960468164
PC(15:0/18:2(9Z,12Z))	-0.137631635	20.36868666	-2.541024707	0.011786176	0.193496278	-2.968794664
N-tert-Butyloxycarbonyl-deacetyl-leupeptin	-0.083856414	13.97392544	-2.528445282	0.012203558	0.193496278	-2.997722466
2,5-Dimethyl-1H-pyrrole	-0.087841075	12.00744263	-2.517347186	0.012582691	0.193496278	-3.023132214
PC(18:4(6Z,9Z,12Z,15Z)/P-16:0)	-0.126206346	16.2987933	-2.51705675	0.012592752	0.193496278	-3.02379577

			1			5
2-ethyl-1,5-dimethyl-3,3-diphenylpyrrolinium (EDDP)	0.155515333	13.3578887	2.515463312	0.0126480 8	0.193496278	-3.027435062
PS(20:2(11Z,14Z)/24:1(15Z))	-0.108220545	14.7390644	-2.505328986	0.0130050 7	0.193496278	-3.050530524
Quinquenoside L1	-0.078216535	14.25511326	-2.49912538	0.0132280 02	0.193496278	-3.064625027
2-Hydroxy-desipramine glucuronide	0.371084105	13.31654735	2.498884255	0.0132367 35	0.193496278	-3.065172197
Carnosol	0.189631095	15.26626786	2.498141258	0.0132636 78	0.193496278	-3.066857928
Lactate	0.21105614	19.78878866	2.492456816	0.0134714 31	0.193496278	-3.079739375

N-acetyltryptophan	0.50112604	15.25470022	2.485066782	0.013745847	0.193496278	-3.096444703
Kinetensin 1-7	-0.093336657	14.35958591	-2.484566734	0.013764594	0.193496278	-3.097573391
Cannabisativine	-0.073121484	12.55842661	-2.483510521	0.013804266	0.193496278	-3.099956734
Tetrose	-0.112532057	16.34762921	-2.483178413	0.013816761	0.193496278	-3.100705936
CDP-DG(a-13:0/i-22:0)	-0.060863178	14.06815792	-2.482182263	0.013854301	0.193496278	-3.102952594
Anthranilate	0.094503946	13.41372425	2.481955361	0.013862864	0.193496278	-3.103464216
Cephapirin	0.152185705	12.68341681	2.47981122	0.0139440	0.193496278	-

			7	17		3.108296682
Lysine	0.130244576	17.78271898	2.477827961	0.014019458	0.193496278	-3.112763095
Triose	0.129298592	13.50338412	2.472289814	0.014232045	0.194504619	-3.125217515
3-Methyldioxyindole	0.385915311	13.73463362	2.46172782	0.014645434	0.198047356	-3.148897251
CDP-DG(18:2(9Z,11Z)/a-15:0)	-0.076692715	15.05783829	-2.456619611	0.014849164	0.198047356	-3.160315572
1-(Isothiocyanatomethyl)-4-methoxybenzene	0.118909009	12.90103923	2.454920519	0.014917484	0.198047356	-3.164108594
Phosphatidylinositol-3,4,5-trisphosphate	-0.085225954	14.50517938	-2.44592834	0.015283722	0.200995361	-3.18414151

			4			
Kni 102	-0.069556243	13.37296486	-2.438008298	0.015612875	0.201553955	-3.201728685
14-hydroxyclarithromycin	-0.139069006	14.583834	-2.437948807	0.015615371	0.201553955	-3.201860587
3-Aminobutyrate	-0.093538342	13.21444863	-2.419574988	0.016403391	0.209782816	-3.242453755
Ethyl glucuronide	0.168794204	13.66977717	2.401098883	0.017231008	0.218152961	-3.282981398
TG(16:0/16:0/20:4(5Z,8Z,11Z,14Z))	-0.074340213	14.13323698	-2.396970364	0.017420996	0.218152961	-3.291997376
11-Dehydrocorticosterone	0.160961538	12.99300383	2.392591813	0.017624431	0.218152961	-3.301543406

Lasiodine A	-0.068069158	13.56139229	-2.391321396	0.017683848	0.218152961	-3.304310065
Methionine	0.149488811	14.46062011	2.386765278	0.017898394	0.218862817	-3.314220793
Saccharin	0.249558588	14.92072443	2.382454943	0.018103477	0.219445622	-3.323580475
Acetone cyanohydrin	0.102502983	12.4906014	2.372979159	0.018561633	0.223059588	-3.344100588
Oxamic acid	0.156862016	11.24742727	2.368681881	0.018772755	0.22366849	-3.353381055
2-Hydroxyestradiol-3-methyl ether	0.149297833	13.41651312	2.360835021	0.019163722	0.226391745	-3.370286298
Methylthioglycolic acid	-0.062250581	11.42380618	-	0.0196239	0.229879981	-

			2.351777682	01		3.389733553
DG(14:1(9Z)/16:1(9Z)/0:0)	-0.100574248	14.32219399	-2.347479044	0.019845686	0.230540715	-3.398938571
Hypaconitine	-0.082672036	13.802293	-2.337020323	0.020394524	0.234958405	-3.421268227
PC(15:0/18:3(6Z,9Z,12Z))	-0.148826173	17.66609267	-2.330820026	0.020726154	0.235767957	-3.434461543
beta-D-Galactosyl-beta-1,4-N-acetyl-D-glucosaminylglycopeptide	-0.056618592	13.79696292	-2.3293947	0.020803055	0.235767957	-3.437489744
Tetrahydroharmol	0.232338328	13.64967134	2.322143097	0.021198195	0.237643299	-3.452869134
(+/-)-3-[(2-methyl-3-furyl)thio]-2-butanone	0.176349691	13.43692261	2.320122255	0.021309478	0.237643299	-3.45714691

3''-Ketolactose	0.11235463	13.65807647	2.314854594	0.021601967	0.23899319	-3.468281083
L,L-Cyclo(leucylprolyl)	-0.089311025	13.17750409	-2.31029333	0.021858071	0.239922446	-3.477902816
Indolelactic acid	0.191250874	15.45963484	2.300415584	0.0224218 2	0.244187634	-3.49867781
Campesterol 6''-(9Z-octadecenoyl)-glucoside	-0.086370236	15.8608463	-2.285927404	0.023271724	0.247548328	-3.528997044
Gamma-Tocopherol	-0.103005123	14.51565702	-2.284636355	0.023348809	0.247548328	-3.531690002
11''-Carboxy-alpha-chromanol	-0.099550298	14.2623902	-2.2831283	0.023439133	0.247548328	-3.53483378
Annonisin	-0.063366848	13.39633041	-2.279042368	0.023685396	0.247548328	-3.543341666

Pelargonidin 3-sophoroside 5-glucoside	-0.076006152	13.96985752	-2.278902499	0.023693866	0.247548328	-3.543632649
Patellamide A	-0.064283666	13.89669186	-2.273037957	0.024051389	0.247548328	-3.555818074
3''-O-Methyl-(-)-epicatechin-5-O-sulphate	0.119594005	13.38489274	2.272742667	0.024069515	0.247548328	-3.556430845
4-Pyridoxate	0.24465937	16.00602912	2.270504898	0.024207264	0.247548328	-3.561072095
2-Dodecylbenzenesulfonic acid	0.244063555	15.48977369	2.265139856	0.024540326	0.247548328	-3.572181817
Butynol	-0.083268445	11.69841869	-2.25936499	0.024903291	0.247548328	-3.584112335
Glycine	0.087302943	14.92819775	2.25809991	0.0249834	0.247548328	-

			6	27		3.586722043
Penitrem D	0.189252423	13.51535098	2.256046135	0.025114002	0.247548328	-3.590955814
4-Nitrophenyl sulfate	-0.032311313	13.86386197	-2.253047696	0.025305705	0.247548328	-3.597130388
3''-N-Acetyl-4''-O-(9-octadecenoyl)fusarochromanone	-0.069393184	13.61876882	-2.248502644	0.025598721	0.247548328	-3.606474987
Mabioside E	-0.057229161	13.85215791	-2.248175803	0.025619906	0.247548328	-3.607146628
Tetraethylene glycol	0.132585925	12.11067735	2.24485343	0.025836119	0.247548328	-3.613964795
Prinomide	0.108494786	12.58577164	2.244284857	0.025873279	0.247548328	-3.615130714

Alprenolol	-0.116619655	12.09747774	-2.243466149	0.025926869	0.247548328	-3.616809074
Nicotinate	0.103882504	13.84104052	2.240272625	0.026136833	0.247855413	-3.623350281
(3Z,6Z)-3,6-Nonadien-1-ol	-0.060503236	12.15926384	-2.231712983	0.026706919	0.251550309	-3.640839123
N-Heptanoylglycine	-0.190767792	13.09388899	-2.226545624	0.027056285	0.253130611	-3.651366158
2-[(Methylthio)methyl]-2-butenal	0.188217768	14.30445553	2.222343129	0.027343339	0.254110763	-3.659910463
[(7-hydroxy-1-oxo-1H-isochromen-3-yl)methoxy]sulfonic acid	-0.111495248	13.48950202	-2.204725879	0.028575688	0.263804694	-3.695562004
6-Dehydrotestosterone glucuronide	0.236773199	13.25615276	2.19156381	0.0295275	0.270287865	-

			9	71		3.722021587
8-Butanoylneosolaniol	0.085189025	13.5376899	2.188879991	0.029725003	0.270287865	-3.727398363
PA(15:0/20:0)	-0.064244841	13.93613272	-2.187058682	0.029859635	0.270287865	-3.731043599
Immunomycin	-0.119950782	14.73948011	-2.182124305	0.030227043	0.271115115	-3.740904934
PS(20:3(5Z,8Z,11Z)/24:1(15Z))	-0.084026567	14.39540455	-2.180617725	0.030339999	0.271115115	-3.743911605
Thiophene	-0.083179323	11.27321903	-2.177715443	0.030558626	0.271329455	-3.749698093
5-Hydroxy-7-(4-hydroxy-3-methoxyphenyl)-1-phenyl-3-heptanone	0.091963252	14.29858206	2.169756478	0.031165177	0.274811544	-3.7655288

Threonine	0.113166071	15.18877767	2.16742166	0.031345076	0.274811544	-3.770162377
25-Acetyl-6,7-didehydrofevicordin F 3-glucoside	-0.062244109	13.45094715	-2.160954105	0.031848097	0.277476542	-3.782972783
Aspidin	0.152406486	13.23748342	2.157116628	0.032149844	0.278365727	-3.790556502
PA(8:0/16:0)	-0.094567597	15.51333386	-2.152735763	0.032497332	0.279177647	-3.799198375
2-Octaprenylphenol	-0.092377054	14.5419358	-2.150896828	0.032644158	0.279177647	-3.802820942
6-methoxy-3-methyl-2-all-trans-decaprenyl-1,4-benzoquinol	-0.109560427	15.17150494	-2.147392337	0.032925553	0.279867198	-3.809716364
PIP2(16:0/22:3(10Z,13Z,16Z))	-0.057220323	13.95204644	-	0.0331631	0.280016436	-

			2.144453668	24		3.815490212
Lumequoylacetone	-0.068899894	12.73702475	-2.142217949	0.033344855	0.280016436	-3.819877866
(4-{[2-methoxy-4-(prop-2-en-1-yl)phenoxy]carbonyl}phenyl)oxidanesulfonic acid	0.061601671	12.91239441	2.139477287	0.033568801	0.280209037	-3.825250529
DG(18:0/22:4(7Z,10Z,13Z,16Z)/0:0)	-0.062542404	13.89951635	-2.135361799	0.033907521	0.280243124	-3.833306013
Trandolaprilat	0.122016409	14.54012712	2.132105703	0.034177592	0.280243124	-3.839668876
Sulpyrine	0.119569286	13.61326411	2.131755231	0.034206771	0.280243124	-3.840353194
AMP	0.15101484	13.82366663	2.127849154	0.034533434	0.280243124	-3.84797279

						1
Benzene	0.127103953	11.78912422	2.12642787	0.034652959	0.280243124	-3.850741985
Mercaptopyruvic acid	-0.069062137	13.257552	-2.124932528	0.034779096	0.280243124	-3.853653565
3,6-Dihydro-4-(4-methyl-3-pentenyl)-1,2-dithiin	-0.091509495	14.88910838	-2.119193749	0.035266856	0.281269803	-3.864809398
Terpendole I	0.07958714	13.29906305	2.118688794	0.035310054	0.281269803	-3.865789621
4-(2-Aminophenyl)-2,4-dioxobutanoic acid	0.24135961	12.65863247	2.113584426	0.035749284	0.282596909	-3.875685742
Vindesine	-0.056334743	13.6685877	-2.112051515	0.035882104	0.282596909	-3.878653229

Isofucosterol 3-O-[6-O-Octadecanoyl-b-D-glucopyranoside]	-0.074798204	14.68314665	-2.107303614	0.036296181	0.284252115	-3.887831419
1-Isothiocyanatobutane	-0.119141753	12.39043936	-2.091275212	0.037724497	0.292981636	-3.918670236
MG(0:0/20:3(11Z,14Z,17Z)/0:0)	-0.075842146	13.48177093	-2.089013718	0.037929849	0.292981636	-3.923003261
Oxoproline	0.20225965	18.07346537	2.087789911	0.038041375	0.292981636	-3.925346208
Meloxicam	0.08273949	13.21470159	2.081018205	0.038663569	0.295219214	-3.938286739
PA(15:0/20:3(5Z,8Z,11Z))	-0.091306237	14.0688724	-2.080025984	0.038755464	0.295219214	-3.940179469
Metixene	0.316103072	13.52630367	2.06242752	0.0404166	0.304636504	-

			3	65		3.973606257
Imidazolone	-0.059018927	11.59563545	-2.062301211	0.040428804	0.304636504	-3.973845195
TG(14:0/22:6(4Z,7Z,10Z,13Z,16Z,19Z)/o-18:0)	-0.065150758	13.87977972	-2.054353198	0.041198963	0.308372106	-3.988851803
Aspartylglycosamine	0.081597276	13.61177633	2.052636033	0.041366699	0.308372106	-3.992086686
9,12,13-TriHOME	0.132784459	14.78885429	2.048822001	0.041742291	0.309514644	-3.999262496
Metyrapol	-0.127718805	14.1357914	-2.044972877	0.042123984	0.310692241	-4.006491371
Pseudoargiopinin I	-0.088897812	16.21492149	-2.03995276	0.042626263	0.31274216	-4.01589986

			6			3
Homodolicholide	-0.068897056	13.8005707	-2.022968346	0.044363603	0.320865294	-4.047567101
Callystatin A	-0.057433361	13.21479133	-2.021791388	0.044486193	0.320865294	-4.049752123
4-Oxocyclohexanecarboxylate	-0.062395842	12.18332866	-2.01652654	0.0450381	0.320865294	-4.059511389
N-Nonanoylglycine	-0.066723174	12.6966528	-2.016404084	0.045051006	0.320865294	-4.059738091
Hexadecanedioic acid	0.18270996	14.89972323	2.015680591	0.0451273 2	0.320865294	-4.061077221
Quinolinate	0.085195579	15.12072159	2.014933403	0.045206249	0.320865294	-4.062459724

2,4-Dinitro-1-(3-nitrophenoxy)benzene	0.071196355	12.72826288	2.012999506	0.045411079	0.320865294	-4.066035682
Carnosic acid	0.107804723	14.5416057	2.010936275	0.045630476	0.320865294	-4.069847162
xi-7-Hydroxyhexadecanedioic acid	0.079396386	13.16859233	2.008712276	0.045867976	0.320865294	-4.073951433
D-erythro-L-galacto-Nonulose	0.108996191	16.41308791	2.007152269	0.046035193	0.320865294	-4.076827746
5''-Hydroxypiroxicam	0.136806716	13.81508687	2.002075496	0.046582957	0.323067869	-4.086173364
3-Oxotetradecanoic acid	0.092539199	14.16890305	1.995816992	0.047265822	0.325443941	-4.097663134
5,8-Tetradecadienoic acid	0.105856162	14.69234104	1.994664558	0.047392482	0.325443941	-4.099775084
Propyl propane thiosulfonate	0.10282405	13.52556152	1.98907793	0.0480105	0.32669729	-

			4	79		4.109996526
Biotinyl-CoA	-0.039690726	13.48908317	-1.988780125	0.048043719	0.32669729	-4.110540634
Cholesterol	-0.176523418	12.95908799	-1.986118983	0.048340709	0.327121106	-4.11539916
N-Acetyl-2,3-dihydro-1H-pyrrole	0.237291248	12.12711328	1.978312304	0.049220928	0.330047969	-4.129616009
CE(18:1(9Z))	-0.047223574	13.02325115	-1.977071242	0.049362101	0.330047969	-4.131871171
(2E)-3-[3-(sulfooxy)phenyl]prop-2-enoic acid	-0.085428149	13.07126305	-1.974506713	0.049654905	0.330047969	-4.136526928
Aspartate semialdehyde	-0.094294188	13.54325254	-1.97393584	0.049720282	0.330047969	-4.13756251

			9			
C26:0	-0.091347438	13.99345804	-1.97031517	0.050136631	0.331234422	-4.14412394
Saponin H	-0.0718006	13.68256116	-1.967966554	0.050408273	0.331458173	-4.148373939
De-O-methylsterigmatocystin	-0.061486675	14.12188082	-1.960689266	0.0512578 7	0.335462302	-4.161511813
Methyl-His	-0.110877819	14.70257286	-1.949519468	0.052585375	0.342542116	-4.181585929
Carumonam sodium	-0.057747965	14.81980891	-1.946957086	0.052893957	0.342949658	-4.186175437
Molybdopterin precursor Z	-0.157577836	16.09780447	-1.938995265	0.053862525	0.347612774	-4.200398895
Methacycline	0.092858287	13.47587155	1.93363781	0.0545226	0.348954766	-

				26		4.209938209
Indole-3-carboxilic acid-O-sulphate	0.077660289	12.68860644	1.931374047	0.054803584	0.348954766	-4.213961362
Glyoxylic acid	0.107680403	13.34402584	1.930358988	0.054929958	0.348954766	-4.21576385
Succinimide	-0.061873982	14.09939438	-1.928013618	0.055222892	0.348954766	-4.219925146
Arginyl-Cysteine	0.113352272	13.37852023	1.927221703	0.055322097	0.348954766	-4.221329109
4-Butyl-5-ethylthiazole	-0.081474424	13.56444259	-1.923813312	0.055750783	0.350074736	-4.227365411
3''-Hydroxy-e,e-caroten-3-one	-0.057619235	13.56397914	-1.920340737	0.056190405	0.351031834	-4.23350481

GF 109203X	0.154967099	14.06891742	1.918639499	0.056406837	0.351031834	-4.236508645
Naltriben	0.165443358	12.90285001	1.90989493	0.057530386	0.354798867	-4.251908276
PE(14:0/22:6(4Z,7Z,10Z,13Z,16Z,19Z))	-0.070522874	14.00309645	-1.90370518	0.058336957	0.354798867	-4.262767794
5-Hydroxypentanoic acid	-0.171096798	16.16189857	-1.900120744	0.058808347	0.354798867	-4.26904093
Diisopropyl sulfide	-0.089578332	14.48129025	-1.898639327	0.059004097	0.354798867	-4.271630239
Cilastatin; 2-{4-[(1E)-1,2-diphenylbut-1-en-1-yl]phenoxy}acetic acid	-0.169760365	14.46993501	-1.897458975	0.059160455	0.354798867	-4.273691935
Calcipotriol	0.095285754	13.12312061	1.89674599	0.0592550	0.354798867	-

			6	69		4.274936681
2-Hydroxymethylserine; Adenine	0.070297434	13.26484813	1.896051626	0.059347335	0.354798867	-4.276148508
Topotecan	0.171116942	12.7020252	1.895211746	0.059459096	0.354798867	-4.277613708
Taurine	0.200407646	16.64443367	1.894404134	0.059566673	0.354798867	-4.279022025
Salicifoline	-0.057601317	12.20889903	-1.892712234	0.059792744	0.354798867	-4.281970495
2-Arachidonylglycerol	-0.075608981	14.02342432	-1.892569372	0.059811861	0.354798867	-4.282219344
Irbesartan	0.428246366	17.26678083	1.889863214	0.060174951	0.355440175	-4.28692973

						7
Glycerol triundecanoate	-0.107625739	19.01168112	-1.879714469	0.061553061	0.362046273	-4.304536976
16-Dehydroprogesterone	0.095287184	14.60149363	1.877542012	0.061851456	0.362272814	-4.308294133
2-Amino-4-oxo-4-alpha-hydroxy-6-(erythro-1'',2'',3''-trihydroxypropyl)-5,6,...	0.201741795	13.4696045	1.871728621	0.062655884	0.363631478	-4.318327503
LysoPC(15:0)	-0.098790951	19.42502296	-1.871451887	0.062694393	0.363631478	-4.318804371
Phenylalanine	0.107369809	18.53108164	1.870220502	0.062865987	0.363631478	-4.320925473
Arginyl-Arginine	0.065250829	13.78307779	1.861707435	0.064063017	0.365170261	-4.335552676

Bilobetin	-0.052762603	14.279989	-1.860380193	0.064251339	0.365170261	-4.33782735
5-Heptadecyl-1,3-benzenediol	-0.086858004	13.59059957	-1.858870541	0.064466102	0.365170261	-4.340412741
gamma2-Solamarine	-0.049999022	13.50086941	-1.856776223	0.064765028	0.365170261	-4.343996063
Rifamycin Z	-0.066882058	13.40938942	-1.855807969	0.064903618	0.365170261	-4.345651403
Phenylacetaldehyde	0.087269526	15.24023414	1.855374008	0.064965812	0.365170261	-4.346393037
PS(DiMe(11,3)/MonoMe(13,5))	-0.075458303	15.27648726	-1.853946145	0.0651708	0.365170261	-4.348832061
Madlongiside C	-0.078282327	13.49928723	-	0.0652639	0.365170261	-

			1.853298751	18		4.349937317
Cys	-0.040148254	12.78046226	-1.850484836	0.065669945	0.365170261	-4.354737016
CDP-DG(16:1(9Z)/20:4(5Z,8Z,11Z,14Z))	-0.045981696	13.92154919	-1.849462379	0.065817997	0.365170261	-4.356479279
1'-Hydroxy-gamma-carotene	-0.084247075	14.10935527	-1.84811471	0.066013562	0.365170261	-4.358774281
Tetradecanoyl-CoA	-0.038134549	13.53066177	-1.841064529	0.067044518	0.368240738	-4.370754011
PGF2a ethanolamide	0.079945535	13.15864037	1.840708387	0.067096949	0.368240738	-4.371357997
5-Methylthiopentanaldoxime	0.086807285	15.3440772	1.836683379	0.067691879	0.368680382	-4.37817622

						6
1,8-Diazacyclotetradecane-2,9-dione	-0.045476594	13.68645735	-1.836588131	0.0677060 1	0.368680382	-4.378337398
12-O-Tetradecanoylphorbol 13-acetate	-0.052846506	13.38603362	-1.82772061	0.0690323 63	0.374440131	-4.393307066
4-ethylphenylsulfate	0.119179653	13.31855663	1.821246463	0.0700142 48	0.377541901	-4.404192162
2,5-Furandicarboxylic acid; Methyl phenyl disulfide	0.098006715	12.6679487	1.818966879	0.0703627 12	0.377541901	-4.408015982
C10:1	0.097456056	14.19129566	1.818614467	0.0704167 1	0.377541901	-4.408606712
MG(0:0/22:4(7Z,10Z,13Z,16Z)/0:0)	-0.074176829	13.85274319	-1.816334512	0.0707668 85	0.377965663	-4.41242581

Homodolichosterone	-0.05902288	13.79739956	-1.814148355	0.071104003	0.378316721	-4.41608344
Mevalonate	0.086921041	14.23581904	1.8077437	0.072099279	0.382153595	-4.426774473
Lauroyl peroxide	-0.068046016	14.05626162	-1.798860605	0.073498699	0.388095403	-4.441542151
Cefuroxime	0.135245044	13.37735599	1.793311448	0.074384199	0.391266195	-4.450731632
D-Urobilin	-0.157589745	13.84325979	-1.791590775	0.074660551	0.391266195	-4.453575513
Butyl (S)-3-hydroxybutyrate glucoside	0.159779261	13.14134578	1.786233735	0.075526344	0.393191262	-4.462412566
Alanine	0.077710943	16.96862768	1.78582948	0.0755920	0.393191262	-

			5	07		4.463078385
Debromoaplysiatoxin	-0.216136921	14.16533139	-1.781331347	0.076325867	0.393341608	-4.470477183
Aminophenol	0.099462527	14.09907418	1.780268663	0.076500093	0.393341608	-4.472222511
2-Oxoglutaramate	0.090664841	12.39980927	1.779417503	0.076639875	0.393341608	-4.473619708
Novapikromyin	-0.048764753	13.6093088	-1.77858374	0.076777004	0.393341608	-4.474987722
6-Carboxyhexanoyl-CoA	-0.068692018	13.52101355	-1.776378588	0.077140656	0.393341608	-4.47860288
6""-O-Malonyldaidzin	0.132677304	14.02661876	1.773592795	0.077602081	0.393341608	-4.48316374

						2
N-Acetylneuraminic acid	0.137046746	14.2976094	1.771733761	0.0779112 6	0.393341608	-4.486203471
Musaroside	0.118944536	13.38188391	1.76911978	0.0783477 05	0.393341608	-4.490472405
Pyridoxaminium(1+)	-0.06451224	13.25289368	-1.768984351	0.0783703 71	0.393341608	-4.490693411
Bimatoprost	0.096761215	12.80046091	1.767579756	0.0786057 72	0.393341608	-4.492984585
3-(4-Methyl-3-pentenyl)thiophene	0.089431832	15.60697624	1.766694073	0.0787545 05	0.393341608	-4.494428407
Fumitremorgin B	0.081068698	13.36201171	1.76519409	0.0790069 23	0.393341608	-4.496872047

SM(d18:0/24:1(15Z)(OH))	-0.089100275	14.70477785	-1.75276659	0.081123821	0.400996379	-4.517040514
Endoxifen sulfate	0.055629202	12.85016591	1.75171401	0.081305228	0.400996379	-4.518742395
Alpha-Tocopherol	-0.075169646	17.27421382	-1.751121771	0.081407443	0.400996379	-4.519699532
Sulfurous acid	-0.119114056	14.3749207	-1.741887207	0.083014876	0.407278209	-4.534583233
Eremopetasinorol	-0.145999682	13.02232723	-1.740451675	0.083267066	0.407278209	-4.536890086
Benzosemiquinone	0.115106407	13.48528639	1.73331192	0.084530657	0.412013062	-4.548336053
2-Vinylthiophene	-0.035777638	12.42842475	-	0.0848954	0.41234943	-

			1.731266779	71		4.551606281
Varenicline	-0.065116211	12.10123108	-1.723853726	0.086228582	0.41414867	-4.563428545
Mascaroside	-0.05261071	13.71442911	-1.722815805	0.086416586	0.41414867	-4.565079885
1-Methylnaphthalene	-0.093929795	12.58604989	-1.721951016	0.086573485	0.41414867	-4.566455034
TG(18:3(9Z,12Z,15Z)/18:2(9Z,12Z)/18:3(9Z,12Z,15Z))	-0.057025839	13.98541045	-1.720954214	0.086754622	0.41414867	-4.568039273
15beta-Hydroxydesogestrel	0.101431388	13.61402112	1.720577599	0.08682314	0.41414867	-4.568637605
Acetatic acid	-0.07968602	15.54303529	-1.71878504	0.087149865	0.41414867	-4.57148371

						6
Ergotamine	-0.060799757	13.29957094	-1.716874447	0.087499204	0.41414867	-4.574514066
Uvaricin	-0.052227581	13.68635763	-1.7160917	0.087642653	0.41414867	-4.57575462
PE(14:0/P-16:0)	-0.050565489	13.42300378	-1.712457922	0.088311093	0.415302688	-4.581506505
2,3-Butanediol glucoside; Histidinyl-Proline	0.347183842	14.5967956	1.710590762	0.088656167	0.415302688	-4.584457423
C16:3	0.106371286	13.99517344	1.709918743	0.088780632	0.415302688	-4.585518738
Histidine	0.086134453	18.05892104	1.701689928	0.090316225	0.418440247	-4.598481632
Alliospiroside D	-0.06118511	13.97836932	-	0.0906450	0.418440247	-

			1.699942485	74		4.601226578
Epinephrine sulfate	0.116567808	14.12001891	1.699368916	0.090753225	0.418440247	-4.602126962
C9:1	0.163395102	13.84610585	1.696658877	0.091265636	0.418440247	-4.606377178
13-Deoxytedanolide	-0.243486271	14.37333013	-1.696420174	0.091310882	0.418440247	-4.606751227
2-(4-Methyl-5-thiazolyl)ethyl butanoate	-0.018224572	16.70059273	-1.694084034	0.091754652	0.418440247	-4.610409263
Homoserine lactone	-0.078486506	14.03630359	-1.693283413	0.091907138	0.418440247	-4.611661787
Norepinephrine sulfate	0.143129495	13.62922234	1.691079075	0.092328036	0.418440247	-4.61510737

						2
Thien-2-ylacetate	-0.044927533	12.64996077	-1.690508535	0.092437229	0.418440247	-4.615998469
Griseorhodin A	0.182804561	13.56874486	1.690425748	0.092453082	0.418440247	-4.616127746
alpha-Ionol O-[arabinosyl-(1->6)-glucoside]	0.087348987	13.310217	1.684694466	0.093555922	0.419503859	-4.625062518
Isoleucyl-Tyrosine	0.347718022	14.77605418	1.681686367	0.094138994	0.419503859	-4.629740197
L-Menthyl acetoacetate	0.069164499	13.8219545	1.679779827	0.094510064	0.419503859	-4.632700717
Mulberrofuran T	-0.041532805	13.75674631	-1.679720665	0.094521597	0.419503859	-4.632792532

C25:0	-0.068007081	13.61366491	-1.677875001	0.094881978	0.419503859	-4.635655318
Acetylornithine	-0.079621605	15.20158176	-1.677521771	0.094951075	0.419503859	-4.63620286
2,5-Diethyl-3,6-dimethylpyrazine	-0.229416204	13.91506307	-1.675727737	0.095302643	0.419503859	-4.638982064
Nitrosopiperidine	-0.119095614	12.73092771	-1.675481644	0.09535095	0.419503859	-4.63936307
15-Keto-13,14-dihydroprostaglandin A2	0.101938008	15.55050643	1.675249684	0.095396502	0.419503859	-4.639722146
Proline	0.072818247	17.86846222	1.672585969	0.095920849	0.420483218	-4.643842132
N-Acetylanonaine	0.13216558	12.73922276	1.66951460	0.0965283	0.420510727	-

			9	22		4.648584721
Zeaxanthin diglucoside	-0.062314737	13.95828331	-1.66950393	0.096530439	0.420510727	-4.648601196
3-Phosphonooxypyruvate	0.0725662	12.0337824	1.661582527	0.098111528	0.423820751	-4.660793725
Androsta-5,16-dieno[17,16-b]quinolin-3beta-ol	0.157519012	12.60794044	1.657294056	0.098976149	0.423820751	-4.667370973
Gibberellin A110	0.090215129	13.35820438	1.656350183	0.099167268	0.423820751	-4.668816379
MG(P-18:0e/0:0/0:0)	-0.110786678	13.24662924	-1.655314913	0.099377235	0.423820751	-4.670400823
Asparagine	0.08378113	14.54507609	1.652625569	0.09992434	0.423820751	-4.67451227

						3
Dodecylaldehyde	-0.066037621	11.90747148	-1.651975097	0.100057031	0.423820751	-4.675505732
Cerebronic acid	-0.060931544	13.25703076	-1.651136877	0.100228223	0.423820751	-4.676785379
PIP2(16:0/20:4(5Z,8Z,11Z,14Z))	-0.03764775	13.82327986	-1.650252531	0.100409105	0.423820751	-4.678134757
Geranyl 3-methylbutanoate	0.081755115	13.24264471	1.650067526	0.100446977	0.423820751	-4.678416958
p-Hydroxyphenylacetic acid	0.149292737	16.55667319	1.649668731	0.100528652	0.423820751	-4.679025163
Glutamylmethionine	0.128139838	13.81376104	1.648661608	0.100735155	0.423820751	-4.680560495

S-Decyl GSH	0.082123065	13.01237279	1.647670731	0.100938658	0.423820751	-4.682070173
Ribothymidine	0.125142528	14.86691829	1.645545081	0.101376331	0.424380195	-4.685305786
N(tele)-methylhistaminium; Sulcatone	-0.060599666	12.05527592	-1.643773202	0.101742324	0.424637124	-4.687999793
Indole	0.078202649	15.01339411	1.640336746	0.102455166	0.426335827	-4.693216618
GMP	0.061853675	13.20374444	1.629419983	0.104746274	0.433914303	-4.709718713
Epothilone C	0.122679935	13.18775356	1.628699378	0.104898938	0.433914303	-4.710804229
3,3''-Thiobispropanoic acid	0.102912884	14.73718088	1.62364135	0.1059755	0.437070641	-

			1	21		4.718410466
Azelaic acid	-0.126329933	15.41099033	-1.618133031	0.107157968	0.440337542	-4.726667662
Zileuton O-glucuronide	0.232393312	13.61550874	1.615835112	0.107654354	0.440337542	-4.730104264
Pentoxifylline	0.110964975	13.33002078	1.615553647	0.107715281	0.440337542	-4.730524877
Dehydroalanine	-0.08364738	14.69568418	-1.610748355	0.108759696	0.443307065	-4.737694739
1b-Hydroxycholic acid	-0.07043446	13.59809362	-1.609048896	0.109130994	0.443523631	-4.740225486
Zizyphine A	0.092110955	13.67413607	1.603298298	0.110394878	0.445798574	-4.748769688

						4
Pyridine	0.087395402	11.37564237	1.601360292	0.110823433	0.445798574	-4.751642448
Orcinol	-0.107321048	15.49394883	-1.601264036	0.110844752	0.445798574	-4.751785043
Saphenamycin	-0.090525926	12.5707341	-1.600699097	0.110969946	0.445798574	-4.752621783
Ginsenoyne A linoleate	-0.076398022	14.48845195	-1.596783136	0.111840841	0.446646368	-4.758413871
Dihydroxy-Val	0.055467641	12.86905008	1.595598025	0.112105473	0.446646368	-4.760164041
Fusicoccin H	-0.101487587	14.60741352	-1.595433721	0.112142202	0.446646368	-4.760406586

Eremopetasitenin B2	0.219239916	13.80171833	1.592550374	0.1127882	0.44793982	-4.764658997
4-(1,1,3,3-Tetramethylbutyl)-phenol	-0.076777353	14.55043911	-1.59028793	0.113297316	0.448622284	-4.767990443
1-Methylpyrrolinium	-0.050228314	11.08639976	-1.588929701	0.113603778	0.448622284	-4.769988217
Dihydroxycitracridone I	0.087837207	12.72036797	1.585912469	0.114286919	0.449997373	-4.774420212
Dynemicin A	0.127928358	13.69556105	1.58454497	0.114597609	0.449997373	-4.776426222
Butanal	-0.121537313	12.63580834	-1.58084794	0.115440913	0.451031492	-4.781841021
Nopalinic acid	0.072993544	13.72078188	1.58055446	0.1155080	0.451031492	-

			5	65		4.782270326
Hexuronate	0.14155822	14.9004789	1.577575274	0.116191511	0.451138179	-4.786623995
Ampicillin	-0.308649669	14.71533317	-1.577118697	0.116296535	0.451138179	-4.787290511
Deoxyhexose; Butyl isopropyl disulfide	-0.109008599	16.64325782	-1.57141518	0.117614826	0.451138179	-4.795600715
Hexahomomethionine	-0.071379902	12.55938161	-1.571227489	0.117658409	0.451138179	-4.795873689
3-Hydroxymonoethylglycinexylidide	0.110095316	12.30393517	1.571081641	0.117692284	0.451138179	-4.796085785
8-Oxodeoxycoformycin	0.210361963	13.76801221	1.570735267	0.117772764	0.451138179	-4.79658941

						3
octanoate radical	0.081112136	11.96828159	1.570614706	0.117800787	0.451138179	-4.796764684
Dextromethorphan	-0.076298321	12.11832062	-1.568206313	0.118361689	0.452044369	-4.800263236
Cevimeline	0.212002093	12.71491065	1.566001304	0.118877072	0.452772238	-4.803461753
DL-2-Aminooctanoic acid	-0.114493665	12.83619357	-1.557962449	0.120771037	0.458477879	-4.815085501
2-Dimethylamino-5,6-dimethylpyrimidin-4-ol	-0.055167489	13.33442021	-1.556858829	0.121032898	0.458477879	-4.816676722
Valproic acid glucuronide	0.28284723	13.69189567	1.554354491	0.121628773	0.459486475	-4.820283444

Hydroxybutynal	-0.052509312	12.76880258	-1.546927116	0.123409617	0.464954072	-4.83094697
(Z)-4-Heptenal	-0.051991898	11.9804834	-1.541418313	0.124743645	0.467968582	-4.838823805
1-Propenyl 1-(propylsulfinyl)propyl disulfide	0.132478827	14.96242969	1.540853161	0.124881142	0.467968582	-4.839630344
S-Inosyl-L-homocysteine	0.080176486	12.87678336	1.533351747	0.126717474	0.473576833	-4.850308416
2-Benzoxazolol	0.113373032	13.26691532	1.527899105	0.128065509	0.477120316	-4.858038193
Isoelemicin	-0.28627979	15.54031025	-1.526753492	0.128350157	0.477120316	-4.85965882
Methamidophos	0.065119321	12.10843606	1.52406892	0.1290191	0.47827526	-

			8	25		4.863451856
TG(20:4(5Z,8Z,11Z,14Z)/20:4(5Z,8Z,11Z,14Z)/22:6(4Z,7Z,10Z,13Z,16Z,19Z))	-0.045756849	13.83717127	-1.522756985	0.129347039	0.47827526	-4.865303138
2-amino-4-({1-[(carboxymethyl)-C-hydroxycarbonimidoyl]-2-({2,3,4,6-tetrahyd...	-0.102284565	13.55197407	-1.520703286	0.129861662	0.478388948	-4.868197984
TG(20:0/22:5(4Z,7Z,10Z,13Z,16Z)/22:6(4Z,7Z,10Z,13Z,16Z,19Z))	-0.034870712	13.88332914	-1.519897002	0.13006414	0.478388948	-4.869333462
N-lactoyl-Tryptophan	0.148248338	14.00212326	1.51681247	0.130841023	0.479203033	-4.873671931
6-[4-(5,7-dihydroxy-6-{4-hydroxy-6-methyl-5-oxo-3-[(3,4,5-trihydroxy-6-meth...	-0.035905167	13.91226351	-1.515884266	0.131075512	0.479203033	-4.874975787
Trihexosylceramide (d18:1/12:0)	-0.039995195	14.00191433	-1.51493067	0.131316757	0.479203033	-4.87631449

			7			1
N-(3-acetamidopropyl)pyrrolidin-2-one	-0.086550578	13.18154783	-1.512658988	0.131892858	0.479364253	-4.879500306
3-Hydroxy-1-phenyl-1-eicosanone	-0.041053417	12.76791588	-1.512045842	0.132048609	0.479364253	-4.880359381
Farnesol	0.051222086	11.9108065	1.506924433	0.133355919	0.481505815	-4.88752167
Tetradecanedioic acid	0.098588375	14.32952258	1.506001475	0.133592571	0.481505815	-4.888809901
15(R)-hydroperoxy-EPE; Cinnamyl benzoate	0.142703165	15.52004498	1.503819798	0.134153268	0.481505815	-4.891851944
Sulfoacetyl-CoA	-0.061940249	13.7952077	-1.503531208	0.134227574	0.481505815	-4.89225402
Dehydropipernonaline	0.066143416	13.27393899	1.50299514	0.1343656	0.481505815	-

			5	83		4.893000685
Toluene-cis-dihydrodiol	-0.04396608	12.395554	-1.499318807	0.135315826	0.483667338	-4.898114332
Histamine	0.064749764	13.32147068	1.493321077	0.136877141	0.484855793	-4.906430678
o-O-glucuronide rosiglitazone	-0.082019907	13.24761493	-1.493024722	0.136954649	0.484855793	-4.906840755
Medicagenic acid	0.100773438	13.94708851	1.49301369	0.136957535	0.484855793	-4.906856019
Dieporeticenin	-0.057173263	14.03481857	-1.492700114	0.137039586	0.484855793	-4.907289835
Ceanothine C	-0.047137202	13.25497845	-1.48989597	0.137775017	0.486057063	-4.91116526

Anthopleurine	0.142930376	12.48377992	1.488287211	0.138198321	0.486057063	-4.913385406
3-Oxododecanoic acid	0.062191155	13.38639789	1.487426739	0.138425146	0.486057063	-4.914571926
Sulfamethoxazole N4-hydroxylamine	0.079779546	12.761533	1.480987795	0.140131669	0.489439792	-4.923429414
Trigoforin	-0.105596638	17.49691148	-1.480871082	0.140162752	0.489439792	-4.923589619
2-Ethyl-5-methylthiophene	-0.047345746	12.49799832	-1.479308774	0.140579332	0.489439792	-4.92573292
4-Amino-1-piperidinecarboxylic acid	-0.077796975	17.2801529	-1.47850907	0.140792939	0.489439792	-4.926829164
Arbekacin	-0.134371997	13.77419885	-1.4740619	0.1419854	0.49180725	-

						4.932914821
Vitamin A	0.077395609	14.45209357	1.472822926	0.142319005	0.49180725	-4.934607082
2-Methyl-1-methylthio-2-butene	0.056969778	14.12799691	1.472031677	0.142532374	0.49180725	-4.935687087
Methyl-Lys	-0.067820193	15.43052874	-1.466903175	0.143921329	0.495373659	-4.942673407
N-Acetylglutamine	-0.097037127	17.71207161	-1.463976189	0.144718718	0.496891362	-4.946650015
Creatinine	-0.07495678	16.97590614	-1.456729315	0.146707631	0.501914478	-4.9564622
C14:1	0.118374258	16.20998589	1.455241901	0.147118447	0.501914478	-4.95847024

						9
Tauroursodeoxycholic acid	0.245853167	16.05268991	1.453923095	0.147483434	0.501914478	-4.960248995
Leucomycin V	-0.039164736	13.46621617	-1.453423415	0.147621905	0.501914478	-4.960922528
7-(4-Hydroxy-3-methoxyphenyl)-5-methoxy-1-phenyl-3-heptanone	0.1772928	13.81896173	1.451757494	0.148084288	0.502261553	-4.963166437
2(3H)-Benzothiazolethione	0.094011122	11.74185276	1.448691494	0.148938181	0.50303096	-4.967289595
MG(0:0/15:0/0:0)	-0.050968102	14.93051161	-1.448352425	0.149032845	0.50303096	-4.967745051
Serine	0.059816565	14.43196632	1.44645797	0.149562607	0.503599694	-4.97028787
Menthol	0.058309512	11.98040697	1.44277934	0.1505954	0.505855463	-

			3	21		4.975216175
(3S,5S)-Carbapenam-3-carboxylic acid	0.082589966	13.25433093	1.440340393	0.151283196	0.506944173	-4.978476897
13-L-Hydroperoxylinoleic acid	0.181918913	17.43011347	1.430871822	0.153976159	0.514730854	-4.991084602
1,4-Dimethyl-7-ethylazulene	-0.079359422	12.62208713	-1.426476493	0.155238643	0.516119752	-4.996909455
(Z)-9-Cycloheptadecen-1-one	0.09866206	12.24149289	1.425489346	0.15552327	0.516119752	-4.998215246
Dopamine	0.093948452	12.75496321	1.424807323	0.155720152	0.516119752	-4.999116904
Xanthine	0.274352267	16.45036701	1.424279652	0.155872608	0.516119752	-4.99981421

						3
Amlexanox	0.085462705	13.26769959	1.422169651	0.156483374	0.516914274	-5.00260002
L(-)-Nicotine	-0.191152897	13.09609418	-1.41751463	0.157837291	0.519442697	-5.008731678
Heptabarbital	0.146185945	12.09633291	1.416626354	0.158096666	0.519442697	-5.009899491
(10S)-Juvenile hormone III diol	0.088213903	15.01514819	1.415702793	0.158366676	0.519442697	-5.011112932
Propylhydroxypentanoic acid	0.153585951	13.64292514	1.411930106	0.159473328	0.519483155	-5.016061711
Oxytocin	-0.031142025	13.74042338	-1.410917226	0.159771439	0.519483155	-5.017388141
Capsianoside I	-0.04767884	13.37126835	-	0.1600903	0.519483155	-

			1.40983534	3		5.018803909
gamma-Glutamylisoleucine	0.064676881	14.56804632	1.409328401	0.160239919	0.519483155	-5.01946693
Succinyl sulfathiazole	-0.064540128	16.91882425	-1.409320356	0.160242293	0.519483155	-5.019477449
a-Methyldopa mono-O-sulfate	0.051138744	12.83125327	1.404128758	0.161780393	0.521187758	-5.026254
2-Hydroxymethylclavam	0.086257344	13.67619807	1.402451628	0.162279663	0.521187758	-5.028437909
alpha-L-Rhamnopyranosyl-(1->3)-alpha-D-galactopyranosyl-(1->3)-L-fucose	0.078543089	13.16705054	1.402439106	0.162283395	0.521187758	-5.028454204
N6,N6,N6-Trimethyl-L-lysine	-0.097379359	13.60679048	-1.402298379	0.162325343	0.521187758	-5.028637337
20-Oxo-leukotriene E4	0.058642962	13.22925	1.40125200	0.1626375	0.521187758	-

			8			5.029998447
Isocarbamid	-0.053038285	12.18583929	-1.39798527	0.163614979	0.523117617	-5.034241388
1,3-Benzenedisulfonamide	0.084568258	14.39248229	1.39602432	0.164203877	0.523799095	-5.036783669
Acamprosate	-0.092364321	14.66421918	-1.390837624	0.165769258	0.525304145	-5.043491121
Doxycycline	0.114212875	13.53971744	1.390358941	0.165914296	0.525304145	-5.044108921
4-Oxo-4-(3-pyridyl)-butanamide	0.066331971	12.98489451	1.389926339	0.166045455	0.525304145	-5.044667071
3-Methyl-9H-carbazole-9-carboxaldehyde	-0.116167703	12.16894079	-1.389472888	0.166183018	0.525304145	-5.045251934

d-Tocotrienol	0.055275427	13.50990138	1.387335775	0.166832519	0.526164098	-5.048005883
Tragopogonsaponin L	-0.045794822	14.04889856	-1.385255498	0.16746659	0.526971616	-5.050682599
C16:2	0.088947938	15.00740777	1.380601474	0.168891743	0.530259211	-5.056656726
6-Hydroxy-5-methoxyindole glucuronide	0.066540566	13.50499266	1.377074493	0.169977864	0.530512095	-5.061170994
Pyrithione zinc	0.068868894	13.19308605	1.374579032	0.170749512	0.530512095	-5.064358157
Acetaldehyde diisoamyl acetal	0.057813948	11.71750479	1.374328849	0.170827019	0.530512095	-5.064677373
Cycloartanyl ferulate	-0.047417457	13.60878295	-	0.1708342	0.530512095	-

			1.374305616	19		5.064707015
1-Methoxy-1H-indole-3-acetonitrile	-0.090527591	13.68516995	-1.374173599	0.1708751 3	0.530512095	-5.064875433
Pyrrolidine	-0.082543325	10.7802443	-1.367546004	0.1729384 9	0.53572501	-5.073310118
5,7-Dihydro-2-methylthieno[3,4-d]pyrimidine	0.249568009	14.7530515	1.364063019	0.1740303 37	0.53791195	-5.077726746
Kuwanon Y	-0.037677897	13.68688805	-1.360502359	0.1751518 86	0.539489639	-5.082230448
TG(18:0/24:0/22:5(4Z,7Z,10Z,13Z,16Z))	-0.029176275	13.73750869	-1.359879162	0.1753487 4	0.539489639	-5.083017512
Epoxyeremopetasinorol	-0.072471593	14.44726064	-1.35784993	0.1759908 79	0.539489639	-5.08557785

			8			9
Tryptanthrine	-0.294397227	15.28107217	-1.356357143	0.176464394	0.539489639	-5.087458979
(S)C(S)S-S-Methylcysteine sulfoxide	0.069863922	12.84501293	1.355362418	0.176780452	0.539489639	-5.088711337
Epithienamycin B	0.170132579	15.30737525	1.355103415	0.176862816	0.539489639	-5.089037274
1-(1-Methoxy-1-methylethyl)-4-methylbenzene	-0.271421864	15.97510025	-1.352416322	0.177719019	0.540917712	-5.092415182
4-Amino-2-methyl-5-phosphomethylpyrimidine	-0.061910698	16.276183	-1.350013358	0.178487317	0.542072593	-5.095430341
2-Methylacetophenone	-0.049085219	13.90677073	-1.347066576	0.179432886	0.543742125	-5.099120683

Mycothione	-0.029565279	13.64547722	-1.344993692	0.18010028	0.543742125	-5.101711875
Pyruvate	0.070734801	15.63317082	1.343816175	0.18048025	0.543742125	-5.103182076
1-Phenyl-1-pentanone	-0.259033654	15.44630946	-1.343453785	0.180597277	0.543742125	-5.103634288
Milrinone	-0.085690648	14.01561175	-1.341214111	0.18132195	0.54411837	-5.106426428
2,4-Dihydroxyacetophenone 5-sulfate	0.094208355	18.21536196	1.340655911	0.1815029	0.54411837	-5.107121609
Myricatomentoside I	0.036783132	13.11458687	1.33619164	0.182954929	0.547294359	-5.11267118
Austalide B	0.090962939	13.30636872	1.331848	0.184376029	0.550361649	-5.11805334

						9
Isophorone	0.060765432	12.20440576	1.329952881	0.184998624	0.550361649	-5.120396186
Withaperuvin D	0.084545522	13.4650963	1.329448117	0.185164716	0.550361649	-5.121019646
Desmethylnortriptyline	-0.06400101	12.33033177	-1.325538315	0.186454994	0.553017579	-5.125840979
SN38 glucuronide carboxylate form	-0.105591598	13.23722874	-1.32148417	0.187799963	0.555824093	-5.130825578
2-cyano-3-(3,4-dihydroxy-5-nitrophenyl)-N,N-diethylpropanamide	0.109338837	12.97737653	1.319221444	0.188553754	0.55687274	-5.133601095
Tenoxicam	-0.021919361	13.73634701	-1.317582368	0.189101189	0.55730879	-5.135608711

Thioglycolic acid	-0.065014921	11.46861992	-1.316371506	0.189506362	0.557324617	-5.137090254
8,8-Dimethoxy-2,6-dimethyl-2-octanol	-0.061499448	12.59292959	-1.314373688	0.190176271	0.558117308	-5.13953175
Methyl isothiocyanate	-0.114258306	11.10361794	-1.307835995	0.192380772	0.563114203	-5.147495874
3-Methyl-4-phenyl-3-buten-2-one	-0.139757857	13.70582083	-1.305941903	0.193022978	0.563114203	-5.14979594
Histidinol	-0.105935222	11.90791584	-1.303604284	0.193817752	0.563114203	-5.152630083
Itaconate	0.06165861	14.88205948	1.30230998	0.194258846	0.563114203	-5.154197158
Dibenzo[1,4]dioxin-2,3-dione	-0.207041942	15.50295008	-	0.1943570	0.563114203	-

			1.302021982	95		5.154545643
2,3-Dimethylmaleate	-0.042920352	14.71317826	-1.301194568	0.194639568	0.563114203	-5.155546413
Iminoacetate	0.060964789	12.6421177	1.300116328	0.195008127	0.563114203	-5.156849623
Hexanoic acid	-0.038003266	13.19624582	-1.299816839	0.195110588	0.563114203	-5.15721141
N-Docosahexaenoyl GABA	-0.126530074	14.01932978	-1.296266224	0.196328358	0.565045598	-5.16149437
13-OxoODE	0.092152831	14.84761949	1.295504121	0.19659047	0.565045598	-5.162412163
N-desmethylalmotriptan	0.161952042	12.65280386	1.29422443	0.197031177	0.565147038	-5.16395208

						8
BILA 2185BS	0.164369621	13.59433353	1.289812406	0.198556199	0.565279417	-5.169249858
Isochesnatin	-0.039362406	13.86794078	-1.28980021	0.198560427	0.565279417	-5.169264479
Glutamine	0.085099425	18.71356608	1.28977609	0.198568788	0.565279417	-5.169293392
Deoxycholic acid glycine conjugate	0.186803047	17.53498314	1.289399499	0.198699365	0.565279417	-5.16974475
Clarithromycin	-0.063280728	14.31202636	-1.286885039	0.199572834	0.566608006	-5.172755103
4''-O-Methylkanzonol W	-0.111083363	14.41780767	-1.283366501	0.200799837	0.567948718	-5.176957857
Gibberellin A39	0.036171778	14.08483106	1.28319463	0.2008599	0.567948718	-

			6	12		5.177162853
TG(20:4(5Z,8Z,11Z,14Z)/18:1(9Z)/22:5(7Z,10Z,13Z,16Z,19Z))	-0.036290347	13.84692665	-1.280289465	0.201877414	0.569670273	-5.180623981
7,8,8,12,13,21,22-heptahydroxy-19-(hydroxymethyl)-2,17,20,23-tetraoxapentac...	-0.036740589	13.99098894	-1.278135088	0.2026344	0.570633409	-5.183185657
Isoleucyl-Isoleucine	-0.08406322	13.66650968	-1.276695384	0.203141429	0.570633409	-5.184895181
Nb-Feruloyltryptamine	-0.064884189	16.65097294	-1.275829631	0.203446775	0.570633409	-5.185922276
Arachidonic acid	-0.098553326	18.52631737	-1.274294567	0.2039890 1	0.570707332	-5.187741731
cis-4-Hydroxycyclohexylacetic acid	-0.067143039	13.84330644	-1.27343828	0.204291936	0.570707332	-5.18875571

			7			2
7-Methoxypradimicinone II	-0.167431853	13.9577013	-1.270084128	0.2054817	0.572793549	-5.192721151
Dicrotophos	0.080204515	12.2129261	1.269019183	0.2058605 22	0.572793549	-5.193978027
Orange B	-0.03681659	14.10802976	-1.267767996	0.2063062 35	0.572890222	-5.195453384
NONOate; D-2-Hydroxyisocaproate	0.082671647	14.17863686	1.263514746	0.2078266 57	0.575578088	-5.200457971
4-Hydroxyaminoquinoline N-oxide	-0.169567546	13.80709809	-1.262752592	0.2080999 69	0.575578088	-5.201353011
p-Hydroxyphenylacetothiohydroximate	0.249025806	17.42236193	1.255614571	0.2106724 48	0.580477832	-5.209709807

Peonidin-3-glucoside	0.085945402	12.94449435	1.255526609	0.210704292	0.580477832	-5.209812497
1H-Pyrrolo[2,1-c][1,4]thiazine	0.041647656	11.88968744	1.252942272	0.211641457	0.581909648	-5.212826394
Xamoterol	0.064093622	13.23397646	1.251369307	0.212213355	0.582333484	-5.214657821
Carbamoyl phosphate	-0.024065394	12.62672315	-1.250063856	0.212688834	0.58249162	-5.216176059
Pilocarpine	-0.171773547	13.66385664	-1.247489674	0.213628697	0.583047175	-5.219165259
(2R)-O-Phospho-3-sulfolactate	-0.194726852	12.88723807	-1.247217637	0.213728197	0.583047175	-5.2194808
Phenol sulfate	-0.119317962	18.16966245	-	0.2145183	0.584059851	-

			1.24506046	96		5.221980558
Famotidine	-0.048665674	18.19606348	-1.242344199	0.215516409	0.584595579	-5.22512213
1,4-Dimethoxyglucobrassicin	0.0859955	13.23667862	1.240697311	0.216123149	0.584595579	-5.2270236
Hydroxyprolyl-Valine	0.065261422	13.58600076	1.239567961	0.216539935	0.584595579	-5.228326093
Ornithine	0.055182916	17.04357736	1.239435232	0.216588957	0.584595579	-5.228479094
Ricinine	0.043120661	13.6127189	1.238831634	0.21681199	0.584595579	-5.229174679
Punigluconin	-0.027863566	14.42549721	-1.230594543	0.219872294	0.591702659	-5.238633753

Aminoadipate	0.063750551	14.04626173	1.225146692	0.221913398	0.596044849	-5.244855666
Nornicotine	0.068485246	12.7248342	1.223455262	0.222549886	0.596604887	-5.246781896
Ceftizoxime	0.043020153	12.90477108	1.221525752	0.2232775	0.59740678	-5.248976054
Pantothenic acid	0.112037437	15.31991649	1.219527497	0.224032985	0.597449168	-5.251244792
PC(o-22:2(13Z,16Z)/22:3(10Z,13Z,16Z))	-0.043044464	14.10979149	-1.219084871	0.224200563	0.597449168	-5.251746837
Oryzarol	-0.037209246	12.82799647	-1.218085726	0.224579171	0.597449168	-5.252879449
Bisisodiospyrin; Brilliant blue	0.132649807	14.68661225	1.21651305	0.2251760	0.597497954	-

			1	39		5.254660352
Xanthurenic acid	0.072156788	13.07138104	1.215779704	0.225454752	0.597497954	-5.255490021
Ethylene glycol	0.062994106	11.70204815	1.213385679	0.226366342	0.598775484	-5.258195064
1,4''-Bipiperidine-1''-carboxylic acid	-0.040125683	12.21893124	-1.2102439	0.227566674	0.599222068	-5.261737038
N4-Acetylcytidine	0.049920575	14.72900509	1.209850238	0.227717396	0.599222068	-5.262180206
Docosadienoate (22:2n6)	-0.042286494	14.57333737	-1.209569972	0.227824746	0.599222068	-5.262495632
Leucyl-phenylalanine	0.100378615	13.77238814	1.204371058	0.229822663	0.603338591	-5.268333369

						5
Serinyl-Valine	-0.055116718	15.89691594	-1.202542213	0.230528455	0.604053883	-5.270381486
TG(22:0/22:6(4Z,7Z,10Z,13Z,16Z,19Z)/o-18:0)	-0.029680329	13.72840386	-1.200370035	0.231368761	0.604336972	-5.27280973
Diphyllin	0.132495226	15.01718796	1.200022144	0.231503546	0.604336972	-5.27319823
Mandelonitrile rutinoside	0.058497584	13.51702521	1.197341621	0.232543956	0.605918271	-5.276187928
8,11,14-Eicosatrienoic acid	-0.09246082	16.91803372	-1.195397351	0.233300688	0.606755893	-5.278352331
Nitrosonornicotine	0.125753821	13.23607796	1.192612957	0.234387465	0.607742268	-5.281445941
2,6-Di-tert-butylbenzoquinone	-0.053019725	12.82452377	-	0.2346941	0.607742268	-

			1.191828985	08		5.282315694
Estradiol	0.054975204	13.11498807	1.191078646	0.234987864	0.607742268	-5.283147605
3-Dehydroquinate; 5-(Methylthio)-2-[(methylthio)methyl]-2-pentenal	-0.082730039	16.4933483	-1.188773818	0.235891837	0.607947827	-5.285699771
3-Hydroxynonyl acetate	0.044795728	12.74003815	1.188652266	0.235939558	0.607947827	-5.285834232
(Iso)Citrate	0.085057496	18.96448389	1.186610232	0.236742667	0.608518318	-5.288091105
Cyclohexanone	-0.030900752	12.41877531	-1.183975235	0.237781827	0.608518318	-5.290997674
Hydroxytyrosol	-0.044730424	12.89613827	-1.183404333	0.238007398	0.608518318	-5.291626577

			8			1
Pseudoecgonine	-0.068049445	13.4222436	-1.183163907	0.238102442	0.608518318	-5.291891339
Benzoate	0.050006456	15.36517647	1.181872369	0.238613456	0.608518318	-5.293312701
12(13)Ep-9-KODE	0.08647954	15.20671095	1.180669971	0.239089902	0.608518318	-5.294634586
Spinoside A	0.059190432	13.608581	1.180350334	0.23921667	0.608518318	-5.294985764
5-Aminolevulinic acid	0.051008846	14.72477019	1.179127564	0.239702064	0.608642398	-5.296328328
Batrachotoxinin A	0.040262811	13.26788135	1.173301466	0.242024409	0.613421865	-5.302706364

Tiropramide	-0.092744077	16.2230475	-1.169626359	0.243497522	0.616035473	-5.306713613
C15:1	0.052707255	13.56106234	1.166148724	0.244897315	0.618454451	-5.310494129
C26:1	-0.038856072	13.97529729	-1.163515786	0.245960883	0.620017126	-5.313348997
Rishitin	0.045932348	13.19351429	1.155788878	0.249100965	0.623092487	-5.321690463
Plastoquinone 3	0.11779718	15.77998444	1.155548324	0.249199172	0.623092487	-5.321949269
Cefepime hydrochloride	0.211533689	13.78804843	1.15486614	0.249477828	0.623092487	-5.322682926
Furoic acid	0.075394218	16.34147512	1.15448812	0.2496323	0.623092487	-

			5	32		5.32308928
Aztreonam	0.154971101	13.68132451	1.153961433	0.249847716	0.623092487	-5.323655237
Gliclazide	-0.190416273	13.26350581	-1.153924635	0.249862769	0.623092487	-5.323694769
Desmethyl frovatriptan	-0.145456788	12.5756577	-1.148516853	0.252081877	0.62743447	-5.329490791
Demethylphylloquinone	-0.049831239	14.5139722	-1.147491682	0.252504116	0.62743447	-5.330586534
3,4,5-trihydroxy-6-[2-hydroxy-1-(1-oxo-1H-isochromen-3-yl)butoxy]oxane-2-ca...	0.081437219	13.09139851	1.144640829	0.253680912	0.627562923	-5.333628561
Cyromazine	0.045045707	14.37235638	1.143689905	0.254074295	0.627562923	-5.334641592

Rifamycin	-0.061138275	13.6824429	-1.141232724	0.255092775	0.627562923	-5.337255413
Dipiperamide C	-0.033356907	13.46125321	-1.140039737	0.255588287	0.627562923	-5.338522449
Palmitoylglycine	0.071019118	13.67466965	1.139777457	0.255697316	0.627562923	-5.338800833
(S)-9-Hydroxy-10-undecenoic acid	-0.047285634	12.70859295	-1.138881457	0.256070028	0.627562923	-5.339751373
2,3,6-Trihydroxypyridine	0.05165803	12.45714405	1.138758723	0.256121112	0.627562923	-5.33988152
Polyoxyethylene (600) monoricinoleate	0.062272488	13.66722873	1.138671741	0.256157319	0.627562923	-5.339973748
Ubiquinone-1	0.042300231	13.18418522	1.133890324	0.258153158	0.631342988	-5.34503281

						8
Furmecyclox	0.10253081	13.23545459	1.131550783	0.259133667	0.631733028	-5.34750056
2,3-Dimethylthiophene	0.056388915	13.24488951	1.131347457	0.259219005	0.631733028	-5.347714791
Cervonoyl ethanolamide	0.051008201	13.58071585	1.128717741	0.260324479	0.633025662	-5.350482113
Canthiumine	0.076256728	13.58876681	1.127926773	0.260657626	0.633025662	-5.351313226
Clerodendrin A	0.060235751	13.59795747	1.124115389	0.262267104	0.635826684	-5.355309997
Sulfaphenazole	-0.061688631	19.9732112	-1.121661536	0.263306973	0.636254494	-5.357876141
Fosfomycin	-0.222861242	12.49202189	-	0.2637834	0.636254494	-

			1.120539409	51		5.359047773
3-Hydroxymyristate	0.064143626	13.12497975	1.120306594	0.263882384	0.636254494	-5.359290714
2''-(E)-Feruloyl-3-(arabinosylxylose); 12-Hydroxynevirapine glucuronide	0.04558404	14.00018563	1.119377108	0.264277619	0.636254494	-5.360260131
5''-xanthylate(2-)	-0.032670231	13.51076871	-1.11832454	0.264725686	0.636254494	-5.361356959
Methicillin sodium	0.100975849	14.37629248	1.114937434	0.26617112	0.638627438	-5.364879575
Omeprazole	0.173161109	14.42480103	1.11117734	0.267782124	0.640799941	-5.368777747
Glutamylthreonine	-0.06273519	17.80463578	-1.11067942	0.267995958	0.640799941	-5.36929296

			8			8
Sulfapyridine	-0.110186171	13.52021108	-1.107995896	0.269150468	0.641557447	-5.372065866
2-Oxo-4-phosphonobutanoate	0.038091374	13.12199848	1.107803858	0.269233218	0.641557447	-5.372264045
Riccionidin A	-0.032195605	17.0256228	-1.105329757	0.270300896	0.643002472	-5.37481423
Indole-3-acetate	0.058793265	13.89488004	1.102727216	0.271427153	0.643543952	-5.377490731
O-methoxycatechol-O-sulphate	-0.127019222	16.52980087	-1.102553972	0.271502239	0.643543952	-5.377668676
Tyramine-O-sulfate	-0.063016971	17.9207444	-1.100545288	0.272373888	0.643543952	-5.379729862

(R)-Skyrin 2-xyloside	0.031484326	13.66691092	1.100542409	0.2723751 3	0.643543952	-5.379732814
Annuionone B	0.090647285	12.99491453	1.096994489	0.2739194 14	0.646097569	-5.383364391
2-C-Methyl-D-erythritol 2,4-cyclodiphosphate	0.045679241	13.43378387	1.093128625	0.2756089 37	0.646753919	-5.387308222
Tryptophan	0.05805872	17.10685457	1.092822462	0.2757430 47	0.646753919	-5.387619972
Tromethamine	-0.028735166	11.72444956	-1.092594215	0.2758430 56	0.646753919	-5.387852328
Cilazapril	0.044685387	13.09339981	1.092114107	0.2760535 02	0.646753919	-5.388340923
Nicotinurate	0.070225658	13.46882305	1.08565850	0.2788939	0.65231226	-

			2	07		5.394890041
Hydroxidodioxidosulfidosulfate	0.059470941	13.12063146	1.080422995	0.281212138	0.655860382	-5.400173218
Osmanthuside A	0.048385951	13.01361666	1.080003514	0.281398449	0.655860382	-5.400595426
[2-hydroxy-6-methoxy-4-(prop-2-en-1-yl)phenyl]oxidanesulfonic acid	0.086752753	14.13061216	1.07904978	0.281822359	0.655860382	-5.40155476
Musabalbisiane A	0.026870208	13.03585823	1.076509485	0.282953583	0.65648626	-5.404105881
Corchoroside A	-0.028286649	13.52794705	-1.075915551	0.283218515	0.65648626	-5.404701489
Thiobenzamide S-oxide	0.052876048	11.88942877	1.075275721	0.283504109	0.65648626	-5.405342759

UDP-3-O-(3-hydroxytetradecanoyl)-D-glucosamine	-0.066975248	14.13054371	-1.07329017	0.28439163	0.657449307	-5.40733038
Prostaglandin E2	-0.081480732	15.15396423	-1.067529696	0.2869772 1	0.659645979	-5.413076314
1-Palmitoyl-2-(5-hydroxy-8-oxo-6-octenedioyl)-sn-glycero-3-phosphatidylcholine	-0.033422114	13.0738176	-1.064648768	0.288276288	0.659645979	-5.415938506
4-Demethylsimmondsin 2"-(E)-ferulate	-0.065665417	13.4505651	-1.064070182	0.288537667	0.659645979	-5.416512407
Oenanthic ether	-0.027739127	14.28088583	-1.06393459	0.288598944	0.659645979	-5.416646857
2-Quinolinecarboxylic acid	0.039205673	13.24781759	1.063672185	0.288717557	0.659645979	-5.416907003
Tetrahydroaldosterone-3-glucuronide	0.098546491	15.36182924	1.063217284	0.288923261	0.659645979	-5.41735783

						8
Carpipramine maleate	0.039327639	14.00032041	1.061708303	0.289606325	0.659645979	-5.418851965
Edetic Acid	-0.064315871	22.77525126	-1.061378286	0.289755858	0.659645979	-5.419178453
Verbasoside	0.064279992	12.88397153	1.061206269	0.289833821	0.659645979	-5.419348592
(±)-3-Hydroxynonanoic acid	-0.044632806	13.76815876	-1.060676809	0.290073877	0.659645979	-5.419872098
Tazobactam	-0.233088985	15.45218046	-1.058219517	0.291189771	0.661105116	-5.422298377
11beta,20-Dihydroxy-3-oxopregn-4-en-21-oic acid	0.070054369	13.62397102	1.056933872	0.291774759	0.661356121	-5.423565582
1-Hydroxyepiacorone	0.054235601	12.71615381	1.05466760	0.2928078	0.662620437	-

			1	83		5.425795634
Propenoic acid C3:1	-0.044643779	15.34975377	-1.050097106	0.2948989 5	0.666270885	-5.430278692
Dehydrocarnitine	-0.04872211	12.75013607	-1.048137524	0.2957985 66	0.667222008	-5.432194891
3,4-Dimethyl-5-pentyl-2-furanundecanoic acid	-0.058349717	14.82011925	-1.043530983	0.2979206 45	0.670368581	-5.436685507
Cefotiam	0.052273319	12.98325663	1.042047621	0.2986061 55	0.670368581	-5.438127377
2,4-Di-tert-butylphenol	-0.031674988	13.10947791	-1.041003866	0.2990891 45	0.670368581	-5.439140721
(3beta,17alpha,23S,24S)-17,23-Epoxy-3,24,29-trihydroxy-27-norlanost-8-en-15...	-0.05110182	14.0204077	-1.04094345	0.2991171 15	0.670368581	-5.43919934

			6			
2-Hydroxy-imipramine glucuronide	0.094783804	13.27058805	1.036504092	0.301177387	0.673902532	-5.443497891
Mycophenolic acid	0.055482951	12.90873353	1.033839933	0.302418361	0.675594865	-5.446068822
24,25-Dihydroxyvitamin D	-0.048945353	14.62965832	-1.031395185	0.303560144	0.675780751	-5.448422262
Teleocidin B-1	0.101908113	14.09619814	1.03119598	0.303653307	0.675780751	-5.448613784
1-Octanal	0.045004496	11.85397699	1.030549233	0.303955904	0.675780751	-5.449235335
Cyclohexaneundecanoic acid	0.073352484	16.52464055	1.029374238	0.304506173	0.675926123	-5.450363568

Humilixanthin	0.096406469	12.97879014	1.028135618	0.305086959	0.676138666	-5.451551516
Aciclovir	-0.064099651	15.59363214	-1.027097992	0.305574068	0.676143256	-5.452545603
Sultamicillin tosilate	0.061117089	14.6182773	1.023879322	0.307088365	0.677682558	-5.455622901
Caffeic acid 3-sulfate	0.05548295	13.84229026	1.022906743	0.30754692	0.677682558	-5.456550882
Monomethyl sulfate	0.040857517	12.54433951	1.022214262	0.307873691	0.677682558	-5.457211077
Hydantoin-5-propionic acid	0.067753408	13.98986123	1.020939297	0.308475934	0.677682558	-5.458425442
[6]-Gingerdiol 3,5-diacetate	0.056599341	13.65015784	1.02046441	0.3087004	0.677682558	-

			8	48		5.458877367
Aromatic aldehyde	-0.051367236	12.16984908	-1.016059645	0.310788131	0.677829997	-5.463059311
Gravacridonetriol glucoside	-0.170800252	13.75273065	-1.015770201	0.310925643	0.677829997	-5.463333486
Licoricesaponin E2	-0.046113482	14.17415408	-1.015525242	0.311042053	0.677829997	-5.463565462
4,4',6,6'-Tetranitro-2,2'-azoxytoluene	0.031355065	12.87119261	1.015060842	0.311262825	0.677829997	-5.464005097
(5-{8-[5,7-dihydroxy-2-(4-hydroxyphenyl)-4-oxo-3,4-dihydro-2H-1-benzopyran-...	-0.034092091	14.34159536	-1.014824078	0.311375442	0.677829997	-5.464229159
Resveratrol 4''-(6-galloylglucoside)	0.029165992	13.86401466	1.014173186	0.311685099	0.677829997	-5.464844864

						4
3-Oxooctadecanoic acid	0.059062267	17.05809417	1.009521818	0.313904056	0.681502035	-5.469233402
Eicosadienoic acid	-0.069014786	16.59713281	-1.008586805	0.314351369	0.681502035	-5.470113172
Ethyl tiglate	0.051800432	13.44951735	1.005508031	0.315827246	0.683065811	-5.473004341
Cholesterol sulfate	-0.085945957	17.83041823	-1.005038582	0.316052689	0.683065811	-5.473444416
Actinonin	0.071040909	12.59241304	1.003906469	0.316596799	0.683182566	-5.474504854
p-Cresol sulfate	-0.168962031	20.67444325	-1.000286157	0.318340927	0.68588447	-5.47788802

Piperacillin	-0.277286182	16.52436764	-0.998202643	0.319347553	0.686991496	-5.479829572
Toluene	0.034324095	12.05482429	0.995529385	0.320642177	0.687180976	-5.482314816
Lipoyl-AMP	-0.031916688	13.26590671	-0.994984072	0.320906688	0.687180976	-5.482820965
Magnoloside C	-0.02458764	13.58394577	-0.994967969	0.320914502	0.687180976	-5.482835909
Linocinnamarin	0.049311619	13.29755338	0.992138089	0.322289502	0.688023101	-5.485458104
Maslinic acid	-0.060258647	14.65078505	-0.992127003	0.322294896	0.688023101	-5.485468362
Gemfibrozil	0.052810702	12.38389873	0.99075745	0.3229617	0.688392443	-

			8	34		5.486734727
Oxoglutarate; Di-2-propenyl disulfide, 9CI	0.046486986	12.99469798	0.982428786	0.327036507	0.696013573	-5.49439864
Quercetin 4'',7-diglucoside	0.02814024	13.553944	0.977502649	0.329462361	0.699577584	-5.498901446
Pyrogallic acid	-0.030211035	14.33246851	-0.976115344	0.330147647	0.699577584	-5.500165488
{1-[5-hydroxy-8-(2-hydroxypropan-2-yl)-2-oxo-2H,8H,9H-furo[2,3-h]chromen-4-...	-0.041675254	15.07264347	-0.975975697	0.330216679	0.699577584	-5.500292628
1-Acetoxy-2-hydroxy-16-heptadecen-4-one	0.045620047	14.17915036	0.967921101	0.334214293	0.706972267	-5.507595399
Pyridoxal	-0.112414994	15.4397493	-0.966545929	0.334899939	0.707008381	-5.508836221

(Ac)2-L-Lys-D-Ala	0.050826048	12.66450165	0.965344117	0.335499897	0.707008381	-5.509919189
Urate	-0.050301246	21.05973125	-0.96483772	0.335752904	0.707008381	-5.51037511
4-Methyl-2-oxopentanoate	0.045569748	16.18163018	0.962132799	0.33710644	0.70833862	-5.512806402
Quinalphos	0.093857513	14.51450617	0.961545293	0.337400892	0.70833862	-5.513333582
Piperazine citrate	-0.026798528	13.46621216	-0.956525108	0.339923753	0.709928301	-5.517825281
Oxalosuccinic acid	-0.130342179	16.72121712	-0.955543924	0.340418259	0.709928301	-5.518700453
Maltitol	-0.077003237	13.05088863	-0.95362007	0.341389207	0.709928301	-5.52041385

			5			6
5a-Cholesta-8,24-dien-3-one	-0.047424895	12.87403918	-0.953342348	0.34152952	0.709928301	-5.520660921
p-Toluenesulfonic acid	0.085972081	15.22271583	0.953326193	0.341537683	0.709928301	-5.52067529
6,8a-Seco-6,8a-deoxy-5-oxoavermectin "2b" aglycone	-0.030320463	13.48996356	-0.951714497	0.342352691	0.709928301	-5.522107615
Phosphoserine	0.051451822	13.12534368	0.951334283	0.342545142	0.709928301	-5.522445164
1-(11Z,14Z-eicosadienoyl)-glycero-3-phosphate	0.043570555	13.79178785	0.951128497	0.342649333	0.709928301	-5.522627802
N-Undecylbenzenesulfonic acid	0.063943246	16.00062524	0.949981598	0.343230386	0.709928301	-5.523644976
Amino-dideoxy-hexose	0.08849364	12.6614839	0.94975802	0.3433437	0.709928301	-

			7	28		5.523843117
Ribitol	0.114334632	15.17639574	0.948094724	0.344187713	0.709928301	-5.52531578
11-O-Demethylpradimicinone II	-0.079751876	13.57865153	-0.947646843	0.344415203	0.709928301	-5.52571189
Rifamycin S	-0.026222887	13.73572289	-0.946931652	0.344778666	0.709928301	-5.526344026
Salicyluric acid	0.11772517	14.61472214	0.945072837	0.345724474	0.710203072	-5.527984768
C.I. Food Brown 3	-0.022861981	13.90868967	-0.944420467	0.34605681	0.710203072	-5.528559845
Avocadene	0.042537773	14.0486794	0.942562593	0.347004386	0.710203072	-5.530195444

Corchorifatty acid F	0.044741772	14.61656984	0.941773049	0.347407583	0.710203072	-5.53088956
Dodecanoic acid (FA12:0)	0.059993348	16.51231036	0.941610714	0.34749052	0.710203072	-5.531032203
4-Sulfobenzoate	-0.035624071	12.97832795	-0.940674775	0.347968937	0.710203072	-5.531854134
Tuliposide B; Edetic Acid	-0.053360035	17.41603746	-0.936633107	0.350039731	0.713385065	-5.53539418
1-(beta-D-Ribofuranosyl)-1,4-dihydronicotinamide	-0.088789466	15.02907556	-0.934807376	0.350977742	0.713685904	-5.536988362
Quinic acid	0.049149315	15.276558	0.934353296	0.351211284	0.713685904	-5.537384374
Indan-1-ol	-0.112960533	13.45721885	-0.93270281	0.352060995	0.714371219	-5.53882218

			7			4
trans-Zeatin riboside diphosphate	0.050782694	13.61649561	0.930420507	0.353238148	0.715441716	-5.540806262
1-Cyclohexyl-11-heneicosanone	-0.023010472	12.70958054	-0.928671828	0.354141763	0.715441716	-5.542323178
13-Dihydrocarminomycin	-0.041482507	12.97478787	-0.928671743	0.354141807	0.715441716	-5.542323252
n-Decanohydroxamic acid	-0.07206559	12.28519784	-0.927538486	0.354728192	0.715441716	-5.543304801
Tyramine glucuronide	0.068675778	13.73154716	0.926456818	0.35528846	0.715441716	-5.54424056
Ubiquinone-2	0.031666255	13.21295397	0.925724797	0.355667941	0.715441716	-5.544873223
Glyceric acid 1,3-biphosphate	0.028785533	12.2079611	0.92266611	0.3572563	0.717601375	-

			5	51		5.547511382
Pyrrole-2-carboxylic acid	0.042505303	13.01719424	0.919307808	0.359005535	0.719576995	-5.550398004
Carboxytolbutamide	-0.107450956	13.67421525	-0.918796547	0.359272302	0.719576995	-5.550836541
(-)-trans-Carveol	-0.052439003	13.14842765	-0.914769941	0.361377694	0.720988472	-5.554281937
1-(Methylthio)propyl propyl disulfide	0.055467371	13.78527611	0.91471421	0.361406888	0.720988472	-5.554329519
Ethosuximide	-0.137518351	12.76894086	-0.914481798	0.361528653	0.720988472	-5.554527913
Quercetin 3-arabinoside 7-glucoside	0.054131355	14.55396721	0.910239988	0.363755565	0.722949242	-5.55814009

						2
Octadecanedioic acid	0.062253044	15.88757588	0.909958402	0.3639037	0.722949242	-5.558379292
Leukotriene B4	-0.104508055	15.42923169	-0.909646751	0.364067696	0.722949242	-5.558643945
Lactosamine	0.049916528	13.04269445	0.908306419	0.364773532	0.723320488	-5.559781128
Androstenol	-0.066254907	13.05091519	-0.906926062	0.365501345	0.723734196	-5.560950531
Gentisic acid	-0.047272704	14.16606283	-0.905297258	0.366361329	0.724408074	-5.562328144
Isoliensinine	-0.041723489	12.96766305	-0.904312394	0.366881938	0.724409946	-5.563159933

Roxburghine B	-0.032848637	13.46802227	-0.900449497	0.368928387	0.727420328	-5.566413763
erythro-3-Hydroxy-Ls-aspartate; Dihydro-4,6-dimethyl-4H-1,3,5-dithiazine	0.049883357	11.89651002	0.898892293	0.369755367	0.72802116	-5.567721534
Gentamicin C1a	0.055404606	13.55938531	0.894386662	0.372154688	0.730694651	-5.57149281
Dihydrozeatin riboside monophosphate; Tolmetin glucuronide	-0.066175097	12.9505223	-0.894012045	0.372354614	0.730694651	-5.571805524
Arabinopyranobiose	0.045057251	14.47670794	0.890813327	0.374064443	0.730694651	-5.574470378
Tricin 7-[rhamnosyl-(1->2)-galacturonide]	-0.071472015	14.65495763	-0.889709957	0.374655366	0.730694651	-5.575387399
Delta-Hexanolactone	-0.028201142	13.01713519	-0.88945544	0.374791758	0.730694651	-5.57559877

Viguiestenin	0.060119773	14.34372885	0.889024187	0.375022931	0.730694651	-5.57595678
Uracil	0.06148454	14.07662241	0.888921938	0.375077755	0.730694651	-5.576041638
Indole-5,6-quinone	0.032337276	13.3500498	0.888465133	0.375322744	0.730694651	-5.576420629
Diosmin	-0.022993543	14.07393852	-0.886118882	0.376582632	0.730694651	-5.578364168
3,4,5-Trimethoxycinnamic acid	0.148275188	16.34340922	0.884136618	0.377649112	0.730694651	-5.580002221
Paucin	-0.030395724	14.73418511	-0.881867391	0.378872288	0.730694651	-5.581872941
Sulfamethoxazole	0.148157197	15.57022706	0.881536043	0.379051099	0.730694651	-5.5821457

Amrinone	-0.055402539	12.96786247	-0.881419701	0.379113885	0.730694651	-5.582241447
Sulfolithocholic acid	-0.079884174	14.10076827	-0.881152946	0.379257891	0.730694651	-5.582460932
Metharbital	-0.05387991	13.08243078	-0.880782516	0.379457921	0.730694651	-5.582765612
Tetrahydrofurfuryl butyrate	-0.020829816	14.33149812	-0.880422104	0.379652604	0.730694651	-5.58306193
Formamidopyrimidine nucleoside triphosphate	-0.024540498	13.65487236	-0.879086983	0.380374331	0.730694651	-5.584158569
3,17-Androstanediol glucuronide	-0.03522245	13.5242714	-0.878765411	0.380548289	0.730694651	-5.584422455
Melatonin glucuronide	-0.084457037	13.23520353	-	0.3817623	0.732017562	-

			0.876523622	87		5.586259431
Homocitrulline	-0.051251374	13.6172069	-0.875215375	0.382472006	0.732034139	-5.587329289
2,2,7,7-Tetramethyl-1,6-dioxaspiro[4.4]nona-3,8-diene	-0.104693381	15.05703753	-0.874571976	0.382821297	0.732034139	-5.587854866
1-Cyano-2-hydroxy-3-butene	-0.023581008	12.16392313	-0.871667706	0.384400426	0.734046842	-5.590222522
5,6,7,8-Tetrahydroquinoxaline	-0.060284586	11.95502035	-0.869999928	0.385309054	0.734775406	-5.591578618
Hypogeic acid	0.075069129	20.11124407	0.86885778	0.385932073	0.734851111	-5.592505829
Cidofovir	0.039386501	13.76802856	0.86785834	0.386477756	0.734851111	-5.59331619

						6
Cyclodopa glucoside	0.091045135	14.4235972	0.867030307	0.386930212	0.734851111	-5.593986882
Ciceritol	-0.153544633	14.09964212	-0.865071169	0.388002024	0.735884111	-5.595571204
Undecanoic acid	0.024275958	12.90879228	0.861778379	0.389807556	0.738303984	-5.598226018
Wybutoxine	-0.100338003	13.70379591	-0.859313721	0.39116236	0.739223068	-5.600206574
N1,N8-Diacetylspermidine; 3-[[5-Methyl-2-(1-methylethyl)cyclohexyl]oxy]-1,2...	-0.032331921	12.73493444	-0.858966622	0.391353389	0.739223068	-5.600485044
3b,12a-Dihydroxy-5a-cholanoic acid	-0.044076784	16.94586714	-0.857981953	0.391895621	0.739245596	-5.601274417

Catheduline E2	-0.036814746	13.91757614	-0.855897482	0.393044998	0.740411793	-5.602942495
Delphinidin 3-sambubioside	-0.049168569	13.91057831	-0.850465034	0.396050103	0.744220034	-5.607270837
2-(3,4-dihydroxyphenyl)-8-[1-(2,4-dihydroxyphenyl)-3-(3,4-dihydroxyphenyl)-...	-0.024030475	13.6441718	-0.850313124	0.396134336	0.744220034	-5.607391479
Carinol	0.031135769	14.13301752	0.84706772	0.397936503	0.746234833	-5.609963769
Sulpiride	0.035442304	12.86431404	0.845614186	0.398745258	0.746234833	-5.611112665
Maleamic acid	0.031708651	12.75392412	0.845095197	0.399034268	0.746234833	-5.611522409
Dihydrothymine	0.051831415	16.40569572	0.84453197	0.3993480	0.746234833	-

			7	52		5.611966789
delta-Guanidinovaleric acid; 8-Hydroxyoctanoate	-0.025703527	12.39217877	-0.841950887	0.400787957	0.747922908	-5.613999508
2-Carboxy-4-dodecanolide	0.04475538	13.92714769	0.839709358	0.402040978	0.749258186	-5.615759798
5''-O-Desmethyl omeprazole	-0.228349549	16.7323049	-0.837253395	0.403416582	0.75046486	-5.617683136
Aniline	0.083773095	12.68716554	0.836631841	0.403765168	0.75046486	-5.618169006
D-Limonene	0.029234087	11.63453338	0.835042965	0.404657085	0.750973507	-5.619409406
Piroxicam	-0.028648193	15.15062647	-0.83422579	0.405116268	0.750973507	-5.62004644

			1			4
4-hydroxy-3-(sulfooxy)benzoic acid	0.045854299	12.53633771	0.832907788	0.405857535	0.751293364	-5.621072605
GDP-alpha-D-mannose(2-)	0.034914499	13.98199002	0.831281955	0.406773055	0.751293364	-5.622336214
Cuscohygrine	0.035155887	13.02144659	0.831046648	0.40690566	0.751293364	-5.622518893
Aspartyl-Tryptophan	0.070662068	12.79804869	0.828274694	0.408469734	0.75318361	-5.624667018
5-Amino-4-hydroxy-3-(phenylazo)-2,7-naphthalenedisulfonic acid	-0.024300287	13.71567908	-0.824025294	0.410874446	0.755822637	-5.627946254
2-Hydroxyacetaminophen sulfate	-0.131140468	16.96897408	-0.823829698	0.410985336	0.755822637	-5.628096791

4beta-(2-Aminoethylthio)epicatechin 3-gallate	0.153564189	16.44413729	0.821553435	0.412277145	0.756898662	-5.629846067
Methyl 3,4-dihydroxy-5-prenylbenzoate 3-glucoside	0.053443013	14.29371504	0.820886017	0.412656372	0.756898662	-5.630358057
Nb-trans-p-Coumaroylserotonin glucoside	0.026812493	13.86976147	0.816511866	0.415146919	0.760466235	-5.633703329
8-8''-Dehydrodiferulic acid	0.056987073	12.68461338	0.806544707	0.420855317	0.768938733	-5.641259722
Aprobarbital	-0.026395734	14.05637326	-0.80412379	0.4222488	0.768938733	-5.643081175
5-Guanidino-3-methyl-2-oxopentanoate	-0.063151307	12.83560042	-0.803876836	0.4223911	0.768938733	-5.643266673
C22:6	-0.065953729	17.61533323	-	0.4225867	0.768938733	-

			0.803537389	43		5.643521554
Koeniginequinone B	-0.086358991	14.90444525	-0.802821394	0.422999587	0.768938733	-5.644058823
Hygromycin A	-0.046860688	12.79919318	-0.802358047	0.42326688	0.768938733	-5.644406257
3,4,5-trihydroxy-6-{[2-oxo-6-(3-oxobutyl)-2H-chromen-7-yl]oxy}oxane-2-carbo...	-0.050778885	12.92001102	-0.801722989	0.423633391	0.768938733	-5.644882122
Glycyl-Phenylalanine	0.060335356	13.32324754	0.795620776	0.427164682	0.773943009	-5.649435582
Sulfasalazine	-0.048166527	14.17634778	-0.795041496	0.427500801	0.773943009	-5.649866043
5-Sulfosalicylic acid	0.09353519	13.9050584	0.793173855	0.428558533	0.774900426	-5.651251766

						1
2-Heptanethiol	0.033204702	15.71194912	0.79122125	0.429721328	0.775897596	-5.652697057
Ethyl cinnamate	-0.06818118	14.07685737	-0.789287012	0.430848178	0.775897596	-5.654125268
N-[2-(3,4-dimethoxyphenyl)ethyl]-3-[4-methoxy-3-(sulfooxy)phenyl]prop-2-eni...	0.04281268	12.99272165	0.788988534	0.431022219	0.775897596	-5.65434535
1-Palmitoyl-2-(5-keto-6-octendioyl)-sn-glycero-3-phosphatidylcholine	-0.026671671	13.32043432	-0.786257905	0.432616341	0.775897596	-5.656354934
10-Undecenyl acetate	0.030058002	13.03845651	0.786196665	0.432652131	0.775897596	-5.656399924
Mycotoxin T 2	0.029842149	12.78885083	0.783882961	0.434005608	0.775897596	-5.658097126
Acetyl-Leu	-0.04472332	13.1830287	-	0.4340246	0.775897596	-

			0.783850451	43		5.658120938
Dihydrolipoate	0.046370751	13.67108335	0.783792275	0.434058708	0.775897596	-5.658163546
L-N-(1H-Indol-3-ylacetyl)glutamic acid	0.027105106	13.26135798	0.783642471	0.434146431	0.775897596	-5.65827325
Cyanidin 3-glucogalactoside	-0.020411695	13.39543867	-0.782390063	0.434880234	0.776070583	-5.659189593
Cholylglycine	0.100091228	15.6845018	0.781272549	0.435535608	0.776070583	-5.660006009
3,5-Didecanoylpyridine	-0.024730266	12.30463851	-0.779741053	0.436434697	0.776070583	-5.661122981
Polyethylene, oxidized	0.04922858	13.82360467	0.77921217	0.436745436	0.776070583	-5.661508208

3-Methyl-3-butenyl apiosyl-(1->6)-glucoside	-0.046525057	13.37859513	-0.777875834	0.437531157	0.776070583	-5.662480407
C9:2	-0.048252586	12.8186517	-0.777786762	0.437583557	0.776070583	-5.662545149
Pentanoic acid	-0.033500024	13.13225969	-0.77395675	0.439840166	0.779081564	-5.665322023
C6:2	0.02644552	12.70577462	0.768668646	0.442966898	0.782335467	-5.669133666
FMLP	0.021823257	13.01888202	0.768433814	0.443106044	0.782335467	-5.66930233
Tsugarioside B	-0.022627129	13.20461142	-0.768003907	0.443360846	0.782335467	-5.669610969
Eicosapentaenoic acid	-0.066153	15.890985	-0.76552073	0.444834245	0.783943031	-5.67139033

			5			4
Pentose; Diisopropyl disulfide	0.044131527	15.74399432	0.761516041	0.447216361	0.785409202	-5.674247907
Arginine	-0.036717891	15.853689	-0.761457188	0.447251423	0.785409202	-5.674289791
N-Undecanoylglycine	0.033135614	13.65959037	0.759503668	0.448416136	0.785409202	-5.675678224
Tryptophanamide	0.030433966	13.43049858	0.759122343	0.448643689	0.785409202	-5.675948831
Acaciabiuronic acid	0.04441662	14.33069043	0.757251676	0.449760952	0.785409202	-5.677274391
Methyl-[10]-shogaol	0.06513336	13.79788977	0.756561754	0.450173411	0.785409202	-5.677762451

{3-[2-(3,4-dihydroxy-5-methoxyphenyl)ethyl]phenyl}oxidanesulfonic acid	-0.025345873	13.66811147	-0.756398352	0.4502711 3	0.785409202	-5.677877979
Rofecoxib	-0.029718798	19.39400052	-0.755914197	0.4505607 39	0.785409202	-5.678220139
Glycyrrhizin	-0.057492285	14.23100241	-0.75561964	0.4507369 88	0.785409202	-5.678428201
Cyclohexenone	-0.019163315	12.53491938	-0.754444142	0.4514407 4	0.785653423	-5.679257716
DNDS	0.032824971	13.56098627	0.75184849	0.4529969 32	0.786459938	-5.681084847
2-Hydroxy-6-pentadecylbenzoic acid	0.042973522	13.54591941	0.751224543	0.4533714 66	0.786459938	-5.681523122
Dihydroergotamine	0.029605577	13.54016264	0.75076580	0.4536469	0.786459938	-

			8	41		5.681845117
Geldanamycin	0.051849261	13.57566145	0.749569485	0.454365794	0.786459938	-5.682683922
Androstenedione	0.033437961	13.89784379	0.748972019	0.454725043	0.786459938	-5.683102337
Tyrosol 4-sulfate	-0.036496969	14.7656571	-0.74635457	0.456300787	0.787202476	-5.684931475
Labetalol	0.029308472	13.84080577	0.744570436	0.457376632	0.787202476	-5.686174623
Tiocarbazil	0.041706163	13.4661354	0.74399345	0.457724866	0.787202476	-5.686576022
24-Hydroxycalcitriol	-0.032965278	14.95436513	-0.74068840	0.459722476	0.787202476	-5.68886932

			1			3
2-Methyl-4-heptanone	0.027814695	11.73690724	0.740624854	0.459760933	0.787202476	-5.688913317
Propafenone	0.04806506	14.20905674	0.740420504	0.459884612	0.787202476	-5.689054766
2-amino-4-({1-[(carboxymethyl)-C-hydroxycarbonimidoyl]-2-({5,11-dihydroxy-1...	-0.033985794	13.31878858	-0.737530732	0.461635593	0.787202476	-5.691050877
L-2-Aminoethyl seryl phosphate	-0.045255694	13.82828096	-0.737338616	0.461752133	0.787202476	-5.691183306
[(6-{5,7-dihydroxy-4-oxo-6-[3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]-2-...	-0.0204221	13.9880901	-0.736106444	0.462499988	0.787202476	-5.692031848
Italidipyrone	-0.021903201	13.88353219	-0.735921094	0.462612534	0.787202476	-5.692159369

Dihydro-5-(2-octenyl)-2(3H)-furanone	0.022569287	13.68874851	0.73122992	0.465466376	0.787202476	-5.69537625
Androsterone glucuronide	-0.046407612	14.44180015	-0.730443658	0.465945655	0.787202476	-5.695913412
Sebacic acid	0.04978985	14.64211496	0.729133035	0.466745181	0.787202476	-5.696807533
Diplosporin	-0.127064021	16.02084823	-0.727606468	0.467677406	0.787202476	-5.697846958
Kansuinine B	0.022000078	13.55006487	0.726917435	0.468098515	0.787202476	-5.698315405
1-Arachidonoylglycerophosphoinositol	0.040016444	15.45748134	0.726781408	0.468181675	0.787202476	-5.698407833
Benzothiazole	0.089327022	12.88054249	0.726295905	0.468478552	0.787202476	-5.69873758

						1
Erucic acid	0.043282838	14.74983664	0.72621377	0.468528787	0.787202476	-5.698793344
ADP	0.022468773	13.42039952	0.723944812	0.46991769	0.787202476	-5.700331316
Petunidin 3-rutinoside	0.028588872	13.18512659	0.722421843	0.470851233	0.787202476	-5.701360948
Leonuridine	0.033988692	13.18627626	0.721925001	0.471156008	0.787202476	-5.701696381
Oxobutanoic acid	-0.034643289	15.61693017	-0.721658666	0.47131943	0.787202476	-5.701876097
Dihydrodioscorine	0.073801107	12.87289702	0.721233627	0.471580296	0.787202476	-5.702162766

NIK250	-0.030362204	13.10678795	-0.719817844	0.472449807	0.787202476	-5.703116435
{4-[(E)-2-{3,5-dihydroxy-4-[(1E)-3-methylbut-1-en-1-yl]phenyl}ethenyl]pheny...	0.044148871	13.49172974	0.719710342	0.472515866	0.787202476	-5.703188771
Avenanthramide 1c	0.041931091	13.17697734	0.719053171	0.472919805	0.787202476	-5.703630741
Pyrroline carboxylic acid	-0.031715149	13.22433542	-0.71785834	0.473654713	0.787202476	-5.704433277
Pseudooxynicotine	-0.06276619	12.94075144	-0.717419116	0.473925027	0.787202476	-5.704727958
Formyl-Asp; Erucin	-0.031918511	12.15304681	-0.71672207	0.474354188	0.787202476	-5.705195247
2-(4-Methyl-5-thiazolyl)ethyl formate	-0.052829183	12.35534045	-	0.4744913	0.787202476	-

			0.716499299	91		5.705344494
Sulfoglycolithocholate(2-)	0.075226285	14.71194784	0.716476417	0.474505485	0.787202476	-5.705359821
4-Hydroxydebrisoquine	-0.028613875	12.59320668	-0.716408313	0.474547434	0.787202476	-5.705405437
Dehydroepiandrosterone sulfate	-0.039953812	17.98178091	-0.715254328	0.475258556	0.787202476	-5.706177721
11,12-Dihydrolactaroviolin	-0.024038866	12.90003545	-0.714907512	0.475472395	0.787202476	-5.70640958
C14:5	-0.062418534	13.91430984	-0.714023504	0.476017685	0.787202476	-5.707000064
Integerressine	-0.043393927	13.43982246	-0.71306170	0.476611353	0.787202476	-5.70764168

			1			6
Epitheaflavic acid 3''-gallate	-0.029227226	14.78859099	-0.712959021	0.476674756	0.787202476	-5.707710133
Guaifenesin	-0.065057601	14.20780909	-0.711147568	0.477794058	0.787202476	-5.708916052
Glucocaffeic acid	0.077585879	13.06144875	0.711117325	0.477812758	0.787202476	-5.708936159
PS(18:0/24:0)	-0.029548675	14.82085958	-0.710522291	0.478180754	0.787202476	-5.709331602
Carbamate	-0.021108637	10.60256728	-0.710083223	0.478452394	0.787202476	-5.709623183
LysoPC(10:0)	0.030585023	13.57824909	0.709405107	0.478872094	0.787202476	-5.710073161

UDP-2-acetamido-2-deoxy-alpha-D-ribo-hex-3-uluronate	0.02116011	14.02091057	0.708174979	0.479633962	0.7875262	-5.710888347
Methylthiouracil	-0.037406954	12.09558691	-0.702657389	0.483059408	0.790999138	-5.714527448
(2R,3R,4R)-2-Amino-4-hydroxy-3-methylpentanoic acid	-0.024637278	14.42355965	-0.702177677	0.483357855	0.790999138	-5.714842502
C22:0	0.040428871	14.90590384	0.700705545	0.484274354	0.790999138	-5.715807996
Koenoline	-0.032346187	14.7222223	-0.700385277	0.484473868	0.790999138	-5.716017777
Proparacaine	0.049392052	13.91667616	0.699119026	0.485263128	0.790999138	-5.716846256
(R)-3-Hydroxy-hexadecanoic acid	-0.031784378	16.2474042	-	0.4856270	0.790999138	-

			0.69853557 8	3		5.71722749
2,3,5-Trimethylfuran	-0.018578196	12.29496992	-0.69717666 8	0.4864751 7	0.790999138	-5.71811419 5
Dimethylsulfonioacetate	-0.016719868	11.41102497	-0.69672474 1	0.4867574 12	0.790999138	-5.71840870 3
Levetiracetam	-0.0999659	12.65383876	-0.69656691 8	0.4868559 97	0.790999138	-5.71851150 6
Nitrosobenzene	-0.027349858	11.48676224	-0.69469178 4	0.4880281 53	0.791561951	-5.71973117 1
5,6-Epoxy-8,11,14-eicosatrienoic acid	-0.088349785	15.37565694	-0.69419639 9	0.4883380 76	0.791561951	-5.72005284 3
1-(alpha-Methyl-4-(2-methylpropyl)benzeneacetate)-beta-D-Glucopyranuronic acid	0.040532325	13.06920875	0.69138782 7	0.4900971 97	0.7934907	-5.72187223

						9
3-(Acetylthio)-2-methylfuran	-0.024553664	12.70945213	-0.689414395	0.491335288	0.79457238	-5.72314624
5-Sulfoxymethylfurfural	-0.055126163	14.3977708	-0.688359018	0.491998103	0.794722313	-5.72382608
Ketovaline	-0.025454859	14.05921754	-0.686781394	0.492989809	0.795314986	-5.724840401
TG(15:0/18:1(9Z)/16:1(9Z))	0.025971764	13.92557059	0.685960794	0.493506071	0.795314986	-5.725367084
Avocadienofuran	-0.028366037	12.7824543	-0.683220622	0.495232096	0.797174991	-5.727121258
Fasciculic acid A	0.044443136	13.53768619	0.681253008	0.496473491	0.798251495	-5.728376555

1,2-Dihydroxynaphthalene-6-sulfonate	0.030309774	12.42403931	0.678906934	0.497955843	0.799712495	-5.729868591
UDP-2-acetamido-4-dehydro-2,6-dideoxyglucose	-0.017983212	14.11042283	-0.677619997	0.498769992	0.800098239	-5.730684871
4-Hydroxyphenytoin glucuronide	0.056147227	12.9568093	0.675429337	0.500157498	0.800099397	-5.73207082
Glutaminylisoleucine	-0.025248736	13.78566882	-0.675247242	0.500272925	0.800099397	-5.732185824
2-oxo-3-(3,4,5-trihydroxyphenyl)propanoic acid	-0.060166558	13.0846155	-0.674488371	0.500754113	0.800099397	-5.732664763
Butynal	0.034296778	12.0839955	0.672139414	0.502245115	0.800099397	-5.73414384
Oxalic acid	-0.025867088	11.76344303	-0.671832378	0.502440181	0.800099397	-5.734336793

Hercynine	-0.039105067	13.1048436	-0.671779247	0.502473941	0.800099397	-5.734370174
Geranylacetone	0.03023794	12.1234231	0.671284388	0.502788443	0.800099397	-5.734680953
2,3,4,7,8,9,15,22,23,28-decahydroxy-14-(hydroxymethyl)-13,25,32,35-tetraoxa...	-0.043051816	17.16646583	-0.670324061	0.503399031	0.800157638	-5.735283403
2-Polyprenyl-3-methyl-5-hydroxy-6-methoxy-1,4-benzoquinone	-0.043295558	13.86820486	-0.668043947	0.504850363	0.800505597	-5.736710366
N-[(3a,5b,7b)-7-hydroxy-24-oxo-3-(sulfooxy)cholan-24-yl]-Glycine	0.084676858	15.03347922	0.667273034	0.505341565	0.800505597	-5.737191731
Thioacetic acid	0.054164748	12.71821381	0.666828725	0.505624778	0.800505597	-5.737468911
Methylgingerol	0.035488051	13.7020003	0.66637365	0.5059149	0.800505597	-

			1	44		5.737752615
2-Naphthol	0.049105449	12.95724861	0.664449447	0.507142829	0.801538666	-5.738950082
Hesperidin	0.021297882	13.52617104	0.66188992	0.508778571	0.802494632	-5.740537579
4-Coumaroylputrescine	0.031193304	12.73843461	0.660646793	0.509574032	0.802494632	-5.741306404
Annoglabasin F	0.041000732	13.87476737	0.659247255	0.510470363	0.802494632	-5.742170241
dUDP	-0.032342325	13.88666823	-0.658391982	0.511018528	0.802494632	-5.742697244
Daucic acid	0.040767862	16.0200739	0.658385492	0.511022689	0.802494632	-5.74270124

Mandelonitrile	0.035030992	13.50009927	0.657437612	0.511630574	0.802494632	-5.743284504
Tetrahydropentoxyline	0.028549316	13.91409859	0.656594049	0.512171879	0.802494632	-5.743802875
C22:4	-0.053507192	15.94682666	-0.654986299	0.513204385	0.802494632	-5.744789003
[3-(6-hydroxy-4-{5-[(E)-2-[6-hydroxy-3-(3-hydroxyphenyl)-2-(4-hydroxyphenyl...	-0.015282193	13.82673773	-0.654536437	0.513493485	0.802494632	-5.7450645
Indoxyl sulfate	-0.0912585	17.29685177	-0.653523892	0.514144499	0.802494632	-5.745683895
(3Z,6Z,9Z)-3,6,9-Dodecatrien-1-ol	-0.033194538	13.1147492	-0.653387827	0.514232015	0.802494632	-5.745767056
Dimethylurea	-0.024994949	12.14381396	-0.6515163	0.5154365	0.802494632	-

				56		5.746909158
5alpha-Androstan-3alpha,17beta-diol disulfate	0.035733651	13.20473917	0.650864964	0.515856111	0.802494632	-5.747305871
Hydroxybutanoic acid	-0.055597937	16.97670567	-0.650261159	0.516245207	0.802494632	-5.747673281
N-Ethylmaleimide	0.031045311	14.04543621	0.649495502	0.516738824	0.802494632	-5.74813869
Sinapyl alcohol	-0.03437522	14.97570876	-0.649154847	0.516958522	0.802494632	-5.748345583
Pemirolast	-0.018696996	13.48809768	-0.642831822	0.521045253	0.807938913	-5.752166185
DTDP-alpha-D-glucose(2-)	0.013653791	13.97371083	0.640636423	0.522468103	0.808621172	-5.753484016

Aminobutanoic acid (ABA)	0.032010436	15.05018644	0.640363091	0.522645392	0.808621172	-5.753647775
Procaine	-0.041607382	12.26453635	-0.637768461	0.524329871	0.810327982	-5.755198803
3-(2-Methylpropanoyloxy)-8-(2-methylbutanoyloxy)-9,10-epoxy-p-mentha-1,3,5-...	-0.018460649	13.97400871	-0.634502306	0.526454292	0.810772196	-5.757142344
Neosaxitoxin	0.052975448	15.55277379	0.63420105	0.526650462	0.810772196	-5.757321107
Pilosine	0.03322753	14.50249283	0.634022154	0.526766972	0.810772196	-5.757427222
4-O-(beta-L-Arabinofuranosyl-(1->2)-beta-L-arabinofuranosyl-(1->2)-beta-L-a...	0.020088236	13.2133255	0.633750735	0.526943766	0.810772196	-5.757588163
5-Hydroxy-2-furoic acid	-0.026444633	12.17005135	-	0.5315567	0.813543196	-

			0.626685099	98		5.761753651
Entacapone	0.085762005	13.60708711	0.62633178	0.531788015	0.813543196	-5.761960726
(-)-Nopol	-0.018555187	12.88890833	-0.625795583	0.532139006	0.813543196	-5.762274761
6-Methylquinoline	0.030117729	14.38249746	0.624955163	0.532689378	0.813543196	-5.762766432
Glycylproline	-0.029207624	14.75707977	-0.624646939	0.5328913	0.813543196	-5.762946588
trans-Piceid	0.052239886	13.50386112	0.624563018	0.532946284	0.813543196	-5.762995624
(Iso)Leucine	0.030351928	18.861692	0.624401819	0.533051909	0.813543196	-5.763089794

						6
Isothipendyl	0.025776669	14.68362584	0.623850033	0.533413544	0.813543196	-5.763411965
Allixin	-0.034543705	15.41572856	-0.621577394	0.534904325	0.813937177	-5.764735891
N-Formyl-norleucyl-leucyl-phenylalanyl-methylester	0.017728331	13.10975046	0.621217007	0.535140923	0.813937177	-5.764945393
Tobramycin	-0.028148641	13.53268873	-0.620179308	0.535822477	0.813937177	-5.765547956
C20:1	-0.044087405	17.4209855	-0.619897855	0.536007409	0.813937177	-5.765711215
Niazimicin A	0.040049136	13.69881609	0.613576553	0.540169417	0.818809791	-5.769358487

alpha-EMTBL	0.044247098	12.67004397	0.612850459	0.540648526	0.818809791	-5.769775046
Monoisobutyl phthalic acid	-0.055910938	14.46691688	-0.612086626	0.541152767	0.818809791	-5.770212724
1,9-Nonanedithiol	0.049196999	13.82803899	0.611461328	0.541565733	0.818809791	-5.770570617
Naringenin	-0.079142566	15.05199004	-0.607551788	0.544151283	0.819813542	-5.772800004
Oxidized dithiothreitol	0.036759029	12.85978048	0.607024605	0.544500405	0.819813542	-5.773099536
Alpha-Linolenic acid	0.054946362	18.85417128	0.606831528	0.544628297	0.819813542	-5.773209173
1-Isothiocyanato-2-phenylethane	-0.05974979	12.02899322	-	0.5449610	0.819813542	-

			0.60632933	16		5.773494178
2-Thiophenecarboxaldehyde	-0.018238882	12.04872031	-0.604958835	0.545869522	0.819813542	-5.774270759
Istamycin AO	-0.027107606	14.12805846	-0.603376887	0.54691914	0.819813542	-5.775164982
Cibulins	0.058153467	13.18734435	0.602774895	0.547318824	0.819813542	-5.775504655
OA-6129 C	-0.087774526	13.86123908	-0.602033265	0.547811419	0.819813542	-5.775922654
Cassitoroside	-0.018971967	13.54168195	-0.601998043	0.547834819	0.819813542	-5.775942494
LPA(0:0/16:0)	-0.027967501	15.51733045	-0.60133753	0.548273728	0.819813542	-5.77631431

			4			8
Acrolein	-0.027575724	11.99238457	-0.599902113	0.549228171	0.819813542	-5.777120967
Phenylbutazone	0.041023892	13.18628565	0.599550118	0.549462345	0.819813542	-5.777318481
7(14)-Bisabolene-2,3,10,11-tetrol	0.026546832	13.10747566	0.598930121	0.549874937	0.819813542	-5.777666096
Endoxifen O-glucuronide	0.068370336	14.43496721	0.59348988	0.553501855	0.823551694	-5.780700928
Pyrazinamide	0.030432841	12.81467922	0.593397117	0.5535638	0.823551694	-5.780752436
Penicillin G	-0.035456591	14.15106444	-0.59192285	0.554548753	0.824137486	-5.781569976

Galactose-beta-1,4-xylose	0.032039277	15.00839457	0.5901614	0.555726703	0.824482436	-5.782544112
9-Aminocamptothecin	-0.046318693	13.15197466	-0.589507821	0.556164089	0.824482436	-5.782904825
Phenytoin	0.042038854	12.68078336	0.588526931	0.556820834	0.824482436	-5.783445436
3,4-Dimethyl-5-pentyl-2-furantridecanoic acid	-0.034332742	14.35625546	-0.58804049	0.557146668	0.824482436	-5.783713202
Mecarbam	-0.024476065	13.12373571	-0.57803868	0.563866841	0.833542287	-5.789169883
N-Palmitoyl phenylalanine	0.02441044	12.54902726	0.575322295	0.565698738	0.834934665	-5.790635752
6-O-Glc-paromamine	-0.011629731	12.51526267	-	0.5660066	0.834934665	-

			0.574866145	42		5.790881233
7-Ketodeoxycholic acid	-0.033014482	14.7046482	-0.572786422	0.567411493	0.836122221	-5.791997998
Tartaric acid; 2-Methyl-2-(methyldithio)propanal	0.055763694	16.26088282	0.570886581	0.568696303	0.837130566	-5.793014645
C24:0	-0.026832893	14.8903605	-0.569990794	0.569302585	0.837139033	-5.793492832
1-Methyl-4-phenyl-1,2,3,6-tetrahydropyridine N-oxide	-0.032224622	13.50005419	-0.56854167	0.570284029	0.837698564	-5.794264816
Glycolate	-0.023408149	14.77807769	-0.567104708	0.571258039	0.838246007	-5.795028388
Euphornin	0.048868296	15.20771681	0.564103237	0.573295082	0.84035052	-5.79661709

						3
2-Octenedioic acid	0.02682868	14.07662661	0.563178104	0.573923651	0.840388203	-5.79710508
2,5-Diamino-6-(5-phospho-D-ribosylamino)pyrimidin-4(3H)-one; 5-[(6-carboxy-...	0.035513729	15.48434332	0.560597806	0.575678536	0.842073325	-5.798461911
Candesartan	0.030296433	14.88361011	0.558525874	0.577089522	0.842861308	-5.799546926
Etonogestrel	-0.023643514	13.19254336	-0.558031392	0.577426506	0.842861308	-5.79980528
2-Hydroxy-22-methyltetracosanoic acid	-0.021397176	13.71816397	-0.556552442	0.578434953	0.84345013	-5.800576635
Demethoxyegonol	0.059391035	13.82055831	0.554359942	0.579931479	0.843977369	-5.801716391
Tryptophyl-Valine	-0.057054432	12.88636589	-	0.5800074	0.843977369	-

			0.554248779	03		5.801774058
TG(15:0/20:0/o-18:0)	-0.018784439	13.82856517	-0.551256478	0.582052917	0.845203888	-5.803322037
Hexonic acid; 1,3-Dimethyluric acid	0.06275351	17.40375095	0.551241835	0.582062935	0.845203888	-5.803329592
Cavipetin C	0.016724163	13.7478101	0.550148181	0.582811401	0.845410087	-5.803893262
MK826	0.035611974	13.23805999	0.548148418	0.584181151	0.845701071	-5.804921056
Fumonisin FP2	-0.019520107	13.58285506	-0.548083932	0.584225345	0.845701071	-5.804954136
6-Keto-decanoylcarnitine	-0.032017588	13.33454616	-0.54689026	0.585043705	0.845752558	-5.80556578

			1			3
Torvanol A	-0.033709816	13.84491219	-0.545832793	0.585769134	0.845752558	-5.806106527
UDP-2,3-diacetamido-2,3-dideoxy-alpha-D-glucuronate	0.014225014	14.05185588	0.545378311	0.586081041	0.845752558	-5.806338609
Glycerol trihexanoate	-0.015083372	13.17905336	-0.544192927	0.586894923	0.846051213	-5.806943022
Mosinone A	-0.018113701	13.34946998	-0.542572965	0.588008038	0.846197393	-5.8077669
C16:4	-0.033709621	13.42328865	-0.542278637	0.588210383	0.846197393	-5.807916325
Capsianoside IV	0.020468558	13.44791825	0.540602252	0.589363486	0.846327684	-5.80876586
C4:0 (Butyric acid)	0.018180608	12.97078765	0.53979641	0.5899181	0.846327684	-

			1	57		5.809173299
L-Capreomycidine	0.029723991	12.86923426	0.539499892	0.590122316	0.846327684	-5.80932307
Cholate	-0.041825263	15.39775598	-0.537906361	0.591220055	0.847030582	-5.810126546
L-2-Amino-4-(hydroxymethylphosphinyl)butanoate	-0.031152895	12.9987595	-0.533859085	0.5940123 5	0.850157306	-5.812156577
13''-Carboxy-gamma-tocotrienol	-0.015828323	13.13185375	-0.527683908	0.598284394	0.855054757	-5.815224463
Iso-Valeraldehyde	0.01811806	12.20459617	0.527140491	0.598661007	0.855054757	-5.815492734
Adenophostin A	0.014410474	13.88460399	0.525616027	0.599718106	0.855687861	-5.816243851

beta-Rhodomycin	-0.010026949	12.78365336	-0.522452703	0.601914341	0.857943345	-5.817795529
Aspidospermatine	0.040235482	17.19357058	0.520582572	0.603214453	0.858918231	-5.818708475
Hydroxyl frovatriptan	0.108096165	13.64205972	0.517950163	0.605046652	0.860647992	-5.819988012
Validamycin B	0.017965038	13.02983801	0.515395857	0.606826887	0.862300389	-5.821223402
Homocysteine thiolactone	-0.024949599	11.6558979	-0.514186633	0.607670483	0.86261981	-5.821806118
Taurocholic acid	0.074205755	14.84053553	0.512822064	0.608623085	0.863093164	-5.822462055
cis-Methylbixin	0.024706234	14.57063001	0.51163896	0.6094495	0.863386859	-

			1	48		5.823029356
Delphinidin 3-(3""-p-coumaroylglucoside)	0.014749368	13.11309096	0.509959861	0.610623354	0.864171528	-5.823832246
Pentonic acid; S-Propyl 1-propanesulfinothioate; Methylxanthine	0.031771361	17.13887413	0.507311717	0.612476638	0.865556773	-5.825093151
LysoPE(0:0/22:6(4Z,7Z,10Z,13Z,16Z,19Z))	-0.049916396	16.01401316	-0.50575598	0.613566576	0.865556773	-5.825830856
3-Oxodecanoic acid	-0.017063799	13.86971753	-0.503797986	0.614939556	0.865556773	-5.826756094
3,4,5-trihydroxy-6-[(4-hydroxy-7-methoxy-2,2-dimethyl-3,4-dihydro-2H-1-benz...	0.03522735	14.22176478	0.502817984	0.615627261	0.865556773	-5.827217844
Aspartate	-0.021780609	14.66382797	-0.50212853	0.616111279	0.865556773	-5.82754215

			2			7
C13:0	0.018832841	13.31178782	0.501818618	0.616328905	0.865556773	-5.827687794
3-hydroxynonanoyl carnitine	0.01919804	13.40129839	0.501342279	0.616663461	0.865556773	-5.827911463
Euglobal Ia1	0.036181209	14.68123735	0.501154066	0.616795675	0.865556773	-5.827999782
LPA(a-13:0/0:0)	-0.022167052	15.08859219	-0.50014592	0.617504078	0.865556773	-5.82847229
Propionylcarnitine	0.022180585	13.22173847	0.499708826	0.617811326	0.865556773	-5.828676857
1-(3,4-Dimethoxyphenyl)-1,2-ethanediol 1-O-b-D-glucoside	-0.014706641	13.65918764	-0.498348826	0.618767747	0.865982836	-5.829312217
Photinus luciferin	0.021432335	13.48959896	0.49656196	0.6200253	0.865982836	-

			5	47		5.830144371
4-Methyl-5-(2-phosphoethyl)thiazole	0.01560957	12.33591999	0.496065244	0.620375141	0.865982836	-5.830375168
Cytosine	-0.033252458	12.14430679	-0.495430109	0.620822532	0.865982836	-5.830669942
Isopetasoside	-0.029324545	14.21093433	-0.494863821	0.621221547	0.865982836	-5.830932446
(Z)-4-Dodecenal	-0.021554976	12.14666445	-0.491747018	0.623419696	0.867462604	-5.832371886
Methyl beta-naphthyl ketone	0.014479977	13.92670514	0.491594087	0.623527639	0.867462604	-5.83244228
3-Methylpyrrolo[1,2-a]pyrazine	-0.019602043	12.63352871	-0.489281106	0.625161198	0.868868106	-5.833504294

Proacaciberin	0.055818429	13.76098358	0.486622572	0.627041099	0.870467213	-5.834718799
Cholestane-3,7,12,25-tetrol-3-glucuronide	-0.03009134	14.20454797	-0.485888436	0.627560652	0.870467213	-5.835053013
Citrulline	0.016726958	14.12334533	0.483596924	0.629183565	0.871590492	-5.836092981
D-Glyceric acid	0.023340036	13.6665845	0.482040657	0.630286787	0.871590492	-5.836796474
Mazaticol hydrochloride	0.028534268	12.47066025	0.481543588	0.630639333	0.871590492	-5.837020691
3D,7D,11D-Phytanic acid	0.022341312	16.29186264	0.479174491	0.632320757	0.871590492	-5.838086171
L-2-Amino-4-methylenepentanedioic acid	-0.02003295	13.72405654	-	0.6325422	0.871590492	-

			0.47886268 4			5.83822601 3
3-hydroxyundecanoyl carnitine	0.024452557	13.08879967	0.47868857 1	0.6326658 68	0.871590492	- 5.83830406 1
Argyrolobine	-0.022201615	12.7821246	- 0.47857409	0.6327471 86	0.871590492	- 5.83835536 3
Minaprine	-0.018331284	13.50763582	- 0.47328442 8	0.6365094 23	0.875907341	- 5.84071245 3
6-[(2-{[3-(3,4-dimethoxyphenyl)-7-methoxy-8-methyl- 4-oxo-4H-chromen-5-yl]ox...	0.019450979	13.50493555	0.46972527 6	0.6390461 78	0.877127528	- 5.84228371 2
Alpha-Terpineol	-0.027537481	11.98038169	- 0.46857465 3	0.6398671 88	0.877127528	- 5.84278914 7
Cucurbic acid	0.016045531	13.25418413	0.46784663 7	0.6403868 82	0.877127528	- 5.84310830

						4
C24:1	-0.023435573	15.42823678	-0.467131249	0.640897735	0.877127528	-5.843421442
14,15-DiHETrE	-0.024452465	14.99351729	-0.465958993	0.641735204	0.877127528	-5.843933527
Succinate	-0.065748895	13.97668581	-0.465911874	0.641768875	0.877127528	-5.843954083
Diosmetin 7-O-beta-D-glucuronopyranoside	-0.015125766	13.98773728	-0.465518394	0.64205009	0.877127528	-5.844125665
3,5-Dinitrosalicylic acid; Thiolutin	-0.023357754	13.43232517	-0.464987147	0.642429846	0.877127528	-5.844357092
Mitomycin	0.021870471	14.2850691	0.461782544	0.644722619	0.879396606	-5.845747519

Anhydroamarouciaxanthin B	-0.036619485	13.90864574	-0.459457059	0.646388551	0.880057213	-5.846750503
N-Cyclopropyl-trans-2-cis-6-nonadienamide	0.038353691	12.01544729	0.459023367	0.646699437	0.880057213	-5.846936996
Methylpyrazine	0.029966996	14.97636242	0.45846346	0.647100892	0.880057213	-5.847177503
Fesoterodine	-0.016907993	12.98677475	-0.45503912	0.649558395	0.882538404	-5.848642047
Porson	0.03596481	15.86810447	0.453581106	0.650605919	0.883097873	-5.849262294
3,4-Methyleneazelaic acid	-0.022790443	14.297317	-0.452702956	0.651237169	0.883097873	-5.849634906
2,5-Dimethyl-3-furanthiol acetate	0.019847599	14.12567392	0.45134088	0.6522167	0.883566755	-

			7	8		5.850211426
Mycinamicin VI	-0.053583283	13.28586429	-0.449241963	0.653727524	0.883888565	-5.851096438
3-hydroxy-3-(3,4,5-trimethoxyphenyl)propanoic acid	-0.053590721	16.36385238	-0.448162731	0.654504882	0.883888565	-5.851549894
4,11,13,15-Tetrahydroridentin B	-0.014976543	13.5384517	-0.447462776	0.655009253	0.883888565	-5.851843409
N'-Nitrosoanatabine	-0.028901938	14.11262454	-0.447436292	0.655028334	0.883888565	-5.851854506
Docosatrienoic acid	-0.018630515	14.30427421	-0.446609025	0.655624666	0.883888565	-5.852200796
Capryloylglycine	-0.023208562	12.20075766	-0.44357579	0.657813	0.885584105	-5.85346502

			4			3
Myxalamid A	-0.035336335	13.1250198	-0.44310504	0.658152893	0.885584105	-5.853660459
Benzofuran	-0.027558811	12.9556845	-0.441985773	0.658961311	0.885816844	-5.854124297
4-Vinylphenol sulfate	0.028252909	13.88023045	0.439428499	0.660809869	0.885914148	-5.855179669
L-Cladinose	0.034124555	13.06283549	0.436014248	0.663281157	0.885914148	-5.856579183
Sodium salicylate	0.016685951	12.44890806	0.435641337	0.663551299	0.885914148	-5.85673138
Acetyl-Glu-semialdehyde	0.016550442	12.68139197	0.435630631	0.663559056	0.885914148	-5.856735748
Azomycin	-0.072067126	12.92261238	-	0.6646600	0.885914148	-

			0.434111425	54		5.857354428
Gamma-glutamyl-L-putrescine	-0.01808331	13.07046483	-0.433301082	0.665247624	0.885914148	-5.85768355
Thymol Sulfate	-0.035105988	14.05889646	-0.432898858	0.665539349	0.885914148	-5.857846686
Benzyl methyl disulfide	0.028271462	14.67589277	0.432814423	0.665600594	0.885914148	-5.857880912
UDP-2,4-bis(acetamido)-2,4,6-trideoxy-beta-L-altropyranose	-0.012395121	14.43749243	-0.432545852	0.665795418	0.885914148	-5.857989735
Anisidine	-0.044720786	12.68999571	-0.432334627	0.665948659	0.885914148	-5.858075274
3-Hydroxydodecanoic acid	-0.01557513	14.004703	-0.43118629	0.666782004	0.885914148	-5.85853958

			6			1
Evoxanthidine	-0.012513456	14.49084255	-0.430656077	0.667166925	0.885914148	-5.858753555
4-Hydroxymethylphenylhydrazine	-0.023339157	13.15804021	-0.430479065	0.667295449	0.885914148	-5.858824925
Palmitic amide	0.024392525	15.01969191	0.429466407	0.668030904	0.886046699	-5.859232683
Cortolone-3-glucuronide	0.059491274	16.08876655	0.427930702	0.669146842	0.886683172	-5.859849223
Vitisidin A	0.056134209	15.04071278	0.426129669	0.670456521	0.886835545	-5.860569475
All-trans-retinoic acid	0.016223229	13.47385142	0.425780661	0.670710431	0.886835545	-5.860708697

4-Hydroxy-3-prenylbenzoic acid glucoside	0.055549485	14.83145234	0.421984145	0.673474902	0.886835545	-5.862215794
Azadirachtin A	-0.012443272	13.56624979	-0.421181155	0.674060179	0.886835545	-5.86253283
(±)-2-Butylthiazolidine	0.017581542	13.95105125	0.420979162	0.674207438	0.886835545	-5.862612486
(R)-3,4-Dihydro-2-methyl-2-(4,8,12-trimethyl-3,7,11-tridecatrienyl)-2H-1-be...	-0.019655371	13.10057707	-0.420568565	0.674506813	0.886835545	-5.862774286
Protriptyline	-0.016376964	12.37503724	-0.418762302	0.675824413	0.886835545	-5.863484196
5-Hydroxytryptophol glucuronide	0.042535545	13.11209336	0.418631914	0.675919565	0.886835545	-5.863535323
Cyanuric acid	0.017173275	11.39537915	0.41703465	0.6770856	0.886835545	-

			8			5.864160352
3-Oxohexadecanoic acid	-0.012920954	15.23696957	-0.41684641	0.677223078	0.886835545	-5.864233859
DHAP(10:0)	-0.046706632	13.15257113	-0.416750624	0.677293034	0.886835545	-5.864271248
Avocadyne	-0.019774601	15.36488337	-0.416719313	0.677315902	0.886835545	-5.864283468
(3beta,17alpha,23R)-17,23-Epoxy-3,29-dihydroxy-27-norlanost-8-ene-15,24-dione	0.044211441	13.73629961	0.414420556	0.678995604	0.886835545	-5.86517814
C24:5	-0.01723303	14.48245411	-0.414215431	0.679145607	0.886835545	-5.865257734
Valsartan	0.099451482	13.73929651	0.413593007	0.679600737	0.886835545	-5.865499011

Pyridoxine	-0.009510974	13.51042031	-0.413487415	0.6796779	0.886835545	-5.865539906
{3-[3-(2,4-dihydroxyphenyl)-2-hydroxy-3-[3,5,7-trihydroxy-2-(3-hydroxypheny...	0.011479085	13.83330859	0.412793715	0.6801853	0.886835545	-5.865808318
Hydroxyphenylacetylglycine	-0.058842303	12.97111477	-0.411760917	0.6809410	0.886835545	-5.866207101
Falcarindiol	0.013108754	13.09098495	0.410733108	0.6816934	0.886835545	-5.866602968
[3-(7-hydroxy-4-oxo-4H-chromen-2-yl)phenyl]oxidanesulfonic acid	0.022196815	14.01154651	0.410334375	0.6819854	0.886835545	-5.866756277
1-Piperazinecarbodithioic acid	-0.067416298	15.20489895	-0.403968197	0.6866535	0.89207361	-5.869183872
Glutamate	0.026528159	16.5209883	0.40267684	0.6876018	0.892473945	-

			5	78		5.869671677
Dihydrofukinolide	-0.029618506	14.13713447	-0.400557081	0.689159714	0.893663852	-5.870469031
6-Methylnicotinamide	0.017661876	13.38538243	0.39855442	0.690632711	0.894741635	-5.871218477
Protoveratrine B	0.018211028	14.59236943	0.397416783	0.691469992	0.894994586	-5.871642539
6-{[6-(3,4-dihydroxy-6-methyl-5-oxooxan-2-yl)-5-hydroxy-2-(3-methoxyphenyl)...	-0.011631196	13.56387387	-0.3952726	0.693049106	0.895700491	-5.872438509
Rubraflavone A	-0.013777621	17.50327075	-0.394133788	0.693888347	0.895700491	-5.872859513
LysoPE(0:0/18:1(11Z))	-0.028228325	16.31134697	-0.39245035	0.695129664	0.895700491	-5.87347963

						8
Theophylline	-0.014579762	18.89290167	-0.39136684	0.695929009	0.895700491	-5.873877366
CI Acid Orange 3	-0.026121574	13.26675775	-0.390813938	0.696337048	0.895700491	-5.874079899
Suberic acid	0.022392457	14.05289069	0.390632146	0.696471229	0.895700491	-5.874146429
Dopamine 4-sulfate	-0.064398918	15.13953876	-0.390575352	0.696513151	0.895700491	-5.874167207
(7''S,8''S)-4,7''-Epoxy-3,8''-bilign-7-ene-3'',5-dimethoxy-4'',9,9''-triol ...	0.015648949	13.42276348	0.388383867	0.698131478	0.896714786	-5.874966667
3-(3,4,5-Trimethoxyphenyl)propanoic acid	-0.042260107	17.33967612	-0.387232202	0.698982493	0.896714786	-5.875384997

19-Norandrosterone	0.026524042	14.19095821	0.385065098	0.700584894	0.896714786	-5.876168812
Cilazaprilat	0.016007869	12.88489738	0.384726167	0.700835628	0.896714786	-5.876291002
Bufotenin	-0.014590529	14.08971904	-0.384155227	0.701258071	0.896714786	-5.876496591
Erythro-4-hydroxy-L-glutamate(1-)	-0.054520173	13.85273651	-0.383643401	0.701636855	0.896714786	-5.876680636
3-Sulfinoalanine	-0.01326605	12.73048529	-0.383111961	0.702030233	0.896714786	-5.876871474
5''-(3'',4''-Dihydroxyphenyl)-gamma-valerolactone sulfate	0.026550814	14.06684474	0.382062581	0.702807233	0.896714786	-5.877247527
N4-Acetylsulfamethoxazole	0.077223557	17.27027472	0.38149684	0.7032262	0.896714786	-

			3	56		5.877449835
Sedoheptulose; 1,3,7-Trimethyluric acid	-0.022322772	15.91008164	-0.380613656	0.703880585	0.896714786	-5.877765066
Cyclo[(Z)-alpha,beta-didehydrophenylalanyl-L-leucyl]	0.017933263	14.42016085	0.379608427	0.7046256	0.896714786	-5.878122969
Nafcillin	0.069464131	14.8737227	0.379074953	0.705021095	0.896714786	-5.878312523
Octadecyl fumarate	0.013060402	13.98844933	0.378008371	0.705812054	0.896902464	-5.878690705
Phthalate	-0.011528942	15.28405996	-0.375583827	0.707611244	0.897865718	-5.879546424
Obtusilactone A	-0.019050598	12.84363453	-0.37393427	0.708836276	0.897865718	-5.88012547

			3			6
Gomphidic acid	0.016015831	13.9467474	0.372368812	0.709999559	0.897865718	-5.880672654
Methyl propenyl ketone	-0.012943586	12.3641235	-0.372257204	0.710082522	0.897865718	-5.880711577
Dimethyl trisulfide	-0.010992848	11.12644434	-0.372193868	0.710129601	0.897865718	-5.88073366
Capsidiol	0.013069823	12.855543	0.371783548	0.710434639	0.897865718	-5.880876634
SM(d18:1/26:0)	-0.0238712	14.09090496	-0.370437399	0.711435716	0.898316475	-5.881344585
Thymol	0.06666187	15.36648276	0.369283763	0.712294028	0.898406756	-5.881744266

3-Hydroxycapric acid	-0.020453598	14.49717899	-0.368609064	0.712796178	0.898406756	-5.881977441
Diethylpropion	0.019134273	12.00015209	0.366828686	0.71412184	0.899264539	-5.882590692
Leukotriene C5	0.010752478	13.14798069	0.365195082	0.71533898	0.899984241	-5.883150779
trans-4-Hydroxycyclohexanecarboxylate	-0.014394711	13.27479721	-0.363869215	0.716327373	0.900415111	-5.883603521
Quinoline yellow	-0.017100317	13.90832206	-0.362078529	0.717663033	0.901281323	-5.884212374
Alanyl-Methionine; 1-Hydroxypyrene	0.039625252	13.97570282	0.361153475	0.718353367	0.901286324	-5.884525728
Vanillactic acid	-0.0290628	14.34071061	-	0.7189601	0.901286324	-

			0.360340688	09		5.884800392
Urolithin B 3-O-glucuronide	-0.019342106	12.86780404	-0.355970682	0.722225357	0.904066923	-5.886266546
psi-Pelletierine	0.014651937	11.62988852	0.355636471	0.722475289	0.904066923	-5.88637794
N-Decanoylglycine	0.013805674	12.66142214	0.354544678	0.723291968	0.904277133	-5.88674111
Bufencarb	0.022786799	13.69235886	0.351700461	0.725420978	0.906126204	-5.887681963
3-(2-Furanyl)-2-phenyl-2-propenal	-0.014905799	13.77379891	-0.35017764	0.726561675	0.906365843	-5.888182594
Retinal	0.018526915	14.91346753	0.347080559	0.728883713	0.906365843	-5.889194074
Potassium acetate	-0.017143197	12.54230358	-	0.7290123	0.906365843	-

			0.346909078	5		5.889249816
N-Acetyl-O-demethylpuromycin-5'-phosphate	0.025877449	13.38355561	0.346727892	0.729148276	0.906365843	-5.889308683
2-Hydroxy-2,4-pentadienoic acid	-0.017194187	16.3989151	-0.346613277	0.729234265	0.906365843	-5.889345905
Catechol	-0.016510959	14.30007183	-0.346240485	0.729513971	0.906365843	-5.889466887
Luteolin 7-O-(2-apiosyl-4-glucosyl-6-malonyl)-glucoside	-0.02166521	13.59221163	-0.343251362	0.731758026	0.90832072	-5.890432248
(R)-Bitalin A	-0.025181002	15.78762595	-0.342348036	0.732436646	0.90832072	-5.890722345
(3beta,5alpha,9alpha,22E,24R)-3,5,9-Trihydroxy-23-methylergosta-7,22-dien-6...	-0.018052566	13.49368716	-0.34154222	0.733042188	0.90832072	-5.890980475

			1			2
5-(2-carboxylatoethyl)-4-oxo-4,5-dihydro-1H-imidazol-5-ide	0.021478561	14.43964476	0.340214514	0.7340402 8	0.908749689	-5.891404461
Traumatic acid	0.021257431	14.23662125	0.337115652	0.7363715 8	0.910826958	-5.892387632
LysoPE(0:0/18:2(9Z,12Z))	-0.03239111	16.11631333	-0.333495279	0.7390983 15	0.913389229	-5.89352488
Dehydroepiandrosterone	0.012462832	13.48657546	0.332597536	0.7397749 76	0.913415692	-5.893804985
2'',7-Dihydroxy-4''-methoxy-8-prenylflavan 2'',7-diglucoside	0.010341633	13.51786484	0.331467613	0.7406269 28	0.913658352	-5.894156461
N-Acetylpuromycin	-0.010430012	13.25040687	-0.329469103	0.7421345 71	0.913845174	-5.894775196

Carthamin	-0.00907663	13.55518021	-0.329046301	0.742453653	0.913845174	-5.894905616
Glyphosate	-0.01035275	13.30966769	-0.328660253	0.742745038	0.913845174	-5.895024552
Dracorubin	0.013169681	13.25471734	0.326999999	0.743998599	0.913930493	-5.895534465
Lipoamide	0.017392318	12.6493297	0.32634649	0.744492213	0.913930493	-5.895734469
12-Ketodeoxycholic acid	-0.01427078	14.74403733	-0.325963913	0.744781234	0.913930493	-5.89585137
C21:1	-0.016004981	13.38844117	-0.320639269	0.748807515	0.917448948	-5.897464158
Hydroxypyridine	-0.010656558	13.7818125	-	0.7489647	0.917448948	-

			0.320431478	79		5.897526558
Ammelide	-0.022135281	12.52608131	-0.317884881	0.7508929 9	0.919003361	-5.898288025
Secogalioside	0.011748928	13.4578397	0.31682723	0.751694276	0.919177035	-5.898602493
Asparaginyl-Hydroxyproline	-0.023138515	13.73754844	-0.313306694	0.754363402	0.921632412	-5.899641701
Calystegin B2	0.01484786	13.10183933	0.311498715	0.755735289	0.921971258	-5.900170885
Propofol	0.071116918	17.88902834	0.309914782	0.756937809	0.921971258	-5.900631969
20-Carboxy-leukotriene B4	-0.015783441	13.58039743	-0.309590177	0.757184322	0.921971258	-5.900726173

Acetaminophen glucuronide	0.05069316	17.06527008	0.309455914	0.757286291	0.921971258	-5.900765108
Kamahine C	-0.017162612	15.52735664	-0.308496913	0.758014757	0.922052854	-5.901042724
Di-2-propenyl sulfide	-0.010889505	13.44690829	-0.307121079	0.759060228	0.92251958	-5.901439502
2(R)-hydroxydocosanoic acid	-0.020957302	13.73690217	-0.304582841	0.760990154	0.924059473	-5.902166858
2,4-Dimethylthiazole	-0.028687079	11.98562068	-0.302398538	0.762652169	0.925271649	-5.902787964
(R)-3-Hydroxy-Octadecanoic acid	-0.011501583	15.50242768	-0.301458767	0.763367572	0.925334257	-5.903053813
Slaframine	0.012778124	12.59398601	0.30025729	0.7642824	0.925638396	-

			4	92		5.90339249
Alfuzosin	-0.009420216	12.76450707	-0.298381893	0.765711269	0.92656381	-5.903918436
Testosterone enanthate	-0.007380202	13.23922039	-0.295679614	0.767771417	0.92745528	-5.904670487
Deoxyribose	-0.015223597	13.36778132	-0.294495933	0.768674347	0.92745528	-5.904997756
Fosamine	-0.012370024	12.22464455	-0.293986836	0.769062791	0.92745528	-5.905138109
Diacetylhydrazine	-0.009261742	12.46904147	-0.293925942	0.769109257	0.92745528	-5.905154881
(3b,6b,8b,12a)-8,12-Epoxy-7(11)-eremophilene-6-angeloyloxy-8,12-dimethoxy-3-ol	0.013418034	13.95323341	0.292624859	0.770102274	0.927468428	-5.905512401

Rhein	-0.010373909	15.69777296	-0.291861753	0.770684872	0.927468428	-5.905721356
Tolmetin	-0.021636365	15.01865711	-0.290461065	0.771754573	0.927468428	-5.906103474
C22:5	-0.024668093	16.72593349	-0.289839966	0.772229044	0.927468428	-5.906272327
Ammeline	0.029844207	11.49811171	0.289554949	0.772446804	0.927468428	-5.906349692
Phosphoglycerate; Diethyldithiophosphate	0.013160293	12.66102316	0.287269338	0.774193716	0.928765955	-5.906967342
2-Benzothiazolesulfonamide	-0.024370601	12.21084765	-0.285239416	0.775746169	0.929828168	-5.907511796
Stearoylethanolamide	0.008636151	12.48212404	0.28358877	0.7770092	0.930174978	-

			7	19		5.907951677
delta-(L-2-Aminoadipyl)-L-cysteinyl-D-valine	-0.016363297	12.87684498	-0.283117361	0.777370049	0.930174978	-5.908076836
Epsilon-(gamma-Glutamyl)-lysine	-0.022828742	13.86916685	-0.279572685	0.780084759	0.932304492	-5.909011277
Acenocoumarol	-0.015919307	14.92872519	-0.278969061	0.780547318	0.932304492	-5.909169231
Succinylproline	-0.008730583	14.1355578	-0.277997276	0.781292164	0.932304492	-5.909422807
Hericenone B	-0.012380728	13.58622654	-0.275218575	0.783423075	0.932304492	-5.910142999
11-Hydroxy-9-tridecenoic acid	0.008386377	13.25209511	0.274560866	0.783927694	0.932304492	-5.910312409

						8
Octanoic acid	-0.047892467	17.04401016	-0.272435	0.785559364	0.932304492	-5.910857205
Acetone	-0.010531454	14.00892651	-0.271188903	0.786516226	0.932304492	-5.911174577
Heptanoylcarnitine	0.010376106	12.31237322	0.270288656	0.787207715	0.932304492	-5.911402959
C14:0	0.018856523	18.80330892	0.269915771	0.787494182	0.932304492	-5.911497333
Threonate; 1-Pentanesulfenothioic acid; Hypoxanthine	0.019411204	17.02094763	0.26983211	0.787558459	0.932304492	-5.911518489
8-iso-15-keto-PGE2	-0.016535566	14.13207407	-0.269546211	0.787778124	0.932304492	-5.911590737

3-Ethylpyridine	0.015345147	12.38381666	0.26701406	0.789724392	0.932304492	-5.912227283
Hydroxyethylpromethazine	0.036108561	15.2104302	0.26642065	0.790180691	0.932304492	-5.912375589
5-Methylquinoxaline	-0.011480178	12.36080855	-0.266322413	0.790256238	0.932304492	-5.912400109
Rhazidigenine Nb-oxide	0.017856143	17.89710681	0.266115342	0.790415486	0.932304492	-5.912451764
Pyrocatechol sulfate	-0.016288949	16.10903542	-0.265678949	0.790751121	0.932304492	-5.912560493
Streptamine	-0.037180343	13.25768458	-0.264256379	0.791845512	0.932304492	-5.912913695
Telaprevir	-0.009404148	13.43683333	-	0.7923063	0.932304492	-

			0.263657485	68		5.913061824
9-Octadecenal	0.008384039	12.63717405	0.263366999	0.792529926	0.932304492	-5.913133551
1-Tridecene	-0.020671579	11.41994921	-0.262861628	0.792918901	0.932304492	-5.913258149
13-Heptadecyn-1-ol	0.011460225	12.62589146	0.262503606	0.793194496	0.932304492	-5.913346274
(+)-7-epi-Syringaresinol 4''-glucoside	-0.007018049	13.56315217	-0.259391662	0.795591073	0.933123613	-5.914107206
ADP-ribose	0.009342958	13.76262485	0.259207417	0.795733025	0.933123613	-5.914151974
MG(18:0e/0:0/0:0)	0.009049054	12.39773179	0.258991287	0.795899552	0.933123613	-5.914204444

						8
Cycloheximide	0.067856234	16.35073819	0.253698492	0.799980525	0.937120043	-5.915475828
LysoPE(0:0/20:4(5Z,8Z,11Z,14Z))	-0.0229467	16.17890227	-0.252348294	0.801022471	0.93755275	-5.915795959
LPA(P-16:0e/0:0)	0.010408383	13.97045109	0.250091215	0.802765053	0.938477379	-5.916327299
8-[3,7-dihydroxy-2-(3-hydroxyphenyl)-3,4-dihydro-2H-1-benzopyran-4-yl]-2-(3...	0.005014698	13.28489583	0.24914048	0.803499366	0.938477379	-5.916549684
Succinic aldehyde	0.00745884	15.65634497	0.248577926	0.803933944	0.938477379	-5.916680871
{[(3E)-4-(1-oxo-1H-isochromen-3-yl)but-3-en-2-yl]oxy}sulfonic acid	0.016896958	12.97622731	0.247838362	0.804505357	0.938477379	-5.916852886

Citronellyl formate	-0.01440614	13.92587974	-0.244546115	0.807050336	0.938872759	-5.917612415
1,11-Undecanedicarboxylic acid	-0.011153988	13.7505018	-0.242689714	0.808486285	0.938872759	-5.918036215
Desulfoglucotropeolin	-0.01590239	13.77298548	-0.242667416	0.808503537	0.938872759	-5.918041286
2-Methylthiophene	-0.008615393	14.34897814	-0.241665585	0.809278739	0.938872759	-5.918268634
C3:0 (Propionic acid)	0.011877006	13.79567525	0.241657165	0.809285255	0.938872759	-5.91827054
Glycineamideribotide	-0.010737342	15.37908566	-0.241437377	0.809455349	0.938872759	-5.91832029
Plantamajoside	0.00915781	13.24201552	0.241303626	0.809558864	0.938872759	-5.91835054

						3
2-Methoxyacetaminophen sulfate	0.036926818	16.67209685	0.238271106	0.811906737	0.94060923	-5.919031962
CMP-pseudaminic acid	0.009661125	13.10833076	0.237626958	0.812405676	0.94060923	-5.919175595
Tricholomic acid	0.010280849	12.23682468	0.235188125	0.814295424	0.94201479	-5.919715891
Bensulfuron-methyl	-0.012164659	13.57171226	-0.232304188	0.816531477	0.942867861	-5.920347605
Urocanate	-0.016638587	14.62863958	-0.231435214	0.817205552	0.942867861	-5.920536423
Propyl 1-(propylsulfinyl)propyl disulfide	0.018413137	16.72067694	0.231319654	0.817295169	0.942867861	-5.920561484
(E)-S-1-Propenyl thiosulfate	0.010010257	11.39444818	0.23074843	0.8177383	0.942867861	-

			8	39		5.920685151
3-Methyluric acid	-0.01274411	15.37527774	-0.22849737	0.819485368	0.944023279	-5.921169545
Myricetin 7-(6""-galloylglucoside)	0.007475319	14.57539073	0.22726926	0.820438872	0.944023279	-5.921431814
Kanamycin	-0.008110637	13.16248989	-0.226022629	0.8214070 3	0.944023279	-5.921696593
7-hydroxy-1-oxo-1H-isochromene-3-carboxylic acid	-0.036112488	15.59291736	-0.225584013	0.821747733	0.944023279	-5.921789408
Piperolein B	0.016298746	14.80663184	0.225096518	0.822126443	0.944023279	-5.921892353
Leukotriene A4	-0.021739043	14.22820944	-0.22186417	0.824638535	0.945719611	-5.92256930

			9			5
Isopropylmaleate	0.009699018	13.53211205	0.221449971	0.824960579	0.945719611	-5.922655345
Alpha-dihydroartemisinin	0.013046311	15.34573264	0.219010627	0.826857749	0.947115614	-5.923158793
4-Oxoretinal	-0.007544645	13.26233486	-0.217275859	0.828207565	0.94780141	-5.923513435
OA-6129 D	0.010429741	13.2612738	0.21639496	0.828893185	0.94780141	-5.923692439
Methyl methanesulfonic acid	-0.007341645	11.71581817	-0.215620315	0.829496213	0.94780141	-5.923849251
3,4,5-trihydroxy-6-[(3-methylbut-2-enoyl)oxy]oxane-2-carboxylic acid	-0.039645602	15.28960004	-0.213794291	0.830918096	0.948648506	-5.924216672

2-Hydroxymyristic acid	-0.007607004	13.41051151	-0.211604003	0.832624359	0.949672996	-5.924653267
Codonocarpine	0.010191738	13.13382794	0.209130059	0.834552548	0.949672996	-5.925140999
Marimastat	0.012111043	13.3404951	0.209092319	0.83458197	0.949672996	-5.925148395
Crotanecine	0.032476139	12.86337676	0.208458845	0.835075866	0.949672996	-5.925272339
3,4-Dihydroxyphenylglycol	0.006683654	13.40036331	0.208271773	0.835221731	0.949672996	-5.925308869
15(S)-Hydroxyeicosatrienoic acid	-0.012617665	14.80487757	-0.206742121	0.836414656	0.950254304	-5.925606338
3-O-Methylniveusin A	0.006247845	13.89051547	0.20430291	0.8383176	0.951516532	-

			6	95		5.926076152
Heptyl 4-hydroxybenzoate	0.011495339	12.96682085	0.203568544	0.838890831	0.951516532	-5.926216508
Echimidine	-0.014929382	12.86059095	-0.201593895	0.840432357	0.952490005	-5.926591403
N-Methoxyspirobrassinol methyl ether	0.036298578	15.17217236	0.200299139	0.841443455	0.952861232	-5.926835235
Glutarate	-0.005609959	14.38034852	-0.199356528	0.842179723	0.952900629	-5.927011763
N-[(3a,5b,7a,12a)-3,12-dihydroxy-24-oxo-7-(sulfooxy)cholan-24-yl]-Glycine	-0.006593376	13.12857816	-0.197804734	0.843392122	0.952900629	-5.927300562
3-Nitrotyrosine	0.014184409	14.49568502	0.19684771	0.844140002	0.952900629	-5.92747754

						6
Disaccharide	0.027203151	14.0413677	0.196754925	0.844212537	0.952900629	-5.927494659
(±)-(Z)-2-(5-Tetradecenyl)cyclobutanone	0.011197891	12.98871008	0.195215466	0.845415918	0.953032928	-5.927777419
Hydroxy-valine	0.011442229	12.87852259	0.194855846	0.845697082	0.953032928	-5.927843152
C12:4	0.012448058	12.97106519	0.191959319	0.847962411	0.953741466	-5.928368178
Valine; Betaine	-0.007332667	17.8316875	-0.191673652	0.848185896	0.953741466	-5.928419532
Porrigenin A	-0.007593731	14.46403842	-0.191427664	0.848378348	0.953741466	-5.928463692

Isorhamnetin 7-glucoside	-0.006091894	13.69986297	-0.18797892	0.851077474	0.955619605	-5.929076843
Apigenin 7-[rhamnosyl-(1->2)-galacturonide]	0.006680811	14.6260352	0.185906708	0.852700129	0.955619605	-5.929439904
1-Methylpyrrolo[1,2-a]pyrazine	0.004860614	13.02477382	0.185313287	0.853164924	0.955619605	-5.929543132
Phenprocoumon	0.015379437	15.33103448	0.18526538	0.853202449	0.955619605	-5.929551452
Ne,Ne dimethyllysine	0.006788562	13.58074974	0.184286289	0.853969438	0.955619605	-5.929721005
Sulfolithocholylglycine	-0.01862008	14.25874684	-0.18302095	0.854960867	0.955619605	-5.929938797
Dillapional	0.012531797	13.30769121	0.18179680	0.8559202	0.955619605	-

			8	43		5.930148072
Nicotinamide	-0.006506468	13.29998007	-0.181292267	0.856315719	0.955619605	-5.930233918
Trilostane	0.013055465	13.43578056	0.180614507	0.856847028	0.955619605	-5.930348861
Decanoic acid (FA10:0)	0.026129159	17.86469142	0.180019532	0.857313494	0.955619605	-5.930449409
Heptadecanoic acid	-0.010236488	17.43659295	-0.177268896	0.859470668	0.955619605	-5.930909945
2-Hydroxyethanesulfonate	0.01551017	14.10961571	0.177115966	0.859590634	0.955619605	-5.930935342
(1xi,3xi)-1,2,3,4-Tetrahydro-1-methyl-beta-carboline-3-carboxylic acid	-0.015004515	14.47754384	-0.17674682	0.859880221	0.955619605	-5.93099655

			3			5
Phytolaccoside A	-0.013541104	13.51721004	-0.175073968	0.861192789	0.955619605	-5.931272355
Tricin 7-glucoside	-0.011666486	12.93144706	-0.172940682	0.862867184	0.955619605	-5.931620261
Acetylglucosamine P	0.016632438	14.97240958	0.172870651	0.862922161	0.955619605	-5.931631609
1,2-Dinitrobenzene	-0.005776877	13.93053019	-0.171124537	0.864293147	0.955619605	-5.931913086
5-Amino-4-imidazole carboxylate	0.029825984	12.77605544	0.170795537	0.864551513	0.955619605	-5.931965801
Uridine	-0.008960417	17.15376035	-0.170631933	0.864679998	0.955619605	-5.931991978

2-N,6-N-Bis(2,3-dihydroxybenzoyl)-L-lysine	0.013790667	13.55965935	0.170365004	0.864889635	0.955619605	-5.932034632
Sakacin A	0.006232688	13.68397869	0.170183369	0.865032229	0.955619605	-5.932063619
Avermectin B2b aglycone	-0.008198498	13.45839314	-0.169410623	0.865639252	0.955619605	-5.932186593
2-amino-4-({1-[(carboxymethyl)-C-hydroxycarbonimidoyl]-2-[(1-hydroxy-2,4-di...	-0.012175485	13.35418954	-0.168040121	0.866715924	0.955619605	-5.932403318
{[1-(4-methoxyphenyl)pentan-3-yl]oxy}sulfonic acid	-0.037373383	19.31222691	-0.167181462	0.867390617	0.955619605	-5.932538206
2-Carboxy-2-hydroxy-8-carboxychromene	-0.010369701	12.58618615	-0.163687382	0.870137097	0.955619605	-5.933079971
Hydrocinnamic acid	0.009031338	13.81915553	0.16294601	0.8707200	0.955619605	-

			9	4		5.933193449
14,19-Dihydroaspidospermatine	0.012801486	18.65186757	0.162363223	0.871178351	0.955619605	-5.933282295
Benzamide	-0.009029644	12.67518099	-0.162213482	0.871296114	0.955619605	-5.933305071
Paracetamol sulfate	0.032910826	19.27682389	0.16122668	0.872072251	0.955619605	-5.933454643
Cys-Gly	-0.00522066	13.89645404	-0.16115854	0.872125849	0.955619605	-5.933464937
4-Mercaptobutyl glucosinolate	0.009523509	13.26799592	0.160657599	0.872519901	0.955619605	-5.933540485
Ethoxysulfuron	-0.00633422	13.23459368	-0.16022165	0.872862847	0.955619605	-5.933606035

			9			8
Simvastatin	-0.007260343	13.54741665	-0.159693636	0.873278265	0.955619605	-5.933685199
6-Acetyl-1,2,3,4-tetrahydropyridine	-0.009013585	11.72691896	-0.159306497	0.873582866	0.955619605	-5.933743073
L-3,4-Dihydroxybutan-2-one 4-P	0.013659015	12.36509731	0.158722587	0.874042321	0.955619605	-5.933830097
1-(Hydroxymethyl)-5,5-dimethyl-2,4-imidazolidinedione	-0.00704343	13.6174417	-0.156850965	0.875515316	0.956254683	-5.934106885
Dehydrophytosphingosine	0.006407768	13.34865286	0.155527587	0.876557097	0.956254683	-5.934300613
Nicardipine	-0.006430161	13.56759162	-0.155370055	0.876681123	0.956254683	-5.934323565

Isorhamnetin	0.005059688	16.60281334	0.153844482	0.877882371	0.956816282	-5.934544631
2-(2,3,5-trihydroxy-4-methoxyphenyl)propanoic acid	0.004578011	13.9904779	0.151746434	0.879534852	0.957868425	-5.934845091
DG(8:0/13:0/0:0)	-0.005029902	13.38658205	-0.150443023	0.880561722	0.958238126	-5.935029675
Aurachin D	0.006348011	12.84738462	0.148089839	0.882416149	0.959507107	-5.935358891
10-Undecenal	-0.004479482	12.92790865	-0.146207407	0.883900066	0.960125592	-5.935618512
1-Palmitoylglycerophosphoinositol	0.005965699	13.79001141	0.14562095	0.884362454	0.960125592	-5.935698717
8-Hydroxy-5,6-octadienoic acid	0.006189298	13.90247216	0.14413632	0.8855331	0.960648438	-

			4	73		5.935900315
Sulfo-Cys	-0.006141417	12.44684799	-0.143108271	0.886344002	0.960780357	-5.936038705
17-Beta-Estradiol-3,17-beta-sulfate	0.007482133	13.00777494	0.142032959	0.887192235	0.960952584	-5.936182397
Lirioresinol A	-0.005967271	13.51105561	-0.137168991	0.891030662	0.964360825	-5.936818824
1-Palmitoyl-2-(5-hydroxy-8-oxo-6-octenoyl)-sn-glycero-3-phosphatidylcholine	-0.00662792	13.32446886	-0.135568173	0.892294523	0.964979492	-5.937023434
3b-Hydroxy-5-cholenoic acid	0.009307369	14.5657673	0.132731588	0.894534701	0.966176265	-5.937380098
Ethyl isovalerate	0.004192592	12.92199917	0.131692732	0.895355357	0.966176265	-5.93750883

						4
2-(2-Thienylmethylene)-1,6-dioxaspiro[4.4]non-3-ene	0.028833888	15.27588565	0.131156658	0.895778874	0.966176265	-5.93757487
13S-hydroxyoctadecadienoic acid	0.015265107	16.45362118	0.130252396	0.896493341	0.966176265	-5.937685649
GTP	-0.004602741	14.0880322	-0.129779982	0.896866634	0.966176265	-5.937743219
Undecanal	0.004292706	11.91701044	0.12838453	0.897969427	0.966617283	-5.937912052
Medroxyprogesterone	0.012997206	15.07861088	0.127017608	0.899049868	0.967033577	-5.938075664
CI Acid Orange 20	0.005047981	12.69721344	0.122901093	0.902304766	0.969545912	-5.938557808
Acetyl-Met	-0.005597987	14.55604052	-	0.9027766	0.969545912	-

			0.122304522	09		5.938626363
Polyoxyethylene 40 monostearate	0.004576088	14.20922656	0.118809512	0.905541591	0.970556778	-5.939021294
Cuminaldehyde	0.015144128	13.94337895	0.118626834	0.905686143	0.970556778	-5.939041622
Mezerein	0.006243947	13.86360085	0.116703114	0.907208568	0.970556778	-5.939253786
Tetraphyllin B sulfate	-0.003898697	12.86471318	-0.116683384	0.907224184	0.970556778	-5.939255944
2,6-Dimethoxy-4-propylphenol	-0.00974571	15.47390407	-0.116362549	0.907478127	0.970556778	-5.939290985
5a-Androst-3-en-17-one	-0.004882236	12.75650768	-0.11506017	0.908509057	0.970556778	-5.93943223

			5			7
Resolvin D2	0.013510511	14.07929903	0.113375992	0.909842449	0.970556778	-5.939612542
Dihydro-4,4-dimethyl-2,3-furandione	0.004448327	12.92721563	0.112980159	0.910155873	0.970556778	-5.939654533
Thio-THIP	-0.003511019	12.68027195	-0.112545746	0.910499861	0.970556778	-5.939700448
5-Phenylvaleric acid	-0.018626207	13.94499537	-0.110919385	0.911787838	0.970556778	-5.939870774
6-{[3,7-dihydroxy-2-(1-hydroxy-3-methoxy-4-oxocyclohexa-2,5-dien-1-yl)-6-me...	0.004555915	14.90851206	0.109441972	0.912958066	0.970556778	-5.940023353
Dexmedetomidine	-0.003848532	12.38690403	-0.10862952	0.913601664	0.970556778	-5.940106386

Acetaminophen	0.017594051	17.39541081	0.107495079	0.914500435	0.970556778	-5.940221292
Berteroin; 7-Cyano-7-carbaguanine	0.003977939	14.17689052	0.107411073	0.914566994	0.970556778	-5.940229753
5-Hydroxyomeprazole	0.018279114	15.31035358	0.107331508	0.914630035	0.970556778	-5.940237761
16,17-Dihydro-16a,17-dihydroxygibberellin A4 17-glucoside	0.007051972	14.37676576	0.104950879	0.916516499	0.970556778	-5.940474605
C24:4	-0.004211703	13.55323746	-0.104749549	0.916676059	0.970556778	-5.940494392
Neuroprotectin D1	-0.012918671	14.64208504	-0.104254586	0.917068347	0.970556778	-5.940542874
Cycloheptanecarboxylic acid	-0.006765095	12.95373632	-	0.9179040	0.970556778	-

			0.103200284	13		5.94064538
Phenylethyl alcohol	0.010058567	12.92696857	0.100768364	0.919831959	0.970556778	-5.940877853
Bisnorcholic acid	-0.004507088	13.90795984	-0.100406158	0.920119145	0.970556778	-5.940912003
Nonadeca-10(Z)-enoic acid	-0.006139892	15.56270284	-0.099400425	0.920916626	0.970556778	-5.941006182
(-)-Epigallocatechin 3-(3-methyl-gallate)	0.007714656	14.32109075	0.099396268	0.920919922	0.970556778	-5.941006569
Heptanone	-0.0058613	11.83621621	-0.09904091	0.921201716	0.970556778	-5.941039617
Cyclopentolate	-0.004412694	13.67291146	-0.09898016	0.921249891	0.970556778	-5.94104525

			1			5
{[8-(2,4-dihydroxyphenyl)-7-(3,7-dimethylocta-2,6-dien-1-yl)-5-hydroxy-2-me...	0.005443255	13.65558197	0.097709983	0.922257215	0.970556778	-5.941162342
Isopulegone caffeate	0.003745953	13.66112739	0.09738331	0.922516306	0.970556778	-5.941192211
3,4,5-trihydroxy-6-({2-[6-(2-methylbut-3-en-2-yl)-7-oxo-2H,3H,7H-furo[3,2-g...	0.003584557	13.92644506	0.093743259	0.925403858	0.972821193	-5.941518266
Triphenyl phosphate	-0.003977165	12.85348924	-0.092448756	0.926430992	0.972821193	-5.941631227
4-Methyl-1-phenyl-2-pentanone	0.010615	12.93245426	0.092031332	0.926762226	0.972821193	-5.941667317
Malvidin 3-(6-malonylglucoside) 5-glucoside	-0.003044185	13.81488947	-0.090208497	0.928208834	0.973606557	-5.941823005

2-Methylbutyrylglycine	-0.004222755	13.42068177	-0.087312182	0.930507849	0.974158475	-5.942063974
Epanolol	-0.006774768	16.13815753	-0.086423212	0.931213606	0.974158475	-5.942136358
Bumetanide	0.004861611	13.00465602	0.085684545	0.931800008	0.974158475	-5.94219594
4-Propylphenol	0.009056402	13.79836573	0.085246271	0.932148007	0.974158475	-5.942231057
Vestitone 7-glucoside	-0.005315061	13.45342962	-0.084688446	0.932591003	0.974158475	-5.942275477
Cytochalasin Ppho	-0.005178553	13.66000224	-0.084264114	0.932927951	0.974158475	-5.942309077
1,2-Diacylglycerol-LD-PI-pool	-0.006126651	12.99111395	-0.080205442	0.936151418	0.976792722	-5.942621928

3,4-Diethylthiophene	0.003646556	13.17762706	0.078909198	0.937181142	0.977022905	-5.942718592
Linoleoyl ethanolamide	-0.003161295	12.38515909	-0.078163232	0.937773778	0.977022905	-5.942773507
5-Oxoavermectin "2b" aglycone	0.003082466	13.45258356	0.076650021	0.938976063	0.977234562	-5.9428833
2-(2H-1,3-benzodioxol-5-yl)-2-oxoacetic acid	0.00507926	12.63015347	0.076142931	0.939378999	0.977234562	-5.942919613
Methylsyringin	0.013285055	15.11351897	0.073588205	0.941409178	0.978616252	-5.943098891
C13:2	-0.002494572	12.96636507	-0.071365821	0.943175574	0.979634144	-5.943249871
4-Acetylimidazo[4,5-c]pyridine	0.003154717	12.13090413	0.069811473	0.944411169	0.979634144	-5.94335271

						7
Acetyl-N-formyl-5-methoxykynurenamine	0.011758637	18.45098602	0.069703983	0.944496621	0.979634144	-5.943359745
3,4,5-trihydroxy-6-{2-[(3-methylbut-2-enoyl)oxy]-2-{9-[(3-methylbut-2-enoyl...	-0.00228836	13.42197093	-0.068190915	0.945699539	0.980152534	-5.943457532
6""-Malonylapiin	-0.004197236	15.85828258	-0.065701563	0.947678893	0.981474277	-5.943613744
Allolithocholic acid	0.006880955	15.281853	0.064576906	0.948573247	0.9816712	-5.943682414
O-Isopentenylhalfordinol	0.005234945	13.26900627	0.062703821	0.950062912	0.981880947	-5.943794151
Amoxicillin	0.002893538	12.7632213	0.062550764	0.950184647	0.981880947	-5.943803136

C19:2	-0.002890369	13.98692185	-0.059895201	0.952296938	0.982650914	-5.943955532
(R)-3-Hydroxy-5-phenylpentanoic acid	0.007455707	14.21625029	0.058929199	0.9530654	0.982650914	-5.94400933
10-Nitrolinoleic acid; Dapiprazole	-0.002222301	12.86224324	-0.057397938	0.954283621	0.982650914	-5.944092814
5-Methyl-3-isoxazolyl sulfate	-0.002387209	11.94747773	-0.056683401	0.954852121	0.982650914	-5.944131019
10-Hydroxymyristic acid methyl ester	0.002192467	13.58619342	0.056054455	0.955352541	0.982650914	-5.944164251
Chondroitin 4-sulfate	0.002744144	13.39265853	0.055863241	0.955504684	0.982650914	-5.944174281
5-Hydroxymethyl-4-methyluracil	-0.003470719	13.88757643	-0.05506509	0.956139761	0.982650914	-5.94421577

			5			6
Gabapentin	0.004143257	12.38358203	0.054152668	0.956865804	0.982650914	-5.944262482
4-Hydroxy-17beta-estradiol-2-S-glutathione	0.002285903	13.31457574	0.053639717	0.957273989	0.982650914	-5.944288396
3,4,5-trihydroxy-6-{[1-(4-methoxyphenyl)pentan-3-yl]oxy}oxane-2-carboxylic ...	-0.011141221	19.45853239	-0.050651178	0.959652366	0.983407613	-5.944434473
C21:5	0.002601058	13.79746674	0.050439956	0.959820477	0.983407613	-5.944444481
Nicotinic acid adenine dinucleotide	0.001505729	13.47731214	0.048719343	0.961189976	0.983407613	-5.944524445
4-Methoxycinnamic acid	0.00198067	13.5474782	0.048697192	0.961207608	0.983407613	-5.944525456

5-Hydroxymethyluracil	0.001256856	12.43886455	0.048031957	0.961737124	0.983407613	-5.944555615
6-Mercaptopurine ribonucleoside 5''-diphosphate	0.001242799	13.78556863	0.047395323	0.962243891	0.983407613	-5.944584088
Carnitine	-0.002721129	11.589064	-0.045737337	0.963563736	0.984035053	-5.944656458
N-Desmethylvenlafaxine	0.001693888	12.24653339	0.04384469	0.965070506	0.984852332	-5.944735922
Sorbitan palmitate	0.001040957	12.81049638	0.040957184	0.96736954	0.985157061	-5.944850687
Xanthoplanine	-0.004442314	16.73731352	-0.040807822	0.96748847	0.985157061	-5.944856411
Beauvericin	-0.001822725	13.40357073	-	0.9684510	0.985157061	-

			0.039598939	72		5.944901968
L-beta-aspartyl-L-alanine	0.002367033	14.89521924	0.038915282	0.968995471	0.985157061	-5.944927125
2,5-Dihydro-4,5-dimethyl-2-(2-methylpropyl)thiazole	-0.00358093	11.80333478	-0.037965436	0.969751861	0.985157061	-5.944961351
11-beta-Hydroxyandrosterone-3-glucuronide	-0.002770976	14.5811862	-0.036966213	0.970547601	0.985157061	-5.944996443
O-phosphonato-L-homoserine(2-)	-0.001276599	13.22052429	-0.03650093	0.970918143	0.985157061	-5.945012464
Orotidine	0.002895478	14.18841495	0.035933	0.971370444	0.985157061	-5.945031744
Myricanol 5-glucoside	0.00097674	13.75200021	0.034175974	0.972769786	0.985157061	-5.94508947

						8
10,11-dihydro-20-trihydroxy-leukotriene B4	0.001655633	14.01300587	0.033693398	0.973154139	0.985157061	-5.945104829
N-Gluconyl ethanolamine; Dihydrobiopterin	0.003174162	14.41478984	0.031946237	0.974545734	0.985157061	-5.945158579
Erythro-5-hydroxy-L-lysinium(1+)	0.004945025	13.25893315	0.031684626	0.974754111	0.985157061	-5.945166381
Zearalenone 4-sulfate	-0.001090306	13.15818258	-0.031533105	0.974874801	0.985157061	-5.94517087
Disinomenine	-0.00090533	13.59724322	-0.029731886	0.976309553	0.985157061	-5.94522259
4-Hydroxypropofol	0.003773743	13.74148534	0.028628942	0.977188135	0.985157061	-5.945252759

Hydroxyadipate; (-)-1-Methylpropyl 1-propenyl disulfide	0.002180133	16.02052716	0.028466233	0.977317749	0.985157061	-5.945257113
3,5,7-Trihydroxy-4''-methoxy-8-prenylflavone 3-[rhamnosyl-(1->6)-galactosid...	-0.001371393	13.60556014	-0.028384038	0.977383225	0.985157061	-5.945259303
cis-4-Decenedioic acid	0.001423309	13.79075269	0.024684739	0.980330229	0.98741354	-5.945351314
Allyl isothiocyanate	-0.00057015	11.86868995	-0.020993271	0.983271263	0.989660752	-5.945430344
(alpha-keto-dimethyl-delta-N,N-Dimethylguanidynol) valeric acid	0.000939507	12.40601736	0.020049966	0.984022843	0.989702629	-5.945448489
Isorhamnetin 3-(6''''-malonylglucoside)	-0.000608679	14.63915097	-0.018873456	0.984960225	0.98993121	-5.945469952
(E)-4-(Trimethylammonio)but-2-enoate	-0.000591376	12.52108782	-	0.9871129	0.99137998	-

			0.016171802	21		5.945514328
Cymorcin diglucoside	-0.000526042	13.46377066	-0.014284644	0.988616661	0.991753418	-5.945541266
3-Methoxybenzyl alcohol	-0.001211852	13.4541631	-0.011997782	0.990438955	0.991753418	-5.945569436
C15:0	0.000772758	16.46275922	0.011947649	0.990478899	0.991753418	-5.945569999
(S)-2,3,4,5-Tetrahydropyridine-2-carboxylate	0.000687493	12.32923199	0.011904038	0.990513651	0.991753418	-5.945570486
Cyclobrassinone	-0.001618644	16.54086155	-0.011241039	0.991041973	0.991753418	-5.945577678
Hydroxyprolyl-Isoleucine	0.00067824	14.74220658	0.0081207	0.993528518	0.993528518	-5.945605990

7. Πίνακας 7: Μεταβολίτες που διαφοροποιούνται ανάμεσα σε ασθενείς με σύνδρομο ενεργοποίησης μακροφάγων (MALS) και σε ασθενείς με μη ταξινομημένη κατάσταση

Metabolites	logFC	AveExpr	t	P-value	Adjusted P-value	B

Ο Πίνακας 6 παρουσιάζει τις τιμές που λαμβάνονται μέσω στατιστικής επεξεργασίας δεδομένων που εξάγονται από την αξιολόγηση των διαφορών στις αναλύσεις συγκέντρωσης μεταβολιτών μεταξύ δύο ομάδων ασθενών, δηλαδή MALS και Ανοσοπαράλυση. Αυτά τα αποτελέσματα είναι σημαντικά καθώς παρέχουν πολύτιμες πληροφορίες σχετικά με τις διαφορές στα επίπεδα συγκέντρωσης μεταβολιτών μεταξύ των προαναφερθεισών ομάδων ασθενών. Τα ευρήματα αυτής της μελέτης μπορούν ενδεχομένως να συμβάλουν στην ανάπτυξη αποτελεσματικών σχεδίων θεραπείας για άτομα που πάσχουν από παρόμοιες καταστάσεις.

MALS: σύνδρομο ενεργοποίησης μακροφάγων

Homovanillic acid	0.805521948	16.07956484	7.590615687	1.07E-12	**1.49E-09**	18.34615533
Thiothixene	0.515029081	13.25658427	6.772327933	1.29E-10	**7.20E-08**	13.78626717
Cortisol 21-sulfate	0.648595185	14.66918907	6.739719431	1.55E-10	**7.20E-08**	13.61108142
Salsoline-1-carboxylate	0.642654791	13.88482656	6.556393829	4.32E-10	**1.51E-07**	12.63617102
3-Methoxy-4-hydroxyphenylethyleneglycol sulfate	0.621695311	14.5815457	6.512733275	5.50E-10	**1.53E-07**	12.40653115
4-Aminohippuric acid	0.414130931	13.63093899	6.102047882	5.09E-09	**1.18E-06**	10.29635303
PA(8:0/16:0)	-0.272048303	15.51333386	-6.005171095	8.48E-09	**1.69E-06**	9.812186738
3-Methyleneoxindole	0.462519525	16.04855505	5.909980964	1.39E-08	**2.43E-06**	9.341695013
(3R,2'S)-Myxol 2'-alpha-L-fucoside	-0.177956227	13.89540111	-5.78795677	2.61E-08	**4.05E-06**	8.746316932

			3			
PC(22:4(7Z,10Z,13Z,16Z)/22:6(4Z,7Z,10Z,13Z,16Z,19Z))	-0.228983711	14.79242561	-5.732587963	3.47E-08	**4.83E-06**	8.479077928
4-Acetamidobutanoate	0.375305827	14.18530563	5.55169727	8.62E-08	**1.00E-05**	7.618948919
LysoPC(15:0)	-0.302444381	19.42502296	-5.555690095	8.45E-08	**1.00E-05**	7.637717951
2-Hydroxyestradiol-3-methyl ether	0.360152383	13.41651312	5.522419806	9.97E-08	**1.07E-05**	7.481626945
Hippurate	0.757458188	16.7750628	5.475572503	1.26E-07	**1.25E-05**	7.26300768
Carnosol	0.410783394	15.26626786	5.247486234	3.81E-07	**3.54E-05**	6.218480811
beta-D-Galactosyl-beta-1,4-N-acetyl-D-glucosaminylglycopeptide	-0.129288535	13.79696292	-5.157924983	5.83E-07	**5.08E-05**	5.817520538
Inodxyl glucuronide	0.418896275	13.12576536	5.09776897	7.74E-07	**6.35E-05**	5.551171292
Hypaconitine	-0.184642924	13.802293	-	9.18E-07	**6.73E-05**	5.391148491

			5.061363305			
PC(DiMe(11,3)/MonoMe(11,5))	-0.192628119	14.31406233	-5.068162745	8.89E-07	**6.73E-05**	5.420968539
Arginyl-Cysteine	0.305612631	13.37852023	5.038528726	1.02E-06	**7.12E-05**	5.291230324
Coumarate	0.313074163	14.15080155	5.020512367	1.11E-06	**7.37E-05**	5.212642455
PC(14:1(9Z)/22:2(13Z,16Z))	-0.199256194	15.42934488	-5.007767095	1.18E-06	**7.46E-05**	5.157179156
PG(a-13:0/i-22:0)	-0.241563632	16.55862372	-4.951810327	1.52E-06	**9.24E-05**	4.914972648
2-Phenylacetamide	0.597310352	14.52207622	4.836027893	2.58E-06	**0.000150031**	4.420593897
Sulpyrine	0.277721046	13.61326411	4.801284966	3.02E-06	**0.000168427**	4.274046365

Tetradecanoyl-CoA	-0.102186238	13.53066177	-4.783808607	3.27E-06	**0.000175158**	4.200646951
Soyasaponin II	-0.159253496	14.053984	-4.729145598	4.17E-06	**0.000215257**	3.972442181
Quinquenoside L1	-0.151540974	14.25511326	-4.695161504	4.85E-06	**0.000225217**	3.831623139
Zeaxanthin diglucoside	-0.180764869	13.95828331	-4.696147227	4.83E-06	**0.000225217**	3.835696202
X-206	-0.228293968	15.60574715	-4.703472477	4.67E-06	**0.000225217**	3.86598602
Cyclotricuspidoside C	-0.134206081	13.84813746	-4.670583736	5.40E-06	**0.000242909**	3.73028816
CDP-DG(a-13:0/i-22:0)	-0.117673671	14.06815792	-	5.82E-06	**0.000253559**	3.660525887

			4.653603071			
PS(DiMe(11,5)/DiMe(13,5))	-0.142814557	14.19590642	-4.645895196	6.02E-06	**0.000254334**	3.628926807
4-Hydroxyphenylpyruvic acid	0.209876475	13.26040757	4.599791939	7.36E-06	**0.000293096**	3.440804906
Pelargonidin 3-sophoroside 5-glucoside	-0.157991897	13.96985752	-4.593490326	7.57E-06	**0.000293096**	3.415209268
PA(15:0/20:3(5Z,8Z,11Z))	-0.208286014	14.0688724	-4.601076102	7.32E-06	**0.000293096**	3.446024346
Hericene A	-0.169253358	13.48649099	-4.55064051	9.11E-06	**0.00034337**	3.24191788
Trandolaprilat	0.267874997	14.54012712	4.538931841	9.59E-06	**0.000351659**	3.194795586
Norepinephrine sulfate	0.393882323	13.62922234	4.51265631	1.07E-05	**0.000383642**	3.089407717
Asparagoside F	-0.115837688	13.9039025	-	1.15E-05	**0.000401681**	3.022979814

			4.496030113			
beta-Damascenone	-0.174415656	12.75399533	-4.482416257	1.22E-05	**0.000415372**	2.96873645
10,12-Tritriacontanedione	-0.152100335	13.06772743	-4.47545198	1.26E-05	**0.000417717**	2.941039811
LPA(a-25:0/0:0)	-0.155001313	14.18620033	-4.464632225	1.32E-05	**0.000427258**	2.898080002
Sulfoacetyl-CoA	-0.189433197	13.7952077	-4.4588882	1.35E-05	**0.000427882**	2.875307963
Glyoxylic acid	0.25368771	13.34402584	4.40993135	1.66E-05	**0.000514809**	2.682196433
Trihexosylceramide (d18:1/12:0)	-0.119578903	14.00191433	-4.392082641	1.79E-05	**0.000542948**	2.612227975
PE(22:4(7Z,10Z,13Z,16Z)/P-18:1(11Z))	-0.195596333	19.2610386	-4.358614959	2.06E-05	**0.000611487**	2.481662855
6-(2-amino-2-carboxyethyl)-4-hydroxybenzothiazole	0.286272877	12.71863605	4.34850073	2.15E-05	**0.00061431**	2.442367332

			6			
PA(16:0/22:6(4Z,7Z,10Z,13Z,16Z,19Z))	-0.122796265	13.9628542	-4.347540228	2.16E-05	**0.00061431**	2.438639519
Hexuronate	0.39690796	14.9004789	4.289195076	2.75E-05	**0.000752083**	2.213477853
PS(20:2(11Z,14Z)/24:1(15Z))	-0.191097628	14.7390644	-4.289842365	2.74E-05	**0.000752083**	2.215961966
Gein	0.180439546	13.34779126	4.269052928	2.99E-05	**0.000757811**	2.136333843
Carbamoyl phosphate	-0.084814322	12.62672315	-4.272080228	2.95E-05	**0.000757811**	2.147909033
Mycothione	-0.096958408	13.64547722	-4.277152484	2.89E-05	**0.000757811**	2.167318638
gamma2-Solamarine	-0.118828772	13.50086941	-4.27908243	2.87E-05	**0.000757811**	2.174708867

			5			
1-(Isothiocyanatomethyl)-4-methoxybenzene	0.212981376	12.90103923	4.263784958	3.06E-05	**0.000760594**	2.116207526
N-tert-Butyloxycarbonyl-deacetyl-leupeptin	-0.144761185	13.97392544	-4.232533402	3.47E-05	**0.000849481**	1.997237135
Acetylornithine	-0.205005414	15.20158176	-4.188259259	4.16E-05	**0.000999919**	1.829945111
18-Oxocortisol	0.282218177	13.88589821	4.174376747	4.40E-05	**0.001022553**	1.777793146
Vindesine	-0.114933426	13.6685877	-4.178356894	4.33E-05	**0.001022553**	1.792730366
L,L-Cyclo(leucylprolyl)	-0.166195142	13.17750409	-4.168802921	4.50E-05	**0.001028736**	1.756895055
6-Dehydrotestosterone glucuronide	0.463526777	13.25615276	4.160326332	4.66E-05	**0.001047424**	1.725158543

Triose	0.22124392	13.50338412	4.102115834	5.89E-05	**0.001302388**	1.508687801
PS(15:0/20:4(5Z,8Z,11Z,14Z))	-0.140282701	14.72134394	-4.066292169	6.79E-05	**0.00147866**	1.376749644
LysoPE(0:0/16:0)	-0.224898035	16.01257959	-4.056084045	7.07E-05	**0.001516064**	1.339332724
Metixene	0.636731406	13.52630367	4.028443167	7.89E-05	**0.00161645**	1.238418485
Magnoloside C	-0.102693927	13.58394577	-4.02965638	7.85E-05	**0.00161645**	1.24283551
Riccionidin A	-0.121045162	17.0256228	-4.029709138	7.85E-05	**0.00161645**	1.243027616
Malate	0.309516302	14.66023168	4.022214227	8.08E-05	**0.001620744**	1.215758177
1,8-Diazacyclotetradecane-2,9-dione	-0.102663372	13.68645735	-4.02041009	8.14E-05	**0.001620744**	1.209200493

			8			
alpha-Ionol O-[arabinosyl-(1->6)-glucoside]	0.214358592	13.310217	4.008991729	8.51E-05	**0.001625495**	1.16775484
Methyl-Lys	-0.191304079	15.43052874	-4.012339283	8.40E-05	**0.001625495**	1.179895178
CDP-DG(18:2(9Z,11Z)/a-15:0)	-0.129222247	15.05783829	-4.013766268	8.35E-05	**0.001625495**	1.185072946
MG(P-18:0e/0:0/0:0)	-0.276362591	13.24662924	-4.004085428	8.68E-05	**0.001634711**	1.149977092
Tragopogonsaponin L	-0.136180099	14.04889856	-3.994460579	9.01E-05	**0.001652894**	1.115155802
4-(1,1,3,3-Tetramethylbutyl)-phenol	-0.198976509	14.55043911	-3.996459559	8.94E-05	**0.001652894**	1.122381943
Nicotinate	0.189997219	13.84104052	3.97316589	9.79E-05	**0.001773023**	1.038368792

			6			
Kinetensin 1-7	-0.153392689	14.35958591	-3.959442825	0.000103314	**0.001823032**	0.989070172
PIP2(16:0/20:4(5Z,8Z,11Z,14Z))	-0.09320449	13.82327986	-3.961678318	0.000102419	**0.001823032**	0.997090995
Goniodomin A	-0.119898794	14.08852483	-3.947554521	0.000108199	**0.00188536**	0.946480638
Isofucosterol 3-O-[6-O-Octadecanoyl-b-D-glucopyranoside]	-0.144261316	14.68314665	-3.941094262	0.000110944	**0.001909336**	0.923382888
PE(14:0/14:1(9Z))	-0.101693466	13.10593253	-3.933932444	0.000114065	**0.001939111**	0.897814669
Arachidonic acid	-0.31276331	18.52631737	-3.921437868	0.000119711	**0.002010572**	0.853303515

3,6-Dihydro-4-(4-methyl-3-pentenyl)-1,2-dithiin	-0.174079649	14.88910838	-3.909160458	0.000125517	**0.002082982**	0.80968429
Glycogen	0.177897587	13.77449914	3.898019571	0.000131015	**0.002127406**	0.770204518
Methacycline	0.193011284	13.47587155	3.897338734	0.000131359	**0.002127406**	0.767794985
(+/-)-3-[(2-methyl-3-furyl)thio]-2-butanone	0.305274521	13.43692261	3.894553879	0.000132772	**0.002127406**	0.75794294
xi-7-Hydroxyhexadecanedioic acid	0.157058772	13.16859233	3.853099189	0.000155593	**0.002464734**	0.612004298
Ethyl glucuronide	0.278548537	13.66977717	3.842239125	0.00016216	**0.002505835**	0.573994569
Prinomide	0.191290826	12.58577164	3.837021601	0.000165407	**0.002505835**	0.55576639
Venoterpine	0.246086436	12.80212903	3.83422087	0.000167175	**0.002505835**	0.545990447
Succinyl sulfathiazole	-0.181104921	16.91882425	-3.83478610	0.000166817	**0.002505835**	0.547962902

			5			
Salicifoline	-0.120501903	12.20889903	-3.839521225	0.000163844	**0.002505835**	0.564496524
1-(beta-D-Glucopyranosyloxy)-3-octanone	0.455003174	13.41981774	3.822687455	0.000174649	**0.002567808**	0.505798059
Topotecan	0.355888385	12.7020252	3.822165889	0.000174994	**0.002567808**	0.503982943
Tyrosine	0.331940176	17.80671021	3.809410882	0.000183643	**0.002630979**	0.459660571
Annonisin	-0.109174348	13.39633041	-3.807517346	0.000184961	**0.002630979**	0.453091645
PG(18:0/20:3(5Z,8Z,11Z))	-0.143716381	15.90558454	-3.81213613	0.000181762	**0.002630979**	0.469119774
Hericenone C	-0.101861778	13.14737898	-3.801862601	0.000188951	**0.002660579**	0.433491412
L-cis-Cyclo(aspartylphenylalanyl)	0.214925658	13.99936179	3.79590717	0.000193	**0.002685825**	0.412876229

			5	24		
Toluene-cis-dihydrodiol	-0.114734963	12.395554	-3.794049708	0.000194597	**0.002685825**	0.406452184
4-Amino-1-piperidinecarboxylic acid	-0.204584203	17.2801529	-3.770199828	0.000212837	**0.002880538**	0.324209566
Mabioside E	-0.099009118	13.85215791	-3.771543067	0.000211769	**0.002880538**	0.328829568
PS(20:3(5Z,8Z,11Z)/24:1(15Z))	-0.149255947	14.39540455	-3.755999726	0.000224454	**0.00297989**	0.275456412
Punigluconin	-0.087716842	14.42549721	-3.756576746	0.00022397	**0.00297989**	0.277434379
CDP-DG(16:1(9Z)/20:4(5Z,8Z,11Z,14Z))	-0.095818365	13.92154919	-3.737147658	0.000240804	**0.003166795**	0.210978649

2-Methylglutaric acid	0.166253608	14.8031164	3.727801592	0.00024932	**0.00320816**	0.179117891
3''-Ketolactose	0.186487767	13.65807647	3.725753169	0.000251225	**0.00320816**	0.172144087
Saccharin	0.402329166	14.92072443	3.724471739	0.000252423	**0.00320816**	0.167783189
Pyrithione zinc	0.192396062	13.19308605	3.723692192	0.000253155	**0.00320816**	0.165130913
Serinyl-Valine	-0.175819514	15.89691594	-3.719761057	0.000256875	**0.003225975**	0.151763259
DG(14:1(9Z)/22:2(13Z,16Z)/0:0)	-0.110313011	13.546677	-3.709447424	0.000266881	**0.003321716**	0.11675066
Phosphatidylinositol-3,4,5-trisphosphate	-0.132818007	14.50517938	-3.696236983	0.000280236	**0.003457074**	0.072027807
Phenyl acetate	0.107634811	15.70146442	3.686923368	0.000290028	**0.003515648**	0.040581004

TG(16:0/16:0/20:4(5Z,8Z,11Z,14Z))	-0.117947194	14.13323698	-3.687716002	0.000289183	**0.003515648**	0.043254583
Tetrahydroaldosterone-3-glucuronide	0.351878962	15.36182924	3.681333449	0.00029606	**0.00355782**	0.021740271
Kni 102	-0.107894	13.37296486	-3.667138797	0.000311911	**0.003716272**	-0.025990333
2,4-Di-tert-butylphenol	-0.114797516	13.10947791	-3.658468867	0.000321983	**0.003803764**	-0.055064331
PA(15:0/20:0)	-0.110729808	13.93613272	-3.65525528	0.000325793	**0.003816438**	-0.065825575
4-Pyridoxate	0.405129892	16.00602912	3.64574147	0.000337325	**0.003897996**	-0.097635663
Uvaricin	-0.114397236	13.68635763	-3.644912457	0.000338348	**0.003897996**	-0.10040409
PIP2(16:0/22:3(10Z,13Z,16Z))	-0.100083746	13.95204644	-	0.000348	**0.003977152**	-0.126308054

			3.637147422	072		
LPA(0:0/16:0)	-0.173553378	15.51733045	-3.618501173	0.000372508	**0.004187712**	-0.188313698
[3-(6-hydroxy-4-{5-[(E)-2-[6-hydroxy-3-(3-hydroxyphenyl)-2-(4-hydroxyphenyl...	-0.087169156	13.82673773	-3.620278443	0.000370111	**0.004187712**	-0.182415674
Carnosic acid	0.199774791	14.5416057	3.613534435	0.000379284	**0.00422978**	-0.204782782
TG(18:3(9Z,12Z,15Z)/18:2(9Z,12Z)/18:3(9Z,12Z,15Z))	-0.123331761	13.98541045	-3.609138562	0.000385379	**0.004263632**	-0.219342383
N-Acetylglutamine	-0.244772677	17.71207161	-3.580882005	0.000426806	**0.004684787**	-0.312559304
Arginyl-Arginine	0.129234778	13.78307779	3.575491823	0.000435 17	**0.004697802**	-0.330268053
Alliospiroside D	-0.132644599	13.97836932	-	0.000438	**0.004697802**	-0.336394007

			3.573625542	102		
Biotinyl-CoA	-0.073617407	13.48908317	-3.576920069	0.000432939	**0.004697802**	-0.325578022
Lactate	0.311637098	19.78878866	3.568697961	0.000445932	**0.004745262**	-0.352554961
Oxytocin	-0.081101991	13.74042338	-3.563011248	0.000455132	**0.004806469**	-0.37118125
8-Oxodeoxycoformycin	0.490473716	13.76801221	3.551260338	0.000474 71	**0.004975536**	-0.409587238
Nootkatol	-0.095510181	13.42476709	-3.527998399	0.000515824	**0.005366106**	-0.485285171
5a-Cholesta-8,24-dien-3-one	-0.180658138	12.87403918	-3.521527064	0.000527842	**0.005450459**	-0.506265796
24-Hydroxycalcitriol	-0.161385223	14.95436513	-3.51619988	0.000537932	**0.005513807**	-0.523511443

			2			
Maleimide	-0.125967233	12.88464554	-3.507659368	0.000554488	**0.005642013**	-0.551111419
PC(18:4(6Z,9Z,12Z,15Z)/P-16:0)	-0.18124775	16.2987933	-3.505221206	0.000559301	**0.005649749**	-0.558979821
Methionine	0.226224766	14.46062011	3.502451756	0.000564816	**0.00566441**	-0.56791148
N-lactoyl-Tryptophan	0.352430504	14.00212326	3.496604712	0.000576627	**0.005741554**	-0.586748068
CMP	0.14006277	12.79885821	3.489518043	0.000591252	**0.00584543**	-0.609540836
Tyramine	0.948408918	14.43612528	3.483048547	0.000604907	**0.005921982**	-0.630312837
Cerulenin	0.279098244	12.84899067	3.481839434	0.000607492	**0.005921982**	-0.634191224
Estradiol	0.165560762	13.11498807	3.478259617	0.000615205	**0.005955523**	-0.645666952

2-Arachidonylglycerol	-0.143214685	14.02342432	-3.476137665	0.00061982	**0.00595882**	-0.652464301
2-Vinylthiophene	-0.073811623	12.42842475	-3.46344323	0.000648114	**0.006188161**	-0.693052163
Cevimeline	0.483108055	12.71491065	3.460407468	0.000655058	**0.006211909**	-0.702738874
N-Nonanoylglycine	-0.116513775	12.6966528	-3.414358654	0.000769302	**0.007245993**	-0.848748859
Novapikromyin	-0.096300783	13.6093088	-3.405878077	0.000792275	**0.007412296**	-0.875449027
Saponin H	-0.128032611	13.68256116	-3.402837689	0.000800667	**0.007440864**	-0.885006954
6-[4-(5,7-dihydroxy-6-{4-hydroxy-6-methyl-5-oxo-3-[(3,4,5-trihydroxy-6-meth...	-0.083006035	13.91226351	-3.398206391	0.000813609	**0.007511064**	-0.899551537

PE(22:6(4Z,7Z,10Z,13Z,16Z,19Z)/P-18:1(11Z))	-0.172913721	16.02345542	-3.384281229	0.000853709	**0.007829414**	-0.94317711
Pentoxifylline	0.239524284	13.33002078	3.381551496	0.000861784	**0.007851806**	-0.951710251
TG(14:0/22:6(4Z,7Z,10Z,13Z,16Z,19Z)/o-18:0)	-0.110403087	13.87977972	-3.375731135	0.000879238	**0.007958819**	-0.969884176
(1R,2R)-3-[(1,2-Dihydro-2-hydroxy-1-naphthalenyl)thio]-2-oxopropanoic acid	0.166453136	14.35069479	3.369546913	0.000898145	**0.007974617**	-0.98916363
Dehydroalanine	-0.180467463	14.69568418	-3.369808781	0.000897337	**0.007974617**	-0.988347889
PE(14:0/22:5(4Z,7Z,10Z,13Z,16Z))	-0.126108552	14.70941682	-3.370621125	0.000894834	**0.007974617**	-0.985817012
Protobassic acid	-0.133110157	14.13744563	-3.357862251	0.000934091	**0.008248507**	-1.025504643

Edetic Acid	-0.209404358	22.77525126	-3.350956175	0.000957294	**0.008288621**	-1.046930514
3-O-Sulfogalactosylceramide (d18:1/20:0)	-0.182421501	15.22482005	-3.351265159	0.000956282	**0.008288621**	-1.045972744
Trigoforin	-0.246509714	17.49691148	-3.352217522	0.000953169	**0.008288621**	-1.043020171
Epinephrine sulfate	0.236359344	14.12001891	3.341279494	0.000989501	**0.008514594**	-1.076885744
3-Aminobutyrate	-0.132760672	13.21444863	-3.330043077	0.001028166	**0.008793026**	-1.111572052
Eremopetasitenin B2	0.471511628	13.80171833	3.321214677	0.001059528	**0.009005987**	-1.138751536
Phenylacetaldehyde	0.160542448	15.24023414	3.309708326	0.001101742	**0.009308049**	-1.174078442
2-Benzoxazolol	0.25286881	13.26691532	3.30454121	0.001121	**0.009415411**	-1.189906801

			3	204		
Lumequoylacetone	-0.109248431	12.73702475	-3.293755049	0.001162866	**0.009706801**	-1.222876453
(3Z,6Z)-3,6-Nonadien-1-ol	-0.091837749	12.15926384	-3.284822904	0.001198454	**0.009944311**	-1.250105771
CE(5D5)	-0.1019114	13.37315802	-3.278241651	0.00122532	**0.010107078**	-1.270125994
24,25-Dihydroxyvitamin D	-0.15989172	14.62965832	-3.267161463	0.001271822	**0.010428937**	-1.303750517
Docosadienoate (22:2n6)	-0.117664567	14.57333737	-3.263668273	0.001286819	**0.010490206**	-1.31432992
Azelaic acid	-0.262477985	15.41099033	-3.260106839	0.001302278	**0.010554509**	-1.325105527

(±)-3-Hydroxynonanoic acid	-0.141209367	13.76815876	-3.254043649	0.001328995	**0.010708777**	-1.343426196
Tetrahydroharmol	0.335048083	13.64967134	3.24717912	0.001359856	**0.010866174**	-1.364131169
4-Amino-2-methyl-5-phosphomethylpyrimidine	-0.153524474	16.276183	-3.24624264	0.001364118	**0.010866174**	-1.366952756
SM(d18:1/22:1(13Z))	-0.130205145	14.87122283	-3.234917426	0.001416646	**0.011220479**	-1.401017248
1'-Hydroxy-gamma-carotene	-0.151942161	14.10935527	-3.2320895	0.001430052	**0.011262671**	-1.40950648
Mevalonate	0.160180867	14.23581904	3.230379675	0.001438215	**0.011263323**	-1.414636008
PE(14:0/22:6(4Z,7Z,10Z,13Z,16Z,19Z))	-0.122859162	14.00309645	-3.215942145	0.001508885	**0.011750758**	-1.457851483
1,4''-Bipiperidine-1''-carboxylic acid	-0.109877654	12.21893124	-3.21359274	0.001520685	**0.011776863**	-1.464867365

			5			
Alpha-CEHC	0.370050871	13.78934956	3.20844612	0.001546835	**0.011913196**	-1.480220279
C9:1	0.317841842	13.84610585	3.200350604	0.001588814	**0.012104385**	-1.504325093
Pratenol B	0.298781598	13.4154237	3.200310162	0.001589026	**0.012104385**	-1.504445372
(Z)-9-Cycloheptadecen-1-one	0.228007295	12.24149289	3.194431124	0.001620175	**0.012274584**	-1.521915846
SR 49498	0.264129131	13.66840222	3.192052199	0.001632939	**0.012304415**	-1.528976943
(R)-2-Methylimino-1-phenylpropan-1-ol	0.699304499	12.90908715	3.188094449	0.001654381	**0.01231852**	-1.540713764
DG(18:0/22:4(7Z,10Z,13Z,16Z)/0:0)	-0.096256517	13.89951635	-3.18682364	0.001661321	**0.01231852**	-1.544479595
Glutamylthreonine	-0.18569282	17.80463578	-3.187892116	0.001655484	**0.01231852**	-1.541313437
3,3''-Thiobispropanoic acid	0.2076448	14.73718088	3.17667221	0.001717	**0.01266944**	-1.574512921

			6	736		
Diethylene glycol	0.217631885	11.56326376	3.174222218	0.001731615	**0.012704585**	-1.581748344
Indolelactic acid	0.271745691	15.45963484	3.16954214	0.001758416	**0.012833674**	-1.595555685
C26:0	-0.151342685	13.99345804	-3.165422996	0.001782322	**0.012940399**	-1.607692888
Lasiodine A	-0.092758568	13.56139229	-3.159894609	0.001814 88	**0.013108508**	-1.623960025
Gamma-Tocopherol	-0.146658095	14.51565702	-3.154244013	0.001848725	**0.013284139**	-1.640560159
N-Acetylneuraminic acid	0.248474284	14.2976094	3.114886101	0.002101159	**0.014932197**	-1.755437361
a-Methyldopa mono-O-sulfate	0.116917227	12.83125327	3.112908667	0.002114646	**0.014932197**	-1.761174536
2,3-Dimethyl-2-cyclohexen-1-one	-0.114350762	12.32534188	-	0.002120	**0.014932197**	-1.763834698

			3.111991401	929		
PGP(18:0/18:2(9Z,12Z))	-0.153012421	15.57328035	-3.116053412	0.002093236	**0.014932197**	-1.752049064
Aminophenol	0.178737377	14.09907418	3.102218824	0.002188947	**0.015333632**	-1.792131937
Fumarate	0.198872893	12.94859268	3.092101176	0.002261485	**0.01576255**	-1.821343153
N-a-Acetylcitrulline; 5-Hydroxysebacate	0.17791844	13.81471336	3.083868007	0.002322142	**0.016104804**	-1.845049566
DG(14:1(9Z)/16:1(9Z)/0:0)	-0.136179339	14.32219399	-3.082173934	0.002334807	**0.016112483**	-1.849920312
5-Hydroxy-7-(4-hydroxy-3-methoxyphenyl)-1-phenyl-3-heptanone	0.133998364	14.29858206	3.065682382	0.002461477	**0.01682608**	-1.89720906
Methyl 3,4-dihydroxy-5-prenylbenzoate 3-glucoside	0.205820429	14.29371504	3.065571117	0.002462353	**0.01682608**	-1.897527323
Cortolone-3-glucuronide	0.438631294	16.08876655	3.0595023	0.002510	**0.017071779**	-1.914870656

				556		
(R)-3-Hydroxy-hexadecanoic acid	-0.142978456	16.2474042	-3.047027783	0.002612379	**0.017677941**	-1.950421723
Tetraethylene glycol	0.185265703	12.11067735	3.041701458	0.002657002	**0.017893048**	-1.965560855
Hydantoin-5-propionic acid	0.207860811	13.98986123	3.037192963	0.002695321	**0.018063835**	-1.978356577
3-Hydroxy-1-phenyl-1-eicosanone	-0.084967163	12.76791588	-3.034574123	0.002717812	**0.018127418**	-1.985781251
L-N-(1H-Indol-3-ylacetyl)glutamic acid	0.107838967	13.26135798	3.023246547	0.002817099	**0.018600055**	-2.017828757
Diosmin	-0.080866699	14.07393852	-3.021946782	0.002828703	**0.018600055**	-2.021499003
Callystatin A	-0.088586167	13.21479133	-3.023911041	0.002811184	**0.018600055**	-2.015951819

Isoleucyl-Isoleucine	-0.204483766	13.66650968	-3.011418333	0.002924326	**0.019138548**	-2.051175856
2-Hydroxymethylserine; Adenine	0.114966657	13.26484813	3.006862568	0.002966617	**0.019263479**	-2.063987998
Homodolicholide	-0.105590695	13.8005707	-3.006388196	0.002971053	**0.019263479**	-2.065321054
CE(18:1(9Z))	-0.073676514	13.02325115	-2.991049003	0.003117814	**0.020121446**	-2.108322766
13-L-Hydroperoxylinoleic acid	0.391960946	17.43011347	2.989486975	0.003133126	**0.020127088**	-2.112690453
Corchoroside A	-0.0809247	13.52794705	-2.984755536	0.003179931	**0.020334054**	-2.125907595
Secogalioside	0.114069536	13.4578397	2.982805503	0.003199407	**0.020365178**	-2.131349382
Orcinol	-0.205158497	15.49394883	-	0.003348	**0.021216786**	-2.171901996

			2.968236791	417		
Anthopleurine	0.293670849	12.48377992	2.965200342	0.003380264	**0.021232107**	-2.180331181
Glycylproline	-0.142978362	14.75707977	-2.965102347	0.003381297	**0.021232107**	-2.180603083
Ribothymidine	0.231967163	14.86691829	2.957756138	0.003459521	**0.021338818**	-2.200962851
Prostaglandin E2	-0.232884055	15.15396423	-2.958664973	0.003449755	**0.021338818**	-2.198446553
N6,N6,N6-Trimethyl-L-lysine	-0.211889889	13.60679048	-2.958794103	0.003448369	**0.021338818**	-2.198088974
Sulfaphenazole	-0.167840749	19.9732112	-2.959273442	0.003443 23	**0.021338818**	-2.196761485
2,3,4,7,8,9,15,22,23,28-decahydroxy-14-	-0.194855823	17.16646583	-	0.003633	**0.022311984**	-2.244566834

(hydroxymethyl)-13,25,32,35-tetraoxa...			2.941966407	3		
Methylthioglycolic acid	-0.080152192	11.42380618	-2.936292046	0.003697679	**0.022607741**	-2.260184522
Dopamine	0.199538	12.75496321	2.93442568	0.003719082	**0.0226393**	-2.265315319
Delavirdine	0.138840739	13.13170446	2.92880167	0.003784262	**0.022836628**	-2.280758097
Tuliposide B; Edetic Acid	-0.172128416	17.41603746	-2.929793138	0.003772696	**0.022836628**	-2.278037634
1-Methylnaphthalene	-0.164671064	12.58604989	-2.927289676	0.003801963	**0.022844553**	-2.284905192
Nb-Feruloyltryptamine	-0.153336089	16.65097294	-2.923675577	0.003844581	**0.023001484**	-2.294809969
S-Decyl GSH	0.150145019	13.01237279	2.92110521	0.003875	**0.023085334**	-2.301847462

				156		
Cinnamate	0.171060455	15.26049049	2.916605949	0.003929213	**0.023307758**	-2.314152452
BILA 2185BS	0.38228785	13.59433353	2.908884542	0.004023593	**0.023603664**	-2.335229044
Protoveratrine B	-0.137438265	14.59236943	-2.908374947	0.004029894	**0.023603664**	-2.336618243
7,8,8,12,13,21,22-heptahydroxy-19-(hydroxymethyl)-2,17,20,23-tetraoxapentac...	-0.086281736	13.99098894	-2.910586507	0.004002613	**0.023603664**	-2.330587719
3-Dehydroquinate; 5-(Methylthio)-2-[(methylthio)methyl]-2-pentenal	-0.2076299	16.4933483	-2.893056321	0.004223574	**0.024634567**	-2.378273662
PE(14:0/P-16:0)	-0.087963742	13.42300378	-2.888686324	0.004280364	**0.02465631**	-2.39011975
(-)-Nopol	-0.088369982	12.88890833	-2.89003382	0.004262778	**0.02465631**	-2.386468746

N(tele)-methylhistaminium; Sulcatone	-0.109882937	12.05527592	-2.890233397	0.00426018	**0.02465631**	-2.385927863
2-Octaprenylphenol	-0.127746559	14.5419358	-2.884268399	0.004338485	**0.024888264**	-2.402079008
2-Deoxystreptidine	0.233887116	14.07220607	2.873540348	0.004482633	**0.025609796**	-2.431049544
Aspartate	-0.128348546	14.66382797	-2.86923969	0.004541636	**0.025840983**	-2.442635327
L-2-Amino-4-methylenepentanedioic acid	-0.123524417	13.72405654	-2.863188155	0.004625861	**0.026213213**	-2.458910817
S-Inosyl-L-homocysteine	0.154307678	12.87678336	2.861628821	0.004647794	**0.026230867**	-2.463099489
Leucomycin V	-0.079343214	13.46621617	-2.855207875	0.004739108	**0.026531394**	-2.480325214
Bufotenin	-0.111860458	14.08971904	-	0.004729	**0.026531394**	-2.478464633

			2.855902054	158		
Terpendole I	0.110321233	13.29906305	2.847831994	0.00484602	**0.026938549**	-2.500068749
5''-Carboxy-gamma-chromanol	0.159518786	13.44830751	2.847057903	0.004857367	**0.026938549**	-2.502138082
Epothilone C	0.2210898	13.18775356	2.846210981	0.004869809	**0.026938549**	-2.504401515
4-ethylphenylsulfate	0.191717703	13.31855663	2.840925287	0.00494812	**0.027229687**	-2.518513706
2,3-Butanediol glucoside; Histidinyl-Proline	0.594436161	14.5967956	2.840029352	0.004961507	**0.027229687**	-2.520903352
[6]-Gingerdiol 3,5-diacetate	0.162328848	13.65015784	2.838005219	0.004991873	**0.027288904**	-2.526299572
Hydroxyglutarate	0.167724106	14.94213816	2.827282633	0.005155573	**0.028073709**	-2.554826121
PS(DiMe(11,3)/MonoMe(13,5))	-0.118355644	15.27648726	-2.819746347	0.005273537	**0.028604324**	-2.574816112

Hexadecanedioic acid	0.263233176	14.89972323	2.815989981	0.005333248	**0.02874544**	-2.584761462
Thien-2-ylacetate	-0.077165381	12.64996077	-2.815517868	0.005340795	**0.02874544**	-2.586010563
N-Acetyl-2,3-dihydro-1H-pyrrole	0.347060179	12.12711328	2.805749598	0.005499162	**0.02948397**	-2.611811654
Histidinol	-0.234877327	11.90791584	-2.802705609	0.005549378	**0.029639206**	-2.619834852
Naltriben	0.250053092	12.90285001	2.799131869	0.005608864	**0.029842584**	-2.629244062
3''-N-Acetyl-4''-O-(9-octadecenoyl)fusarochromanone	-0.089018576	13.61876882	-2.796972652	0.005645086	**0.029921101**	-2.634923629
Patellamide A	-0.081509945	13.89669186	-2.79478011	0.005682084	**0.030003123**	-2.640686705
2-Hydroxy-imipramine glucuronide	0.263089649	13.27058805	2.789790817	0.005767097	**0.030337108**	-2.653785433

Acamprosate	-0.190940475	14.66421918	-2.788053967	0.005796962	**0.030379567**	-2.658340219
1-Cyclohexyl-11-heneicosanone	-0.071016977	12.70958054	-2.779264664	0.005950256	**0.031066129**	-2.681349387
Musaroside	0.192444123	13.38188391	2.775545715	0.006016218	**0.031293315**	-2.691064824
11-Dehydrocorticosterone	0.192271702	12.99300383	2.771359465	0.006091263	**0.031500901**	-2.70198663
Hydroxyethylpromethazine	0.387272607	15.2104302	2.770801878	0.006101322	**0.031500901**	-2.703440209
1-Palmitoyl-2-(5-hydroxy-8-oxo-6-octenedioyl)-sn-glycero-3-phosphatidylcholine	-0.089517692	13.0738176	-2.765109375	0.006204886	**0.031917385**	-2.718264516
Penitrem D	0.23873716	13.51535098	2.759672477	0.006305285	**0.032314588**	-2.732396803
2-Hydroxymethylclavam	0.174897052	13.67619807	2.757435029	0.006347029	**0.032409371**	-2.738205179

NONOate; D-2-Hydroxyisocaproate	0.185624383	14.17863686	2.750994616	0.006468588	**0.032909531**	-2.754899998
Leonuridine	0.133475111	13.18627626	2.749089692	0.006504944	**0.032974154**	-2.759830998
N-Heptanoylglycine	-0.242397893	13.09388899	-2.743382584	0.006614978	**0.033289818**	-2.774585197
8,11,14-Eicosatrienoic acid	-0.21882734	16.91803372	-2.743387258	0.006614887	**0.033289818**	-2.774573124
Phenprocoumon	0.233121287	15.33103448	2.723119799	0.007019398	**0.03519799**	-2.826739302
Homodolichosterone	-0.091301638	13.79739956	-2.721209366	0.007058659	**0.035267996**	-2.831638019
Spinoside A	0.140420545	13.608581	2.715320246	0.007180938	**0.035691691**	-2.846718755
MG(0:0/22:4(7Z,10Z,13Z,16Z)/0:0)	-0.114329324	13.85274319	-2.71466471	0.007194667	**0.035691691**	-2.848395556

			2			
Zizyphine A	0.160666072	13.67413607	2.711803483	0.007254868	**0.035777034**	-2.855709933
1-(Methylthio)propyl propyl disulfide	0.169557198	13.78527611	2.711409181	0.007263 2	**0.035777034**	-2.856717355
Bimatoprost	0.152935671	12.80046091	2.709052941	0.007313169	**0.035896331**	-2.862734595
Anthranilate	0.105777397	13.41372425	2.693815752	0.007643879	**0.037208159**	-2.901529071
Endoxifen sulfate	0.088204468	12.85016591	2.693282742	0.007655688	**0.037208159**	-2.902882452
MG(0:0/20:3(11Z,14Z,17Z)/0:0)	-0.100828955	13.48177093	-2.693065617	0.007660503	**0.037208159**	-2.903433688
TG(20:4(5Z,8Z,11Z,14Z)/20:4(5Z,8Z,11Z,14Z)/22:6(4Z,7Z,10Z,13Z,16Z,19Z))	-0.083372795	13.83717127	-2.690480462	0.007718046	**0.037357485**	-2.909993698
Nitrosonornicotine	0.29192576	13.23607796	2.684613336	0.007850091	**0.037707227**	-2.924860188

(3S,5S)-Carbapenam-3-carboxylic acid	0.158694067	13.25433093	2.683672606	0.007871451	**0.037707227**	-2.92724106
Cyclohexenone	-0.070328443	12.53491938	-2.684840293	0.007844945	**0.037707227**	-2.924285671
PC(o-22:2(13Z,16Z)/22:3(10Z,13Z,16Z))	-0.097558796	14.10979149	-2.679255048	0.007972461	**0.03806031**	-2.93841096
Docosatrienoic acid	-0.114821307	14.30427421	-2.669046309	0.008210376	**0.039062335**	-2.964158449
Musabalbisiane A	0.068618459	13.03585823	2.665746126	0.008288645	**0.03930058**	-2.972462269
3-Methyldioxyindole	0.429945067	13.73463362	2.659450952	0.008439811	**0.039746947**	-2.988275446
Campesterol 6"-(9Z-octadecenoyl)-glucoside	-0.103635197	15.8608463	-2.659724155	0.008433199	**0.039746947**	-2.987589895
Lauroyl peroxide	-0.103414054	14.05626162	-	0.008647	**0.040587025**	-3.009515701

			2.650973355	307		
Asparagine	0.138451999	14.54507609	2.648246926	0.008715009	**0.040767523**	-3.016333216
2-Amino-4-oxo-4-alpha-hydroxy-6-(erythro-1'',2'',3''-trihydroxypropyl)-5,6,...	0.293865921	13.4696045	2.643791586	0.008826669	**0.041151759**	-3.027459843
Rifamycin Z	-0.097811371	13.40938942	-2.631744628	0.009135065	**0.042447602**	-3.057458005
Acetaldehyde diisoamyl acetal	0.113935241	11.71750479	2.626316745	0.009277156	**0.042772061**	-3.070932208
Dihydroxy-Val	0.094109677	12.86905008	2.62511942	0.009308765	**0.042772061**	-3.073900958
1,4-Dimethoxyglucobrassicin	0.187527816	13.23667862	2.623534624	0.009350753	**0.042772061**	-3.077828492
Irbesartan	0.613016328	17.26678083	2.623250221	0.009358306	**0.042772061**	-3.078533083
Pentanoic acid	-0.117137436	13.13225969	-2.62420817	0.009332887	**0.042772061**	-3.076159529

			5			
6-methoxy-3-methyl-2-all-trans-decaprenyl-1,4-benzoquinol	-0.137053222	15.17150494	-2.604821248	0.009859574	**0.044915839**	-3.124037529
2-Dodecylbenzenesulfonic acid	0.289241326	15.48977369	2.603055474	0.009908847	**0.044993264**	-3.128381803
Aromatic aldehyde	-0.13488505	12.16984908	-2.587186962	0.010361652	**0.04689657**	-3.167298968
Linocinnamarin	0.132548211	13.29755338	2.585995254	0.010396395	**0.046901536**	-3.170212621
6-Carboxyhexanoyl-CoA	-0.102629972	13.52101355	-2.573560917	0.010765177	**0.048408572**	-3.200538859
(4-{[2-methoxy-4-(prop-2-en-1-yl)phenoxy]carbonyl}phenyl)oxidanesulfonic acid	0.076332153	12.91239441	2.570713583	0.010851256	**0.048638747**	-3.207463998
Gentisic acid	-0.137962469	14.16606283	-2.561962134	0.011119693	**0.049682219**	-3.228703885

Dehydropipernonaline	0.116017626	13.27393899	2.556383016	0.01129391	0.050108	-3.242209066
2-Oxoglutaramate	0.134278926	12.39980927	2.555511286	0.011321351	0.050108	-3.244316743
2-Methylacetophenone	-0.096028585	13.90677073	-2.555464469	0.011322826	0.050108	-3.244429919
Aciclovir	-0.164291903	15.59363214	-2.552721089	0.011409583	0.050332149	-3.251058374
3-(O-Geranylgeranyl)-sn-glycerol 1-phosphate	0.142703684	13.24792861	2.547400827	0.011579527	0.050809987	-3.263893981
Endoxifen O-glucuronide	0.302594438	14.43496721	2.547050373	0.011590801	0.050809987	-3.264738601
alpha-L-Rhamnopyranosyl-(1->3)-alpha-D-galactopyranosyl-(1->3)-L-fucose	0.146958353	13.16705054	2.544493253	0.011673356	0.051011468	-3.270898153
Cholesterol	-0.232290939	12.95908799	-2.534347683	0.012006102	0.052301584	-3.295279479

Histamine	0.113176789	13.32147068	2.531065379	0.012115552	0.052609121	-3.303147785
N-acetyltryptophan	0.526130867	15.25470022	2.529972885	0.012152179	0.052609121	-3.30576458
Quinolinate	0.110095022	15.12072159	2.524889118	0.012323919	0.053102494	-3.317927518
Inosine	0.246220169	14.42846913	2.524347869	0.01234233	0.053102494	-3.319221105
O-phosphonato-L-homoserine(2-)	-0.090947119	13.22052429	-2.52156038	0.012437754	0.05334748	-3.3258791
Griseorhodin A	0.280885695	13.56874486	2.518660807	0.012537274	0.053491496	-3.332797486
7-(4-Hydroxy-3-methoxyphenyl)-5-methoxy-1-phenyl-3-heptanone	0.316944733	13.81896173	2.516619203	0.012607924	0.053491496	-3.337664272
3,4-Dimethyl-5-pentyl-2-furantridecanoic acid	-0.151487589	14.35625546	-2.515977707	0.012630196	0.053491496	-3.339192707
Caffeic acid 3-sulfate	0.140725424	13.84229026	2.515822839	0.012635578	0.053491496	-3.339561644

2,3-Dimethylmaleate	-0.085552779	14.71317826	-2.515035283	0.01266298	0.053491496	-3.341437474
(3beta,17alpha,23S,24S)-17,23-Epoxy-3,24,29-trihydroxy-27-norlanost-8-en-15...	-0.127242191	14.0204077	-2.513349589	0.012721809	0.053577647	-3.345450675
Xamoterol	0.132356098	13.23397646	2.505795528	0.012988441	0.054465502	-3.363403895
Ethosuximide	-0.388406059	12.76894086	-2.504559746	0.013032531	0.054465502	-3.366336061
Paucin	-0.089007306	14.73418511	-2.504075589	0.01304984	0.054465502	-3.367484461
Tauroursodeoxycholic acid	0.434901447	16.05268991	2.493948441	0.013416637	0.055829229	-3.391457797
N-[(3a,5b,7b)-7-hydroxy-24-oxo-3-(sulfooxy)cholan-24-yl]-Glycine	0.325504343	15.03347922	2.487291099	0.013662732	0.056684073	-3.407167542
Tenoxicam	-0.042599443	13.73634701	-	0.013821	0.057173611	-3.417164053

			2.483046127	741		
Dieporeticenin	-0.097985466	14.03481857	-2.480688555	0.013910 76	0.057371598	-3.422708979
Acetone cyanohydrin	0.110195268	12.4906014	2.473724637	0.014176 695	0.058295908	-3.439058931
Oxamic acid	0.168569924	11.24742727	2.468311843	0.014386 507	0.058984678	-3.45173727
Aprobarbital	-0.083451252	14.05637326	-2.465204817	0.014508 184	0.059309117	-3.459003021
11''-Carboxy-alpha-chromanol	-0.110233255	14.2623902	-2.45149704	0.015055 989	0.061368563	-3.490955661
Dracorubin	0.101429402	13.25471734	2.442121889	0.015441 14	0.062754955	-3.512712369
De-O-methylsterigmatocystin	-0.078787986	14.12188082	-2.436232624	0.015687 528	0.063556019	-3.526339283

TG(18:0/24:0/22:5(4Z,7Z,10Z,13Z,16Z))	-0.053881559	13.73750869	-2.4352392	0.015729431	0.063556019	-3.528634868
Trilostane	0.181357519	13.43578056	2.432914426	0.015827879	0.063768969	-3.534003457
2,4-Dihydroxyacetophenone 5-sulfate	0.176048416	18.21536196	2.429355213	0.015979 66	0.064194945	-3.542213368
TG(20:0/22:5(4Z,7Z,10Z,13Z,16Z)/22:6(4Z,7Z,10Z, 13Z,16Z,19Z))	-0.057297513	13.88332914	-2.421698685	0.016310545	0.06533592	-3.559835988
Calcipotriol	0.125173568	13.12312061	2.416155194	0.016553884	0.06612067	-3.572562395
Demethylphylloquinone	-0.108017637	14.5139722	-2.411979017	0.016739318	0.06667031	-3.582131632
Aniline	0.248847662	12.68716554	2.409874273	0.016833468	0.066854288	-3.586948494
5-Hydroxymethyluracil	-0.06498443	12.43886455	-2.408158489	0.016910566	0.066969685	-3.590872256

Leukotriene B4	-0.284579089	15.42923169	-2.401911408	0.017193919	0.067898931	-3.60513618
Isophorone	0.113092067	12.20440576	2.400174374	0.017273448	0.068020302	-3.609096126
Carthamin	-0.06819736	13.55518021	-2.397347229	0.017403583	0.06832009	-3.615535429
DL-2-Aminooctanoic acid	-0.181615089	12.83619357	-2.396395233	0.017447598	0.06832009	-3.617702147
(Z)-4-Heptenal	-0.083272913	11.9804834	-2.393974889	0.017559945	0.068518651	-3.623207132
Ginsenoyne A linoleate	-0.118081536	14.48845195	-2.393187926	0.017596612	0.068518651	-3.62499592
1-Piperazinecarbodithioic acid	-0.411495291	15.20489895	-2.39099205	0.01769928	0.068633586	-3.629984242

			9			
Dehydroepiandrosterone sulfate	-0.137658677	17.98178091	-2.389664109	0.017761625	0.068633586	-3.632998831
Indole-3-acetate	0.131376649	13.89488004	2.389404544	0.017773834	0.068633586	-3.633587886
Dihydroclavaminic acid	0.14983467	13.71088037	2.379450047	0.018247671	0.070163693	-3.656132944
12-Ketodeoxycholic acid	-0.107407936	14.74403733	-2.378971123	0.018270746	0.070163693	-3.657215374
Tetrahydrofurfuryl butyrate	-0.05787102	14.33149812	-2.371906803	0.018614117	0.07128593	-3.673157719
Arginine	-0.117823967	15.853689	-2.369367338	0.018738933	0.071567322	-3.67887768
3-Sulfinoalanine	-0.084493424	12.73048529	-2.36612669	0.018899284	0.071982518	-3.68616859

			1			
Dihydrofukinolide	-0.180103923	14.13713447	-2.361866916	0.0191119	0.072593974	-3.695738008
Homoserine lactone	-0.112688688	14.03630359	-2.357468899	0.019333623	0.073097832	-3.705600867
Licoricesaponin E2	-0.110381104	14.17415408	-2.357157133	0.019349426	0.073097832	-3.706299363
3-Hydroxynonyl acetate	0.091516325	12.74003815	2.354766124	0.019471002	0.073213675	-3.711653397
L-Menthyl acetoacetate	0.099976186	13.8219545	2.354489099	0.019485131	0.073213675	-3.712273389
Methylthiouracil	-0.129122466	12.09558691	-2.351928305	0.019616169	0.073507903	-3.718001273
Calystegin B2	0.115462564	13.10183933	2.348900262	0.019772116	0.073893646	-3.72476667

{1-[5-hydroxy-8-(2-hydroxypropan-2-yl)-2-oxo-2H,8H,9H-furo[2,3-h]chromen-4-...	-0.102928936	15.07264347	-2.337379472	0.020375459	0.075944891	-3.750431532
4-Oxo-4-(3-pyridyl)-butanamide	0.114870636	12.98489451	2.334043224	0.020553171	0.076402989	-3.757841378
[(7-hydroxy-1-oxo-1H-isochromen-3-yl)methoxy]sulfonic acid	-0.121376633	13.48950202	-2.327364034	0.020913049	0.077534017	-3.772645809
Hydroxyprolyl-Valine	0.126295911	13.58600076	2.32613059	0.020980109	0.077576319	-3.775375343
Potassium acetate	-0.118309296	12.54230358	-2.321526884	0.021232075	0.07826377	-3.785550941
PE(18:1(11Z)/22:6(4Z,7Z,10Z,13Z,16Z,19Z))	-0.144217838	15.91719785	-2.320687257	0.021278313	0.07826377	-3.787404713
8-Butanoylneosolaniol	0.09297195	13.5376899	2.316440934	0.021513517	0.07865597	-3.796770232
Rifamycin S	-0.066134633	13.73572289	-	0.021550	0.07865597	-3.798217476

			2.315784096	102		
C12:1	0.169975567	14.14576012	2.315710246	0.021554218	0.07865597	-3.798380168
5-Aminolevulinic acid	0.102868176	14.72477019	2.305830201	0.022111236	0.080477973	-3.820101742
Epithienamycin B	0.298003449	15.30737525	2.301639147	0.022351304	0.08113989	-3.829289293
Mercaptopyruvic acid	-0.076788859	13.257552	-2.291048794	0.022968128	0.083162519	-3.852434601
p-Cresol sulfate	-0.398824014	20.67444325	-2.289535743	0.023057459	0.083269682	-3.855733118
Nicotinurate	0.152355722	13.46882305	2.283953095	0.023389695	0.084251252	-3.867885635
Withaperuvin D	0.149596236	13.4650963	2.281037585	0.023564861	0.084663445	-3.874221028
Pyrrolidine	-0.141770804	10.7802443	-	0.023772	0.085190832	-3.881677356

			2.27760168 9	764		
Orange B	-0.068148473	14.10802976	- 2.27553410 4	0.023898 643	0.085422329	-3.886159132
Erythro-4-hydroxy-L-glutamate(1-)	-0.333299305	13.85273651	- 2.27423798 5	0.023977 85	0.085486247	-3.888966678
trans-4-Hydroxycyclohexanecarboxylate	-0.092271867	13.27479721	- 2.26173990 1	0.024753 459	0.08802633	-3.915961013
Verbasoside	0.140930003	12.88397153	2.25610053 2	0.025110 536	0.088882932	-3.928095078
MG(0:0/22:5(4Z,7Z,10Z,13Z,16Z)/0:0)	-0.078980847	13.16650381	- 2.25551161 7	0.025148 083	0.088882932	-3.929360567
Petunidin 3-rutinoside	0.092025246	13.18512659	2.25492358	0.025185 623	0.088882932	-3.930623859
Zearalenone 4-sulfate	0.080287467	13.15818258	2.25163085	0.025396	0.089401628	-3.937691898

			3	732		
3,5-Dinitrosalicylic acid; Thiolutin	-0.11652813	13.43232517	-2.24942558	0.025538982	0.089675921	-3.942420159
[(6-{5,7-dihydroxy-4-oxo-6-[3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]-2-...	-0.064311853	13.9880901	-2.247823627	0.025642 75	0.089814053	-3.945852096
Lysine	0.121718861	17.78271898	2.2454344	0.025798196	0.090132044	-3.950966328
3''-Hydroxy-e,e-caroten-3-one	-0.069327956	13.56397914	-2.240527054	0.026120051	0.090721355	-3.961454468
UDP-2,4-bis(acetamido)-2,4,6-trideoxy-beta-L-altropyranose	-0.066152301	14.43749243	-2.238501247	0.026253933	0.090721355	-3.965777723
1-(alpha-Methyl-4-(2-methylpropyl)benzeneacetate)-beta-D-Glucopyranuronic acid	0.135325054	13.06920875	2.238357306	0.026263468	0.090721355	-3.966084763
6''''-Malonylapiin	-0.147383513	15.85828258	-2.23713521	0.026344548	0.090721355	-3.968690852

			7			
Varenicline	-0.087134273	12.10123108	-2.236821319	0.026365409	0.090721355	-3.969360017
2-ethyl-1,5-dimethyl-3,3-diphenylpyrrolinium (EDDP)	0.142606447	13.3578887	2.236737013	0.026371014	0.090721355	-3.969539726
Canthiumine	0.155894627	13.58876681	2.235964371	0.026422432	0.090721355	-3.971186398
Kuwanon Y	-0.063704443	13.68688805	-2.23055717	0.026784721	0.091739316	-3.982695193
5alpha-Androstan-3alpha,17beta-diol disulfate	0.126090656	13.20473917	2.227036858	0.027022902	0.09232825	-3.990173643
C25:0	-0.093013078	13.61366491	-2.225258551	0.02714392	0.092514973	-3.993947153
Zileuton O-glucuronide	0.329664266	13.61550874	2.222676617	0.027320464	0.092889576	-3.999420828
Medicagenic acid	0.154437615	13.94708851	2.218716398	0.027593189	0.093588578	-4.007804695

trans-Zeatin riboside diphosphate	0.124808885	13.61649561	2.217379505	0.027685789	0.093674731	-4.010631712
Menthol	0.092316948	11.98040697	2.214995963	0.027851553	0.094007422	-4.015667964
Sedoheptulose; 1,3,7-Trimethyluric acid	-0.13341156	15.91008164	-2.205772413	0.028501158	0.095833102	-4.035108053
2-Thiophenecarboxaldehyde	-0.068568154	12.04872031	-2.205367967	0.028529941	0.095833102	-4.035958718
7-hydroxy-1-oxo-1H-isochromene-3-carboxylic acid	-0.363693783	15.59291736	-2.203016623	0.028697778	0.096077161	-4.040901321
Pyridoxaminium(1+)	-0.082829958	13.25289368	-2.202420819	0.028740442	0.096077161	-4.042152922
Sulfamethoxazole N4-hydroxylamine	0.122244701	12.761533	2.200497857	0.028878515	0.096307776	-4.046190277
15(R)-hydroperoxy-EPE; Cinnamyl benzoate	0.215150414	15.52004498	2.19854506	0.029019	0.096448333	-4.050286826

			3	319		
TG(15:0/20:0/o-18:0)	-0.077212543	13.82856517	-2.197223937	0.029114914	0.096448333	-4.053056303
(5-{8-[5,7-dihydroxy-2-(4-hydroxyphenyl)-4-oxo-3,4-dihydro-2H-1-benzopyran-...	-0.076051238	14.34159536	-2.195201578	0.029261779	0.096448333	-4.057292703
Cannabisativine	-0.066647751	12.55842661	-2.195015024	0.029275359	0.096448333	-4.057683305
5,6-Epoxy-8,11,14-eicosatrienoic acid	-0.287926553	15.37565694	-2.193762291	0.029366691	0.096448333	-4.060305428
Tetrose	-0.102500133	16.34762921	-2.193244688	0.029404 5	0.096448333	-4.061388418
Butyl (S)-3-hydroxybutyrate glucoside	0.202319115	13.14134578	2.193238121	0.029404 98	0.096448333	-4.061402157
Thioglycolic acid	-0.111654344	11.46861992	-	0.029483	0.096480315	-4.063659225

			2.192159003	941		
8,8-Dimethoxy-2,6-dimethyl-2-octanol	-0.105658097	12.59292959	-2.189683843	0.029665749	0.096847902	-4.068832236
3-Hydroxymyristate	0.129079604	13.12497975	2.186109941	0.029929975	0.09748221	-4.076291752
Piroxicam	-0.077341939	15.15062647	-2.183898413	0.030094497	0.097789578	-4.080901874
Actinonin	0.159188306	12.59241304	2.181357735	0.030284471	0.098178029	-4.086192647
12(13)Ep-9-KODE	0.16436703	15.20671095	2.176009804	0.030687745	0.099254564	-4.097310121
Geranyl 3-methylbutanoate	0.111083095	13.24264471	2.17403106	0.030838131	0.099510079	-4.101417006
3-Hydroxydodecanoic acid	-0.080933112	14.004703	-2.17265372	0.030943185	0.099618474	-4.104273574
1b-Hydroxycholic acid	-0.097898053	13.59809362	-	0.031250	0.100375909	-4.112571199

			2.168648154	462		
Benzamide	0.124199393	12.67518099	2.163549213	0.031645428	0.101410226	-4.123112636
3-Phosphonooxypyruvate	0.097378808	12.0337824	2.162135857	0.031755667	0.101410226	-4.126030382
TG(22:0/22:6(4Z,7Z,10Z,13Z,16Z,19Z)/o-18:0)	-0.055120791	13.72840386	-2.161687299	0.031790724	0.101410226	-4.126956012
2-Ethyl-5-methylthiophene	-0.071236747	12.49799832	-2.158305609	0.032056089	0.101982514	-4.13392844
Dihydroxycitracridone I	0.123229934	12.72036797	2.157485578	0.032120726	0.101982514	-4.135617626
Sebacic acid	0.151871168	14.64211496	2.15661331	0.032189603	0.101982514	-4.137413742
Amrinone	-0.13960374	12.96786247	-2.153679763	0.032422181	0.102486442	-4.143449215

Pyridine	0.120716966	11.37564237	2.144864084	0.033129856	0.10448647	-4.161539361
LPA(a-13:0/0:0)	-0.097990557	15.08859219	-2.14389745	0.033208257	0.104497313	-4.163518623
10-Undecenal	-0.067521194	12.92790865	-2.137040208	0.033769028	0.10602258	-4.177534914
Oxalosuccinic acid	-0.300031262	16.72121712	-2.132864061	0.034114526	0.106866628	-4.186049989
20-Oxo-leukotriene E4	0.091771487	13.22925	2.126371361	0.034657719	0.108324798	-4.199256851
5''-(3'',4''-Dihydroxyphenyl)-gamma-valerolactone sulfate	0.151548974	14.06684474	2.114660508	0.035656299	0.111163152	-4.222980661
Phthalate	-0.066910892	15.28405996	-2.113709207	0.035738491	0.111163152	-4.224902301
Benzoate	0.092195918	15.36517647	2.112940092	0.035805061	0.111163152	-4.226455319

Aspartyl-Tryptophan	0.185226836	12.79804869	2.105343426	0.036468327	0.112970773	-4.241765661
Oenanthic ether	-0.056570271	14.28088583	-2.103978926	0.036588572	0.11309195	-4.24451009
Glycyl-Phenylalanine	0.164345314	13.32324754	2.10146689	0.036810833	0.113527214	-4.249558112
Geldanamycin	0.149772352	13.57566145	2.099577772	0.036978741	0.1137933	-4.253350556
PC(15:0/18:2(9Z,12Z))	-0.117091671	20.36868666	-2.096271917	0.037274152	0.114245403	-4.259979278
Cys	-0.046864707	12.78046226	-2.094574289	0.037426637	0.114245403	-4.263379383
delta-Guanidinovaleric acid; 8-Hydroxyoctanoate	-0.065940003	12.39217877	-2.094469274	0.037436087	0.114245403	-4.263589626
(R)-3-Hydroxy-Octadecanoic acid	-0.0823834	15.50242768	-	0.037493	0.114245403	-4.264873326

			2.093827966	842		
C22:6	-0.17712802	17.61533323	-2.092594065	0.03760518	0.114245403	-4.267342154
Hexanoic acid	-0.063067342	13.19624582	-2.09168728	0.037687182	0.114245403	-4.269155591
Gibberellin A110	0.11748031	13.35820438	2.091552939	0.037699344	0.114245403	-4.26942419
9,12,13-TriHOME	0.139671373	14.78885429	2.089755002	0.037862433	0.114369403	-4.273017354
3-(Acetylthio)-2-methylfuran	-0.076728167	12.70945213	-2.089054896	0.037926102	0.114369403	-4.274415709
Myricetin 7-(6''''-galloylglucoside)	-0.07083864	14.57539073	-2.088392846	0.037986394	0.114369403	-4.275737642
Azadirachtin A	-0.063554346	13.56624979	-2.0859822	0.038206625	0.114784558	-4.28054765

5-Heptadecyl-1,3-benzenediol	-0.100411627	13.59059957	-2.083791649	0.038407696	0.115140489	-4.284913887
Aspartate semialdehyde	-0.102516186	13.54325254	-2.080997412	0.038665493	0.115664586	-4.290477022
Mulberrofuran T	-0.053035584	13.75674631	-2.079908097	0.038766394	0.115718101	-4.292643836
12-O-Tetradecanoylphorbol 13-acetate	-0.061929469	13.38603362	-2.07693007	0.039043394	0.11629592	-4.29856204
Marcanine A	0.199281028	13.81552483	2.075281515	0.039197 46	0.116505884	-4.301834706
Validamycin B	0.074391783	13.02983801	2.069515812	0.039740392	0.117448368	-4.313261034
Butynol	-0.07865072	11.69841869	-2.069377082	0.039753535	0.117448368	-4.31353559
n-Decanohydroxamic acid	-0.165796037	12.28519784	-	0.039767	0.117448368	-4.313823258

			2.069231717	31		
C3:0 (Propionic acid)	0.104289977	13.79567525	2.057625212	0.040880403	0.120480512	-4.336729321
p-Hydroxyphenylacetothiohydroximate	0.420551195	17.42236193	2.056183429	0.041020514	0.120638388	-4.339566133
Eremopetasinorol	-0.17731681	13.02232723	-2.049703109	0.041655333	0.122119558	-4.352293085
5,8-Tetradecadienoic acid	0.112148451	14.69234104	2.049170031	0.041707924	0.122119558	-4.353338302
Bilobetin	-0.059910358	14.279989	-2.048369941	0.041786965	0.122119558	-4.354906567
3-Hydroxycapric acid	-0.117087891	14.49717899	-2.046158528	0.042006095	0.122503129	-4.359238123
[2-hydroxy-6-methoxy-4-(prop-2-en-1-yl)phenyl]oxidanesulfonic acid	0.16955844	14.13061216	2.04507207	0.04211411	0.122561732	-4.361364555

25-Acetyl-6,7-didehydrofevicordin F 3-glucoside	-0.060709869	13.45094715	-2.04379616	0.042241263	0.122675669	-4.363860401
2-Dimethylamino-5,6-dimethylpyrimidin-4-ol	-0.074608468	13.33442021	-2.041668031	0.042454074	0.123037379	-4.368019975
4-O-(beta-L-Arabinofuranosyl-(1->2)-beta-L-arabinofuranosyl-(1->2)-beta-L-a...	0.066679343	13.2133255	2.03985347	0.042636249	0.123308986	-4.371563376
6,8a-Seco-6,8a-deoxy-5-oxoavermectin "2b" aglycone	-0.066866006	13.48996356	-2.035200658	0.043106418	0.124410657	-4.380635384
C26:1	-0.069868125	13.97529729	-2.028726304	0.043767994	0.126059058	-4.393225935
11,12-Dihydrolactaroviolin	-0.070229911	12.90003545	-2.025298256	0.04412177	0.126815974	-4.399876801
1-(Hydroxymethyl)-5,5-dimethyl-2,4-imidazolidinedione	-0.09358824	13.6174417	-2.020948531	0.04457416	0.127852632	-4.4083003

C22:4	-0.169988917	15.94682666	-2.017769962	0.044907232	0.128543494	-4.41444479
Osmanthuside A	0.093152584	13.01361666	2.016191524	0.045073416	0.128754798	-4.417492615
2,5-Furandicarboxylic acid; Methyl phenyl disulfide	0.111567163	12.6679487	2.007873448	0.045957825	0.131012697	-4.433516249
2,4-Dinitro-1-(3-nitrophenoxy)benzene	0.07301974	12.72826288	2.001968227	0.04659459	0.132556854	-4.44485322
C24:4	-0.082946975	13.55323746	-2.000442115	0.046760363	0.132757527	-4.447777865
Acetatic acid	-0.095306327	15.54303529	-1.993389433	0.047532963	0.13467673	-4.461265803
Pyruvate	0.107971869	15.63317082	1.989062083	0.048012343	0.135759038	-4.469518999
Alpha-Tocopherol	-0.088004881	17.27421382	-1.98797806	0.048133067	0.135824891	-4.471583746

			9			
Heptadecanoic acid	-0.118122151	17.43659295	-1.983553432	0.048628499	0.136945713	-4.480000242
1-(Methylsulfinyl)propyl 1-propenyl disulfide	0.116636444	13.06803366	1.982429415	0.048755042	0.136987059	-4.482135463
20-Carboxy-leukotriene B4	-0.104187774	13.58039743	-1.981678641	0.048839719	0.136987059	-4.483561011
3,4-Dimethyl-5-pentyl-2-furanundecanoic acid	-0.113853143	14.82011925	-1.97443395	0.049663234	0.139017165	-4.497290327
Milrinone	-0.129560085	14.01561175	-1.96637754	0.050592763	0.141327605	-4.512501111
C16:3	0.1260612	13.99517344	1.965004238	0.050752667	0.141327605	-4.515087984
Tyramine glucuronide	0.150187882	13.73154716	1.964660342	0.050792776	0.141327605	-4.515735505
4beta-(2-Aminoethylthio)epicatechin 3-gallate	0.377134051	16.44413729	1.956467339	0.051756276	0.143721611	-4.531129825

Methyl-His	-0.114386391	14.70257286	-1.950240863	0.052498773	0.145064057	-4.542787705
Glutamylmethionine	0.156312595	13.81376104	1.950169311	0.052507357	0.145064057	-4.542921464
4-hydroxy-3-(sulfooxy)benzoic acid	0.110691836	12.53633771	1.949680483	0.052566035	0.145064057	-4.543835155
Polyethylene, oxidized	0.126977661	13.82360467	1.948932209	0.052655963	0.145064057	-4.545233359
3-(2-Methylpropanoyloxy)-8-(2-methylbutanoyloxy)-9,10-epoxy-p-mentha-1,3,5-...	-0.058450194	13.97400871	-1.948063836	0.052760487	0.145065324	-4.546855329
Glyceric acid 1,3-biphosphate	0.062644685	12.2079611	1.947087723	0.052878188	0.145102745	-4.548677707
2,3,6-Trihydroxypyridine	0.090856212	12.45714405	1.942135353	0.053478762	0.146234961	-4.557910105
(Ac)2-L-Lys-D-Ala	0.105441755	12.66450165	1.941956194	0.053500595	0.146234961	-4.558243674
Maleamic acid	0.074924847	12.75392412	1.93635383	0.054187	0.147821658	-4.568659585

			2	136		
Mazaticol hydrochloride	0.118096797	12.47066025	1.932582191	0.054653489	0.148802663	-4.57565549
Cycloheptanecarboxylic acid	-0.130110376	12.95373632	-1.924641901	0.055646313	0.151210448	-4.590340736
Bensulfuron-methyl	-0.103803701	13.57171226	-1.922210457	0.055953342	0.151748946	-4.594825941
Sulfamethoxazole	0.331798623	15.57022706	1.91435683	0.056954777	0.15416497	-4.609275925
5-Methylthiopentanaldoxime	0.093253419	15.3440772	1.913259478	0.057095892	0.154247429	-4.611290415
Ethoxysulfuron	0.077391506	13.23459368	1.898245389	0.059056243	0.15923482	-4.638740985
Taurocholic acid	0.283059847	14.84053553	1.89687353	0.059238136	0.159416913	-4.641238782
3-Oxotetradecanoic acid	0.090538869	14.16890305	1.893481375	0.059689909	0.160323184	-4.647407529

C9:2	-0.121053063	12.8186517	-1.892111527	0.059873162	0.160506129	-4.649895622
Lactosamine	0.107108239	13.04269445	1.889913295	0.060168215	0.160987507	-4.653884701
Palmitoylglycine	0.121331017	13.67466965	1.888198354	0.060399241	0.160991996	-4.656993657
3''-O-Methyl-(-)-epicatechin-5-O-sulphate	0.102464398	13.38489274	1.888186276	0.060400871	0.160991996	-4.657015544
4-Butyl-5-ethylthiazole	-0.082306158	13.56444259	-1.884538192	0.060894794	0.161998746	-4.663619923
14-hydroxyclarithromycin	-0.110491612	14.583834	-1.878254897	0.061753406	0.163969996	-4.674966101
Oxoproline	0.186982808	18.07346537	1.871587827	0.062675473	0.16610192	-4.68696528
Hydroxytyrosol	-0.072880864	12.89613827	-1.86971169	0.062937004	0.16633303	-4.690334451

			6			
Eicosadienoic acid	-0.131906308	16.59713281	-1.869251307	0.06300132	0.16633303	-4.691160723
Ceftizoxime	0.067762065	12.90477108	1.865727893	0.063495355	0.167320463	-4.697477775
1-Hydroxyepiacorone	0.098888153	12.71615381	1.864688964	0.063641642	0.167381284	-4.69933825
Methamidophos	0.082089869	12.10843606	1.863010481	0.063878575	0.167381284	-4.7023419
Mascaroside	-0.05867046	13.71442911	-1.863009924	0.063878653	0.167381284	-4.702342896
octanoate radical	0.099027596	11.96828159	1.859392376	0.064391798	0.168250906	-4.70880762
Isorhamnetin 7-glucoside	0.0621276	13.69986297	1.858970064	0.064451925	0.168250906	-4.709561518
Desmethyl frovatriptan	-0.242162581	12.5756577	-1.854135231	0.065143623	0.169569199	-4.718180735

			1			
PE(16:0/22:6(4Z,7Z,10Z,13Z,16Z,19Z))	-0.141720053	17.81786932	-1.853741602	0.065200208	0.169569199	-4.718881516
Formyl-Asp; Erucin	-0.085065238	12.15304681	-1.852214428	0.06542013	0.169824324	-4.721598993
PC(15:0/18:4(6Z,9Z,12Z,15Z))	-0.134334149	17.63010502	-1.850221187	0.065708095	0.170254804	-4.725142542
Pyrazinamide	0.09781144	12.81467922	1.849369044	0.065831526	0.170258157	-4.726656342
PGF2a ethanolamide	0.08264873	13.15864037	1.845261645	0.066429173	0.171355727	-4.733943526
D-erythro-L-galacto-Nonulose	0.103284813	16.41308791	1.84432078	0.066566706	0.171355727	-4.735610565
Cerebronic acid	-0.070173201	13.25703076	-1.843924659	0.06662468	0.171355727	-4.736312173

2,5-Dimethyl-1H-pyrrole	-0.066303716	12.00744263	-1.842529015	0.066829273	0.17156539	-4.738782972
Homocitrulline	-0.111077327	13.6172069	-1.839356181	0.067296331	0.172446849	-4.744393313
(2E)-3-[3-(sulfooxy)phenyl]prop-2-enoic acid	-0.082028699	13.07126305	-1.838461038	0.067428589	0.172468722	-4.745974452
O-methoxycatechol-O-sulphate	-0.218006682	16.52980087	-1.834979445	0.067945048	0.173471422	-4.752117101
10-Hydroxymyristic acid methyl ester	-0.073969146	13.58619342	-1.833828545	0.068116491	0.173591204	-4.754145183
Glycerol triundecanoate	-0.108111651	19.01168112	-1.830961568	0.068545127	0.174364794	-4.759191932
Metyrapol	-0.117644955	14.1357914	-	0.069205	0.175724225	-4.766902564

			1.826572877	595		
Rhein	-0.066591658	15.69777296	-1.816709852	0.070709139	0.178926696	-4.784165907
4-(2-Aminophenyl)-2,4-dioxobutanoic acid	0.213932713	12.65863247	1.816616248	0.070723536	0.178926696	-4.784329309
AMP	0.132706786	13.82366663	1.813198421	0.071250902	0.179799775	-4.790290163
2-Methylbutyrylglycine	0.090334494	13.42068177	1.811188296	0.071562574	0.179799775	-4.793790843
Protriptyline	0.073017166	12.37503724	1.810465036	0.071674992	0.179799775	-4.795049499
C24:5	-0.07767023	14.48245411	-1.810298617	0.071700879	0.179799775	-4.795339041
Heptanoylcarnitine	0.071664868	12.31237322	1.810217242	0.071713 54	0.179799775	-4.795480612
Octadecanedioic acid	0.127446185	15.88757588	1.80642018	0.072306	0.180960666	-4.802079585

			9	378		
Gliclazide	-0.306591782	13.26350581	-1.801627008	0.073060508	0.182520336	-4.810390593
cis-4-Hydroxycyclohexylacetic acid	-0.097801397	13.84330644	-1.798676055	0.073528008	0.183359648	-4.815496686
Deoxyhexose; Butyl isopropyl disulfide	-0.128257152	16.64325782	-1.792845093	0.074459016	0.185349764	-4.825562285
Histidine	0.093331855	18.05892104	1.787987252	0.075242037	0.186965063	-4.833923876
PS(18:0/24:0)	-0.076476056	14.82085958	-1.783184032	0.0760229	0.188569258	-4.842169844
Sulfurous acid	-0.125690212	14.3749207	-1.782335539	0.07616153	0.188577572	-4.843624266
5-Methylquinoxaline	-0.079114803	12.36080855	-	0.076592	0.189309045	-4.848130309

			1.779704281	755		
Phenytoin	0.130351972	12.68078336	1.769554993	0.078274 9	0.193124267	-4.86545058
Carnitine	-0.108439888	11.589064	-1.767427988	0.078631 242	0.193660692	-4.869068251
2-[(Methylthio)methyl]-2-butenal	0.154039081	14.30445553	1.763650018	0.079267 452	0.194883294	-4.875483532
Molybdopterin precursor Z	-0.147364996	16.09780447	-1.758356551	0.080165 958	0.196745326	-4.884449852
Mandelonitrile	0.096405415	13.50009927	1.754423866	0.080838 869	0.197531587	-4.891094296
3-Oxododecanoic acid	0.07563623	13.38639789	1.754154436	0.080885 139	0.197531587	-4.891548981
6-[(2-{[3-(3,4-dimethoxyphenyl)-7-methoxy-8-methyl-4-oxo-4H-chromen-5-yl]ox...	0.074902528	13.50493555	1.754001387	0.080911 432	0.197531587	-4.891807235
Succinimide	-0.05800579	14.09939438	-	0.081137	0.197737254	-4.894024198

			1.752687009	525		
Asparaginyl-Hydroxyproline	0.133362234	13.73754844	1.751048007	0.081420181	0.198079812	-4.896786448
Methyl methanesulfonic acid	-0.061406859	11.71581817	-1.74881611	0.08180638	0.198672637	-4.900543886
Meloxicam	0.071662196	13.21470159	1.747769437	0.081988007	0.198767447	-4.902304379
Glyphosate	-0.056703134	13.30966769	-1.745538755	0.082376192	0.199361826	-4.906052948
LysoPC(10:0)	0.077478254	13.57824909	1.742594418	0.082890865	0.200150615	-4.910993674
Rifamycin	-0.096241943	13.6824429	-1.742033108	0.082989279	0.200150615	-4.911934659
(2R,3R,4R)-2-Amino-4-hydroxy-3-methylpentanoic acid	-0.062560179	14.42355965	-1.728953345	0.085309688	0.205391546	-4.93377837

GF 109203X	0.142512816	14.06891742	1.710955802	0.088588617	0.212918159	-4.963573688
5-Guanidino-3-methyl-2-oxopentanoate	-0.138354065	12.83560042	-1.707772785	0.089179036	0.213621425	-4.96881173
Pyrogallic acid	-0.054395509	14.33246851	-1.704235325	0.089838942	0.213621425	-4.974621935
Indole-3-carboxilic acid-O-sulphate	0.070656741	12.68860644	1.703930912	0.089895914	0.213621425	-4.97512138
Aminoadipate	0.091434419	14.04626173	1.70390295	0.089901149	0.213621425	-4.975167252
Cholylglycine	0.225088323	15.6845018	1.703689719	0.089941075	0.213621425	-4.975517039
Pseudoargiopinin I	-0.076544585	16.21492149	-1.703234734	0.090026317	0.213621425	-4.97626326
Methylpyrazine	0.114756358	14.97636242	1.70243001	0.090177242	0.213621425	-4.977582616

4-Oxoretinal	0.06096076	13.26233486	1.702370171	0.090188473	0.213621425	-4.977680698
Threonine	0.091642743	15.18877767	1.701987004	0.090260416	0.213621425	-4.978308671
Humilixanthin	0.164082691	12.97879014	1.696828657	0.091233465	0.215558391	-4.986749318
Urate	-0.090945661	21.05973125	-1.691564261	0.092235261	0.217556604	-4.995337823
Sulfoglycolithocholate(2-)	0.182834792	14.71194784	1.688581864	0.092806737	0.218534784	-5.000191893
5a-Androst-3-en-17-one	-0.073786396	12.75650768	-1.686217367	0.093261846	0.21923611	-5.004034366
8-iso-15-keto-PGE2	-0.106612169	14.13207407	-1.685201932	0.093457846	0.219326998	-5.005682914
Pilosine	0.090693208	14.50249283	1.678077964	0.094842293	0.222201945	-5.017221444

Isochesnatin	-0.052741738	13.86794078	-1.675815632	0.095285394	0.222865503	-5.020875751
Sulpiride	0.072331345	12.86431404	1.673431133	0.095754229	0.223586926	-5.024722199
C20:1	-0.122563868	17.4209855	-1.671086947	0.096216949	0.224019103	-5.028498428
Avocadyne	-0.081766357	15.36488337	-1.670865672	0.096260719	0.224019103	-5.028854611
1,2-Dihydroxynaphthalene-6-sulfonate	0.076847835	12.42403931	1.669130019	0.096604606	0.224444702	-5.031646882
1-Isothiocyanato-2-phenylethane	-0.169470879	12.02899322	-1.667624485	0.096903701	0.224761634	-5.034066659
Ethylene glycol	0.089239928	11.70204815	1.666821703	0.097063489	0.224761634	-5.035356064
2-C-Methyl-D-erythritol 2,4-cyclodiphosphate	0.071704919	13.43378387	1.66391957	0.097642	0.225728381	-5.040012345

			4	908		
Leukotriene A4	-0.167955168	14.22820944	-1.662153493	0.097996872	0.226171589	-5.042842047
1-Palmitoylglycerophosphoinositol	-0.070077425	13.79001141	-1.658714426	0.098689105	0.227392747	-5.048343897
1-Palmitoyl-2-(5-keto-6-octendioyl)-sn-glycero-3-phosphatidylcholine	-0.057881138	13.32043432	-1.654561264	0.09953031	0.228362677	-5.054973384
Hydroxy-valine	0.100161932	12.87852259	1.654003776	0.099643664	0.228362677	-5.055862043
Fosamine	-0.071770495	12.22464455	-1.653995358	0.099645376	0.228362677	-5.055875459
d-Tocotrienol	0.067935853	13.50990138	1.653405974	0.09976533	0.228362677	-5.056814641
3-Hydroxymonoethylglycinexylidide	0.119204942	12.30393517	1.649510792	0.100561014	0.229806645	-5.063013408

3,4-Methyleneazelaic acid	-0.08543668	14.297317	-1.645644112	0.101355906	0.231244081	-5.069152743
Resolvin D2	-0.201878562	14.07929903	-1.642746365	0.101954908	0.232230625	-5.073744456
2-oxo-3-(3,4,5-trihydroxyphenyl)propanoic acid	-0.150695139	13.0846155	-1.638134411	0.102914109	0.234033064	-5.081036221
6-Acetyl-1,2,3,4-tetrahydropyridine	-0.09546104	11.72691896	-1.636036884	0.103352741	0.234252802	-5.084345929
14,15-DiHETrE	-0.088461312	14.99351729	-1.634592167	0.103655728	0.234252802	-5.086623159
(-)-trans-Carveol	-0.096564475	13.14842765	-1.633449979	0.103895771	0.234252802	-5.088422143
Mycotoxin T 2	0.064123268	12.78885083	1.6333068	0.103925	0.234252802	-5.088647568

				893		
Acetyl-Glu-semialdehyde	0.063953563	12.68139197	1.632317178	0.10413428	0.234252802	-5.090205132
Tyramine-O-sulfate	-0.096382455	17.9207444	-1.632222534	0.104154227	0.234252802	-5.090354044
Nonadeca-10(Z)-enoic acid	-0.103912848	15.56270284	-1.631277001	0.104353674	0.234252802	-5.091841275
Allixin	-0.09349075	15.41572856	-1.631270312	0.104355086	0.234252802	-5.091851794
3b,12a-Dihydroxy-5a-cholanoic acid	-0.086169331	16.94586714	-1.62649213	0.105367663	0.236145534	-5.099354533
Triphenyl phosphate	0.072088514	12.85348924	1.624892208	0.105708463	0.236529049	-5.101861954
2-Hydroxymyristic acid	-0.060182337	13.41051151	-1.623342989	0.106039301	0.23667437	-5.10428762

Phenylbutazone	0.114523212	13.18628565	1.622979907	0.106116958	0.23667437	-5.104855783
Pentose; Diisopropyl disulfide	0.096949318	15.74399432	1.622205447	0.106282752	0.23667437	-5.106067275
Cefepime hydrochloride	0.30623307	13.78804843	1.621194731	0.106499434	0.236778645	-5.107647493
Arbekacin	-0.152223295	13.77419885	-1.619269211	0.106913212	0.237320091	-5.11065532
Propafenone	0.108282731	14.20905674	1.617480812	0.107298672	0.237797056	-5.113445834
Epoxyeremopetasinorol	-0.088918026	14.44726064	-1.615491853	0.107728661	0.238371037	-5.116545762
Deoxycholic acid glycine conjugate	0.240709804	17.53498314	1.61112157	0.108678291	0.240091185	-5.123344087
Hydroxyadipate; (-)-1-Methylpropyl 1-propenyl disulfide	-0.127052678	16.02052716	-1.608650655	0.109218147	0.240902053	-5.127179852

3-Methyl-9H-carbazole-9-carboxaldehyde	-0.138511688	12.16894079	-1.606505027	0.109688664	0.241557659	-5.130505998
Austalide B	0.113003071	13.30636872	1.604395431	0.110152852	0.242197279	-5.133772069
Dimethyl trisulfide	-0.048786692	11.12644434	-1.60173753	0.11073991	0.242907861	-5.137881068
Isocarbamid	-0.062653249	12.18583929	-1.601355323	0.110824533	0.242907861	-5.138471397
N'-Nitrosoanatabine	-0.106587313	14.11262454	-1.60007647	0.111108055	0.243146983	-5.140445622
Nornicotine	0.092253797	12.7248342	1.5981087	0.111545435	0.24372153	-5.143480356
Ethyl isovalerate	-0.052381585	12.92199917	-1.595470799	0.112133912	0.244623903	-5.147542871
Rishitin	0.06517315	13.19351429	1.59022861	0.113310687	0.24680484	-5.155596707

Quinoline yellow	-0.077278037	13.90832206	-1.586666598	0.11411587	0.248170861	-5.161054455
Myricatomentoside I	0.04500647	13.11458687	1.585353047	0.114413937	0.248431507	-5.163064079
N-Gluconyl ethanolamine; Dihydrobiopterin	0.162247358	14.41478984	1.583431165	0.114851156	0.248774478	-5.166001471
Mycophenolic acid	0.087580549	12.90873353	1.582458779	0.115072873	0.248774478	-5.167486337
5''-Hydroxypiroxicam	0.111503119	13.81508687	1.582308045	0.115107273	0.248774478	-5.167716433
Ketovaline	-0.060319548	14.05921754	-1.578108629	0.116068921	0.250464515	-5.174118265
Neuroprotectin D1	-0.201035233	14.64208504	-1.573187599	0.117203897	0.25252277	-5.181599045
(3beta,17alpha,23R)-17,23-Epoxy-3,29-dihydroxy-27-norlanost-8-ene-15,24-dione	0.172838927	13.73629961	1.571010796	0.117708741	0.253219113	-5.184900873

Propyl 1-(propylsulfinyl)propyl disulfide	-0.128769688	16.72067694	-1.568662057	0.118255387	0.253969607	-5.188458495
Citrulline	-0.055928618	14.12334533	-1.567947961	0.118421983	0.253969607	-5.189539103
Aspidin	0.114021359	13.23748342	1.564902847	0.119134478	0.25480529	-5.19414174
SM(d18:0/24:1(15Z)(OH))	-0.082002702	14.70477785	-1.564242903	0.119289337	0.25480529	-5.195138083
3,4-Diethylthiophene	0.074532373	13.17762706	1.563941949	0.11936001	0.25480529	-5.195592308
4-Oxocyclohexanecarboxylate	-0.049853034	12.18332866	-1.562323196	0.119740709	0.255227137	-5.198034006
Koenoline	-0.074313143	14.7222223	-1.560308697	0.120215816	0.255347199	-5.201069193

Madlongiside C	-0.067956077	13.49928723	-1.560058895	0.120274834	0.255347199	-5.201445297
Thio-THIP	-0.050179881	12.68027195	-1.559755415	0.120346564	0.255347199	-5.201902138
Benzene	0.095943785	11.78912422	1.556465277	0.121126386	0.256611218	-5.206849358
Glucocaffeic acid	0.174955051	13.06144875	1.55494865	0.121487192	0.256985046	-5.209126403
Slaframine	0.068150479	12.59398601	1.552838758	0.121990543	0.257658814	-5.212290563
4,4',6,6'-Tetranitro-2,2'-azoxytoluene	0.049312194	12.87119261	1.547995462	0.123152207	0.259718875	-5.219538085
N4-Acetylsulfamethoxazole	0.322922319	17.27027472	1.546928357	0.123409318	0.25986796	-5.221131932
Glycineamideribotide	-0.07060621	15.37908566	-1.539506785	0.125209185	0.263260337	-5.232187232

Ampicillin	-0.307565119	14.71533317	-1.52393568	0.1290524	0.270556692	-5.25521342
4-Hydroxyphenytoin glucuronide	0.130637157	12.9568093	1.523874918	0.129067576	0.270556692	-5.255302826
Aurachin D	-0.067155392	12.84738462	-1.519145866	0.130252991	0.272631637	-5.262250486
Iso-Valeraldehyde	0.053770246	12.20459617	1.517007396	0.130791821	0.273349023	-5.265385278
L-beta-aspartyl-L-alanine	-0.095039057	14.89521924	-1.515127035	0.131267053	0.273931544	-5.268138142
3,4-Dihydroxyphenylglycol	-0.049984184	13.40036331	-1.510358421	0.132478291	0.276045946	-5.275104465
Gibberellin A39	0.043880184	14.08483106	1.509461714	0.132707028	0.276053461	-5.276412039
Italidipyrone	-0.046310005	13.88353219	-1.50879241	0.132877957	0.276053461	-5.277387517

			1			
Hydroxybutynal	-0.052730822	12.76880258	-1.506360971	0.133500355	0.276527368	-5.280927676
Valine; Betaine	-0.059418671	17.8316875	-1.506102049	0.133566767	0.276527368	-5.281304337
Tsugarioside B	-0.045744447	13.20461142	-1.505578316	0.133701181	0.276527368	-5.282066028
Sinapyl alcohol	-0.08205244	14.97570876	-1.502537488	0.13448368	0.277733703	-5.286483348
Ethyl tiglate	0.079752768	13.44951735	1.501166682	0.134837595	0.278052673	-5.28847182
Eicosapentaenoic acid	-0.133216185	15.890985	-1.494842352	0.136479808	0.281023415	-5.297622824
Polyoxyethylene 40 monostearate	-0.059331965	14.20922656	-	0.136766	0.281197768	-5.299206097

			1.493745483	203		
1-Isothiocyanatobutane	-0.087661198	12.39043936	-1.492057624	0.137207819	0.281690279	-5.301640213
Aspartylglycosamine	0.060770795	13.61177633	1.48238905	0.139758911	0.286362135	-5.315531691
Dimethylsulfonioacetate	-0.036673607	11.41102497	-1.481879876	0.139894271	0.286362135	-5.316260806
Gentamicin C1a	0.09455833	13.55938531	1.480165326	0.140350819	0.286875427	-5.318714166
5-Sulfoxymethylfurfural	-0.121706088	14.3977708	-1.473670995	0.142090589	0.289600029	-5.327981738
Androsta-5,16-dieno[17,16-b]quinolin-3beta-ol	0.144441975	12.60794044	1.473638647	0.142099297	0.289600029	-5.3280278
Diacetylhydrazine	-0.047820226	12.46904147	-1.47159351	0.142650634	0.290299246	-5.330937929

			9			
Salicyluric acid	0.188384129	14.61472214	1.466463495	0.144040892	0.292701172	-5.338220328
Delta-Hexanolactone	-0.047920626	13.01713519	-1.465584837	0.144280058	0.292760409	-5.339465142
Integerressine	-0.091720416	13.43982246	-1.461487697	0.145399328	0.294602709	-5.34526001
Diisopropyl sulfide	-0.070991547	14.48129025	-1.459073378	0.146062009	0.295515879	-5.348667313
3-Methoxybenzyl alcohol	0.151636745	13.4541631	1.455750644	0.146977835	0.296937829	-5.35334763
Tricin 7-[rhamnosyl-(1->2)-galacturonide]	-0.120410465	14.65495763	-1.453475267	0.147607531	0.297778435	-5.356546642
trans-Piceid	0.125224026	13.50386112	1.451752883	0.148085 57	0.298311105	-5.358964927

Ubiquinone-2	0.051075354	13.21295397	1.447863357	0.149169469	0.300060952	-5.364415623
Nb-trans-p-Coumaroylserotonin glucoside	0.04893625	13.86976147	1.445063666	0.14995343	0.301203288	-5.368330184
Isoleucyl-Tyrosine	0.307636457	14.77605418	1.442735087	0.15060788	0.30166242	-5.371580377
C24:1	-0.074642272	15.42823678	-1.442710473	0.150614809	0.30166242	-5.371614705
5-Hydroxymethyl-4-methyluracil	0.093321089	13.88757643	1.435713275	0.152594649	0.30511052	-5.381350224
3-Oxooctadecanoic acid	0.086584519	17.05809417	1.435082381	0.152774134	0.30511052	-5.382225735
15-Keto-13,14-dihydroprostaglandin A2	0.089861271	15.55050643	1.432012976	0.153649671	0.306420088	-5.386479871
Batrachotoxinin A	0.050625349	13.26788135	1.430554954	0.154066911	0.306813248	-5.388497535
C16:2	0.094880825	15.00740777	1.428044995	0.154787212	0.307807951	-5.391966188

MG(0:0/15:0/0:0)	-0.051759998	14.93051161	-1.426267656	0.155298824	0.308385415	-5.394418783
Glycine	0.056799435	14.92819775	1.42458798	0.155783512	0.308907845	-5.39673386
C.I. Food Brown 3	-0.035489157	13.90868967	-1.421602605	0.156647824	0.310180492	-5.400841967
N-Desmethylvenlafaxine	0.056547087	12.24653339	1.419297616	0.157317656	0.311064982	-5.404008031
Clarithromycin	-0.071918099	14.31202636	-1.418199987	0.157637396	0.311255707	-5.405513932
Proacaciberin	0.16725632	13.76098358	1.413930853	0.158885712	0.313276779	-5.411360144
C22:5	-0.123878734	16.72593349	-1.411401062	0.159628983	0.313550852	-5.414816323
Kanamycin	-0.052212419	13.16248989	-	0.159771	0.313550852	-5.415475559

			1.410918021	205		
Ergotamine	-0.051515431	13.29957094	-1.410603696	0.159863804	0.313550852	-5.41590442
TG(20:4(5Z,8Z,11Z,14Z)/18:1(9Z)/22:5(7Z,10Z,13Z,16Z,19Z))	-0.041209825	13.84692665	-1.409771773	0.160109081	0.313550852	-5.417039031
Farnesol	0.049413037	11.9108065	1.409635252	0.160149359	0.313550852	-5.417225161
2,3-Dimethylthiophene	-0.072392589	13.24488951	-1.408404385	0.160512854	0.313821764	-5.418902506
(3b,6b,8b,12a)-8,12-Epoxy-7(11)-eremophilene-6-angeloyloxy-8,12-dimethoxy-3-ol	-0.066379168	13.95323341	-1.403734943	0.161897524	0.315647133	-5.42525265
Monomethyl sulfate	0.057860509	12.54433951	1.40372879	0.161899355	0.315647133	-5.425261005
6-Keto-decanoylcarnitine	0.08400208	13.33454616	1.39133785	0.165617	0.322445815	-5.442011554

			9	793		
N-Decanoylglycine	-0.055813628	12.66142214	-1.389903349	0.166052427	0.322841121	-5.443941373
Catechol	-0.068300022	14.30007183	-1.388856557	0.166370134	0.322923257	-5.445348369
N-Methoxyspirobrassinol methyl ether	0.259443965	15.17217236	1.388238352	0.166557978	0.322923257	-5.446178812
2-Hydroxy-desipramine glucuronide	0.210776666	13.31654735	1.376345004	0.170203164	0.329532237	-5.462084681
(S)C(S)S-S-Methylcysteine sulfoxide	0.073105195	12.84501293	1.375250174	0.170541722	0.329729765	-5.46354213
2-Carboxy-2-hydroxy-8-carboxychromene	-0.089773738	12.58618615	-1.374134532	0.170887238	0.32986669	-5.465026113
Porrigenin A	-0.056188359	14.46403842	-1.373494134	0.171085808	0.32986669	-5.465877411

Cyclodopa glucoside	0.148569216	14.4235972	1.371947073	0.171566229	0.330000005	-5.467932353
DNDS	0.061761392	13.56098627	1.371747075	0.17162841	0.330000005	-5.468197842
Capsianoside IV	0.053527964	13.44791825	1.370889126	0.171895347	0.330058007	-5.469336302
(10S)-Juvenile hormone III diol	0.088008855	15.01514819	1.369595805	0.172298334	0.330376722	-5.471051162
C15:0	-0.091262679	16.46275922	-1.368242869	0.172720657	0.330731588	-5.472843365
Plantamajoside	0.053471652	13.24201552	1.366239386	0.173347482	0.331139727	-5.475494141
Medroxyprogesterone	-0.144083045	15.07861088	-1.365393345	0.173612695	0.331139727	-5.476612379
Acetyl-Met	-0.064443919	14.55604052	-1.36528576	0.173646442	0.331139727	-5.476754529
Immunomycin	-0.077225061	14.73948011	-	0.174591	0.332110955	-5.480724529

			1.362277722	998		
Guaifenesin	-0.128508621	14.20780909	-1.362150005	0.174632231	0.332110955	-5.480892899
5-Methyl-3-isoxazolyl sulfate	-0.05906447	11.94747773	-1.359949535	0.175326502	0.332904037	-5.483791363
3-(4-Methyl-3-pentenyl)thiophene	0.070961062	15.60697624	1.359315671	0.175526877	0.332904037	-5.484625437
13''-Carboxy-gamma-tocotrienol	-0.041901719	13.13185375	-1.354571022	0.177032209	0.334829527	-5.490856584
Desmethylnortriptyline	-0.067420432	12.33033177	-1.354029035	0.177204779	0.334829527	-5.491567014
4-Coumaroylputrescine	0.06588582	12.73843461	1.353103129	0.177499882	0.334829527	-5.492780034
Vitamin A	0.07331455	14.45209357	1.35286785	0.177574	0.334829527	-5.493088136

			4	927		
7(14)-Bisabolene-2,3,10,11-tetrol	0.061777286	13.10747566	1.351522483	0.178004515	0.334829527	-5.494848941
Fusicoccin H	-0.088622979	14.60741352	-1.350962129	0.17818367	0.334829527	-5.495581817
Demethoxyegonol	0.149212207	13.82055831	1.350536391	0.178319877	0.334829527	-5.496138433
Neosaxitoxin	0.116285107	15.55277379	1.349918055	0.17851784	0.334829527	-5.496946547
L(-)-Nicotine	-0.187647568	13.09609418	-1.34933752	0.178703851	0.334829527	-5.497704927
3-Ethylpyridine	0.079706514	12.38381666	1.34489343	0.180132608	0.336605988	-5.503499838
Teleocidin B-1	0.137063596	14.09619814	1.344886286	0.180134912	0.336605988	-5.503509139
Famotidine	-0.054140018	18.19606348	-1.340196798	0.18165183	0.337975413	-5.509603646

Oxoglutarate; Di-2-propenyl disulfide, 9CI	0.065388181	12.99469798	1.339984987	0.18172057	0.337975413	-5.509878425
SM(d18:1/26:0)	-0.089030364	14.09090496	-1.339706664	0.181810924	0.337975413	-5.510239422
16-Dehydroprogesterone	0.070092802	14.60149363	1.339243613	0.181961323	0.337975413	-5.510839858
Acetylglucosamine P	0.13284487	14.97240958	1.338878396	0.182080011	0.337975413	-5.511313289
1-Methylpyrrolinium	-0.043605875	11.08639976	-1.337617928	0.182490081	0.338286134	-5.51294626
Phenylethyl alcohol	0.13731124	12.92696857	1.333905863	0.183701739	0.340079979	-5.517746566
Pilocarpine	-0.189112675	13.66385664	-1.331779431	0.184398528	0.340917173	-5.520490485
2,5-Diethyl-3,6-dimethylpyrazine	-0.18704154	13.91506307	-1.32479422	0.186701308	0.34437018	-5.529473826

			8			
CMP-pseudaminic acid	0.055538101	13.10833076	1.32461613	0.186760299	0.34437018	-5.529702261
Cyclopentolate	-0.060795802	13.67291146	-1.322357746	0.187509545	0.345294987	-5.53259635
Iminoacetate	0.06386455	12.6421177	1.320669009	0.188071262	0.34587248	-5.534757271
Oxalic acid	-0.052329673	11.76344303	-1.317930162	0.188984931	0.347008125	-5.53825615
Cycloheximide	0.36335774	16.35073819	1.31732684	0.189186639	0.347008125	-5.539025936
C13:2	-0.047354185	12.96636507	-1.313661637	0.19041546	0.348803089	-5.543694962
ADP	-0.041952726	13.42039952	-1.310742181	0.191398485	0.34971321	-5.547404848

6''''-O-Malonyldaidzin	0.101094863	14.02661876	1.310440647	0.19150023	0.34971321	-5.547787558
Acaciabiuronic acid	0.079207747	14.33069043	1.30946346	0.191830232	0.34971321	-5.549027222
1-Tridecene	0.106119298	11.41994921	1.308515583	0.192150738	0.34971321	-5.550228833
Fumonisin FP2	-0.04805819	13.58285506	-1.308468537	0.192166656	0.34971321	-5.550288449
Carbamate	-0.039585062	10.60256728	-1.291253098	0.198057269	0.359577545	-5.571962582
16,17-Dihydro-16a,17-dihydroxygibberellin A4 17-glucoside	0.089466504	14.37676576	1.291120992	0.19810298	0.359577545	-5.572127811
6-Mercaptopurine ribonucleoside 5''-diphosphate	-0.034823791	13.78556863	-1.287780349	0.199261499	0.361210052	-5.576300532
PC(15:0/18:3(6Z,9Z,12Z))	-0.084546396	17.66609267	-1.28397190	0.200588324	0.362731246	-5.581044605

			3			
3,4,5-trihydroxy-6-{2-[(3-methylbut-2-enoyl)oxy]-2-{9-[(3-methylbut-2-enoyl...	0.044426407	13.42197093	1.283732095	0.200672088	0.362731246	-5.581342865
(±)-2-Butylthiazolidine	-0.055237927	13.95105125	-1.282543162	0.201087755	0.362731246	-5.582820781
TG(15:0/18:1(9Z)/16:1(9Z))	-0.050069996	13.92557059	-1.282349476	0.20115553	0.362731246	-5.583061417
N-Acetylanonaine	0.1046322	12.73922276	1.281646351	0.201401711	0.362731246	-5.583934681
Tryptophan	-0.070137456	17.10685457	-1.280156769	0.201923979	0.363202615	-5.585783149
Marimastat	0.076140672	13.3404951	1.274688934	0.203849606	0.36619375	-5.592550222
Rofecoxib	-0.051589297	19.39400052	-1.272424031	0.204651175	0.367160538	-5.595344951

Euglobal Ia1	0.094583991	14.68123735	1.270389241	0.205373272	0.367982444	-5.597851566
Phenol sulfate	-0.125414244	18.16966245	-1.269002476	0.205866469	0.368392629	-5.599557632
2-(3,4-dihydroxyphenyl)-8-[1-(2,4-dihydroxyphenyl)-3-(3,4-dihydroxyphenyl)-...	-0.036890232	13.6441718	-1.265781956	0.207015175	0.369973274	-5.603512595
Annuionone B	0.107589249	12.99491453	1.26255269	0.208171698	0.371563825	-5.607468368
Epitheaflavic acid 3''-gallate	-0.053151632	14.78859099	-1.257258467	0.210077958	0.374486795	-5.613932143
Theophylline	-0.047966213	18.89290167	-1.248532951	0.213247422	0.37904784	-5.624526869
Viguiestenin	0.087057839	14.34372885	1.248346421	0.213315555	0.37904784	-5.624752565
delta-(L-2-Aminoadipyl)-L-cysteinyl-D-valine	0.074380108	12.87684498	1.24791061	0.213474	0.37904784	-5.625279744

			9	799		
1-Cyano-2-hydroxy-3-butene	-0.034795768	12.16392313	-1.247228431	0.213724248	0.37904784	-5.626104605
NIK250	0.054203	13.10678795	1.246073409	0.214147077	0.379315153	-5.627500178
2(3H)-Benzothiazolethione	0.083068447	11.74185276	1.241262851	0.215914655	0.381641012	-5.633298909
13-Heptadecyn-1-ol	0.055873038	12.62589146	1.241010371	0.216007717	0.381641012	-5.633602644
15beta-Hydroxydesogestrel	0.075349949	13.61402112	1.239412431	0.216597379	0.382198414	-5.635523557
Diethylpropion	-0.066362866	12.00015209	-1.233693994	0.21871712	0.385450903	-5.642377825
3,4,5-trihydroxy-6-[2-hydroxy-1-(1-oxo-1H-isochromen-3-yl)butoxy]oxane-2-ca...	0.089876103	13.09139851	1.224958909	0.221983996	0.390394674	-5.65278765
6-Methylnicotinamide	0.055968915	13.38538243	1.224697027	0.22208248	0.390394674	-5.653098617

2-Methylthiophene	0.044907737	14.34897814	1.22149551	0.223288989	0.392021222	-5.656894897
Dillapional	0.086737309	13.30769121	1.220140497	0.223801053	0.392425997	-5.65849869
Tetrahydropentoxyline	0.054631398	13.91409859	1.21835691	0.224476365	0.393115645	-5.660607068
Succinylproline	0.039357238	14.1355578	1.215214409	0.225669765	0.394432076	-5.664314425
8-8"-Dehydrodiferulic acid	0.088522397	12.68461338	1.214888031	0.225793972	0.394432076	-5.664698928
1-Methoxy-1H-indole-3-acetonitrile	-0.082177256	13.68516995	-1.20960414	0.227811657	0.397458635	-5.670909666
Butynal	-0.063590396	12.0839955	-1.208449652	0.228254222	0.397732982	-5.67226311
Bufencarb	0.080602649	13.69235886	1.206340531	0.229064332	0.39864629	-5.674732414
Cilazapril	0.050764053	13.09339981	1.203066889	0.230325812	0.400341872	-5.678556688

Propylhydroxypentanoic acid	0.134656211	13.64292514	1.200380937	0.231364538	0.401230819	-5.681686772
3,4,5-trihydroxy-6-[(3-methylbut-2-enoyl)oxy]oxane-2-carboxylic acid	0.229531262	15.28960004	1.200256101	0.231412897	0.401230819	-5.681832083
Alpha-Terpineol	-0.072306139	11.98038169	-1.193055752	0.234214397	0.405583688	-5.690188149
1-Methyl-4-phenyl-1,2,3,6-tetrahydropyridine N-oxide	-0.069542531	13.50005419	-1.189750644	0.235508416	0.407296645	-5.694007155
Dynemicin A	0.098919728	13.69556105	1.188096317	0.23615803	0.407296645	-5.695914784
Epsilon-(gamma-Glutamyl)-lysine	0.100011134	13.86916685	1.187659913	0.236329608	0.407296645	-5.696417571
Isorhamnetin 3-(6""-malonylglucoside)	-0.039496498	14.63915097	-1.187551362	0.2363723	0.407296645	-5.696542606
1-(3,4-Dimethoxyphenyl)-1,2-ethanediol 1-O-b-D-glucoside	0.03607413	13.65918764	1.185350573	0.237239033	0.408285446	-5.699075164

Doxycycline	0.099921503	13.53971744	1.179510521	0.239549969	0.411754201	-5.705773146
Mosinone A	-0.040531093	13.34946998	-1.177254225	0.240447064	0.412787201	-5.708352164
Sulfolithocholic acid	-0.109914703	14.10076827	-1.175648056	0.241087122	0.413376935	-5.710185098
Koeniginequinone B	-0.129788102	14.90444525	-1.1699768	0.24335678	0.416658798	-5.716637302
dUDP	-0.059239191	13.88666823	-1.169373927	0.243598938	0.416658798	-5.717321382
Telaprevir	-0.042919094	13.43683333	-1.166815464	0.244628504	0.41762762	-5.720220601
N-Acetylpuromycin	0.038058866	13.25040687	1.165780354	0.245045921	0.41762762	-5.721391795
(Iso)Citrate	-0.086173441	18.96448389	-	0.245064	0.41762762	-5.721442823

			1.165735235	127		
Amlexanox	0.071918177	13.26769959	1.160498095	0.247183878	0.420725672	-5.727352533
Pantothenic acid	0.109776079	15.31991649	1.15868968	0.247918835	0.421381356	-5.729387093
N-Undecanoylglycine	0.052103457	13.65959037	1.158063528	0.248173668	0.421381356	-5.730090816
Mandelonitrile rutinoside	0.058303657	13.51702521	1.157196037	0.248527027	0.421467976	-5.731065157
Erythro-5-hydroxy-L-lysinium(1+)	0.185177381	13.25893315	1.150532946	0.251252951	0.42518452	-5.738524924
N-Acetyl-O-demethylpuromycin-5'-phosphate	0.088538313	13.38355561	1.150348803	0.251328583	0.42518452	-5.738730481
7-Ketodeoxycholic acid	-0.06824863	14.7046482	-1.148188383	0.25221711	0.42543556	-5.741139705
Diphyllin	0.130714144	15.01718796	1.148001891	0.252293913	0.42543556	-5.741347465

Dopamine 4-sulfate	-0.195161775	15.13953876	-1.147762451	0.252392546	0.42543556	-5.741614162
Obtusilactone A	-0.060129047	12.84363453	-1.144463589	0.253754201	0.427040773	-5.745282966
3-Methyl-3-butenyl apiosyl-(1->6)-glucoside	0.070535878	13.37859513	1.143574431	0.254122094	0.427040773	-5.746270054
Niazimicin A	0.076953395	13.69881609	1.143232003	0.254263875	0.427040773	-5.746649993
Ubiquinone-1	0.043834501	13.18418522	1.139397787	0.255855203	0.429196332	-5.750896567
Carinol	0.043087322	14.13301752	1.136682115	0.256986505	0.430575948	-5.753895781
2-Oxo-4-phosphonobutanoate	0.040100445	13.12199848	1.130879739	0.259415383	0.433835148	-5.760280302
Gamma-glutamyl-L-putrescine	-0.048657153	13.07046483	-1.130549335	0.259554 17	0.433835148	-5.760642884

p-Hydroxyphenylacetic acid	0.105360003	16.55667319	1.128924316	0.26023752	0.434456411	-5.762424641
(3beta,5alpha,9alpha,22E,24R)-3,5,9-Trihydroxy-23-methylergosta-7,22-dien-6...	-0.06135508	13.49368716	-1.12560746	0.261636208	0.436268988	-5.766053566
Mycinamicin VI	-0.138191924	13.28586429	-1.123478212	0.262536845	0.437247745	-5.768377589
(+)-7-epi-Syringaresinol 4''-glucoside	0.031250219	13.56315217	1.120014525	0.264006533	0.439170772	-5.772148835
Avenanthramide 1c	0.067239129	13.17697734	1.118092947	0.264824343	0.439890946	-5.77423608
2,3,5-Trimethylfuran	-0.030710234	12.29496992	-1.117515171	0.265070585	0.439890946	-5.774862977
Phytolaccoside A	0.089027432	13.51721004	1.1161494	0.265653291	0.440333755	-5.776343588
N-Docosahexaenoyl GABA	-0.112086902	14.01932978	-1.113489952	0.266790493	0.441693524	-5.779221523

Succinate	-0.161544485	13.97668581	-1.110039537	0.268270941	0.443617665	-5.7829453
Carumonam sodium	-0.033866815	14.81980891	-1.107197362	0.269494676	0.445113245	-5.786004073
Glutamine	0.074828853	18.71356608	1.099734318	0.272726335	0.449917764	-5.793998987
Avocadienofuran	-0.046932696	12.7824543	-1.096146982	0.274289194	0.451961154	-5.79782297
4-Acetylimidazo[4,5-c]pyridine	-0.051001502	12.13090413	-1.094410729	0.275047819	0.452676104	-5.799669325
Alanine	0.049009503	16.96862768	1.092116829	0.276052309	0.453793536	-5.802104255
Phenylalanine	0.064488647	18.53108164	1.089243279	0.277314176	0.455330932	-5.805147347
15(S)-Hydroxyeicosatrienoic acid	-0.068476947	14.80487757	-	0.277865	0.45569906	-5.806470918

			1.087991109	281		
2-Naphthol	-0.08278168	12.95724861	-1.086169201	0.278668478	0.45647927	-5.808394028
Heptyl 4-hydroxybenzoate	0.063198056	12.96682085	1.08523449	0.279081167	0.456618717	-5.809379422
Citronellyl formate	-0.065669407	13.92587974	-1.080954013	0.280976 41	0.459180675	-5.813881292
Cuscohygrine	0.046978083	13.02144659	1.076846063	0.282803523	0.461625423	-5.818185174
Gabapentin	-0.084354921	12.38358203	-1.069102603	0.286269632	0.466736686	-5.826253914
5-Hydroxyomeprazole	-0.186750255	15.31035358	-1.06332073	0.288876474	0.469915905	-5.832241122
Aztreonam	0.147257385	13.68132451	1.063282464	0.288893781	0.469915905	-5.83228064

Furoic acid	-0.071194548	16.34147512	-1.057131842	0.291684628	0.473902531	-5.838614225
{[1-(4-methoxyphenyl)pentan-3-yl]oxy}sulfonic acid	0.243499895	19.31222691	1.056222646	0.29209872	0.474022835	-5.839547384
3-Oxodecanoic acid	-0.036775215	13.86971753	-1.052850981	0.293637809	0.475574122	-5.843000982
Propyl propane thiosulfonate	0.056116346	13.52556152	1.052634187	0.293736958	0.475574122	-5.84322267
Isopetasoside	0.064159238	14.21093433	1.049891959	0.294993043	0.476474567	-5.846022911
Paracetamol sulfate	0.220941726	19.27682389	1.049559013	0.295145797	0.476474567	-5.846362409
Cyclohexanone	-0.02823882	12.41877531	-1.049182665	0.295318526	0.476474567	-5.846746034
13-OxoODE	0.076883804	14.84761949	1.04808372	0.295823293	0.476737191	-5.847865451

Rhazidigenine Nb-oxide	-0.072087157	17.89710681	-1.041768319	0.298735348	0.480874221	-5.854276001
4-Hydroxy-17beta-estradiol-2-S-glutathione	0.045679993	13.31457574	1.039406984	0.299829104	0.482078167	-5.856663069
D-Limonene	0.037413731	11.63453338	1.036289978	0.301276995	0.483848078	-5.859805835
Furmecyclox	0.096455338	13.23545459	1.032231044	0.303169445	0.486104745	-5.863884317
19-Norandrosterone	0.07327824	14.19095821	1.031574196	0.303476442	0.486104745	-5.864542839
Tricholomic acid	0.046478946	12.23682468	1.031035683	0.303728288	0.486104745	-5.865082416
Dodecylaldehyde	-0.042399029	11.90747148	-1.028487398	0.304921935	0.487455478	-5.867631952
1H-Pyrrolo[2,1-c][1,4]thiazine	0.035148149	11.88968744	1.025354293	0.306393811	0.489074884	-5.870758038
alpha-EMTBL	-0.076255912	12.67004397	-	0.306948	0.489074884	-5.871932091

			1.024175154	975		
Isoelemicin	-0.197934153	15.54031025	-1.023599251	0.307220367	0.489074884	-5.872505023
Argyrolobine	0.048925735	12.7821246	1.022663991	0.307661445	0.489074884	-5.873434781
Carpipramine maleate	0.039046003	14.00032041	1.02215066	0.307903716	0.489074884	-5.873944734
C10:1	0.056471518	14.19129566	1.021862034	0.308039991	0.489074884	-5.87423135
C21:1	-0.05254337	13.38844117	-1.020729029	0.308575331	0.489367477	-5.875355688
Acetyl-N-formyl-5-methoxykynurenamine	0.177410559	18.45098602	1.019790716	0.309019149	0.489370696	-5.876285889
Thiophene	-0.040147642	11.27321903	-1.019240763	0.309279471	0.489370696	-5.876830694

Euphornin	0.09026327	15.20771681	1.010353728	0.313506423	0.495496546	-5.88559421
Photinus luciferin	0.044785057	13.48959896	1.006162416	0.31551317	0.498103464	-5.889700903
Pentonic acid; S-Propyl 1-propanesulfinothioate; Methylxanthine	-0.064609512	17.13887413	-1.000383514	0.318293941	0.501925061	-5.895335419
Nafcillin	0.188275091	14.8737227	0.996295898	0.320270612	0.504101265	-5.899301502
6-Hydroxy-5-methoxyindole glucuronide	0.049633227	13.50499266	0.996034654	0.320397217	0.504101265	-5.899554432
Piperazine citrate	-0.028723257	13.46621216	-0.99414584	0.321313564	0.504973065	-5.901381182
Codonocarpine	0.049863166	13.13382794	0.992153886	0.322281815	0.505299773	-5.903303962
Methyl beta-naphthyl ketone	0.030125461	13.92670514	0.991752855	0.32247698	0.505299773	-5.903690604
5-(2-carboxylatoethyl)-4-oxo-4,5-dihydro-1H-imidazol-5-ide	0.064527509	14.43964476	0.991113866	0.32278811	0.505299773	-5.904306348

Pyrocatechol sulfate	-0.062641711	16.10903542	-0.990737671	0.322971376	0.505299773	-5.904668674
Urolithin B 3-O-glucuronide	0.055381467	12.86780404	0.988338964	0.324141524	0.506561977	-5.906975744
Metharbital	-0.0622815	13.08243078	-0.987260777	0.324668395	0.50681718	-5.908010937
N4-Acetylcytidine	0.041881904	14.72900509	0.984259122	0.326138151	0.508542038	-5.910887004
Imidazolone	-0.028874029	11.59563545	-0.978361063	0.329038796	0.512491711	-5.916513022
Methicillin sodium	0.091043758	14.37629248	0.974796922	0.330799767	0.514659459	-5.919896537
Hesperidin	0.03231299	13.52617104	0.973772457	0.331307069	0.514874085	-5.92086682
2,5-Dimethyl-3-furanthiol acetate	-0.044080765	14.12567392	-0.97202364	0.332174231	0.51547396	-5.922520809

			1			
Entacapone	0.137184068	13.60708711	0.971503093	0.332432633	0.51547396	-5.923012561
2-N,6-N-Bis(2,3-dihydroxybenzoyl)-L-lysine	0.080845369	13.55965935	0.96845906	0.33394632	0.517245745	-5.925882985
MK826	0.064647547	13.23805999	0.964906341	0.335718613	0.519413703	-5.929221797
Hydroxyprolyl-Isoleucine	0.082960603	14.74220658	0.963192709	0.336575643	0.519901294	-5.930827905
Urocanate	0.071342484	14.62863958	0.962259536	0.337042942	0.519901294	-5.931701335
C24:0	-0.04670486	14.8903605	-0.962040611	0.337152632	0.519901294	-5.931906123
Cavipetin C	-0.030099557	13.7478101	-0.960121938	0.338114956	0.520809115	-5.933698921
5-Amino-4-imidazole carboxylate	0.172706594	12.77605544	0.959006712	0.338675121	0.521096157	-5.934739352

Saphenamycin	0.055831123	12.5707341	0.957291227	0.339537959	0.521847757	-5.936337447
1-(1-Methoxy-1-methylethyl)-4-methylbenzene	-0.197616511	15.97510025	-0.954816231	0.340785309	0.523188019	-5.938638082
Cycloartanyl ferulate	-0.033897936	13.60878295	-0.952684948	0.3418618	0.524263311	-5.940614489
2-Polyprenyl-3-methyl-5-hydroxy-6-methoxy-1,4-benzoquinone	-0.063598989	13.86820486	-0.951574715	0.342423436	0.524547549	-5.94164231
Benzyl methyl disulfide	-0.06404403	14.67589277	-0.950742926	0.342844604	0.524616221	-5.942411578
Heptabarbital	0.100899109	12.09633291	0.948130283	0.344169656	0.525510152	-5.944823504
Tryptophyl-Valine	-0.100605472	12.88636589	-0.94769361	0.344391444	0.525510152	-5.945225988
Dehydrocarnitine	-0.045414335	12.75013607	-	0.344559	0.525510152	-5.945531167

			0.947362375	741		
2-Hydroxyethanesulfonate	0.085305582	14.10961571	0.944603612	0.34596349	0.527002406	-5.948068806
Propofol	0.223196429	17.88902834	0.943164828	0.346697045	0.527002406	-5.949389357
Taurine	0.102816389	16.64443367	0.9424356	0.347069218	0.527002406	-5.950057897
2-Methoxyacetaminophen sulfate	0.15054291	16.67209685	0.941934679	0.347325019	0.527002406	-5.950516835
Methyl isothiocyanate	-0.084845919	11.10361794	-0.94173227	0.347428416	0.527002406	-5.95070221
Cefotiam	0.048587398	12.98325663	0.939208737	0.34871917	0.52838535	-5.953010066
L-2-Amino-4-(hydroxymethylphosphinyl)butanoate	-0.056317846	12.9987595	-0.935847869	0.350442968	0.529693594	-5.956074161
Sorbitan palmitate	-0.024495168	12.81049638	-0.93456288	0.351103475	0.529693594	-5.957242798

			7			
Thymol	0.173968637	15.36648276	0.934511548	0.351129881	0.529693594	-5.957289456
Glycyrrhizin	-0.073320406	14.23100241	-0.934435915	0.351168784	0.529693594	-5.957358188
Nopalinic acid	0.044474397	13.72078188	0.933826253	0.351482478	0.529693594	-5.957912019
Cidofovir	0.043570985	13.76802856	0.930957399	0.352961009	0.530917894	-5.96051334
Erucic acid	0.057208908	14.74983664	0.930772201	0.353056591	0.530917894	-5.960680995
CI Acid Orange 20	0.03926984	12.69721344	0.927103333	0.354953519	0.533195264	-5.963995506
3,4,5-Trimethoxycinnamic acid	0.159884749	16.34340922	0.924461706	0.356323335	0.534545375	-5.966373956
Acetyl-Leu	-0.054324743	13.1830287	-0.923268131	0.356943362	0.534545375	-5.967446411

(-)-Epigallocatechin 3-(3-methyl-gallate)	0.073872754	14.32109075	0.922930008	0.357119132	0.534545375	-5.967749973
Cyclo[(Z)-alpha,beta-didehydrophenylalanyl-L-leucyl]	0.044938604	14.42016085	0.922416558	0.357386147	0.534545375	-5.968210729
4-Nitrophenyl sulfate	-0.013615476	13.86386197	-0.920618284	0.358322326	0.535371192	-5.969822451
2-(4-Methyl-5-thiazolyl)ethyl formate	-0.069851846	12.35534045	-0.918651427	0.359348045	0.536328882	-5.971581695
3b-Hydroxy-5-cholenoic acid	-0.065840005	14.5657673	-0.910475382	0.363631759	0.542141895	-5.978854716
Cholate	-0.072767784	15.39775598	-0.90748225	0.365207977	0.543420399	-5.98150114
beta-Rhodomycin	0.017947011	12.78365336	0.906778726	0.365579083	0.543420399	-5.982121917
Proparacaine	0.066054734	13.91667616	0.906627707	0.365658776	0.543420399	-5.982255111

C6:2	-0.032019639	12.70577462	-0.90247354	0.367855218	0.546102422	-5.985910334
Cyclobrassinone	0.132815928	16.54086155	0.894409151	0.372142688	0.551879689	-5.992958593
Undecanal	-0.030718973	11.91701044	-0.890879955	0.374028778	0.554087264	-5.996023359
LysoPE(0:0/20:4(5Z,8Z,11Z,14Z))	-0.083233513	16.17890227	-0.887583779	0.375795705	0.555453814	-5.998874913
Luteolin 7-O-(2-apiosyl-4-glucosyl-6-malonyl)-glucoside	0.057760754	13.59221163	0.887387319	0.375901182	0.555453814	-5.999044541
Ricinine	0.031811883	13.6127189	0.886231633	0.376522027	0.555453814	-6.000041633
Heptanone	-0.054058042	11.83621621	-0.885751589	0.376780098	0.555453814	-6.000455423
L-Capreomycidine	-0.050299535	12.86923426	-0.88527702	0.37703533	0.555453814	-6.000864268

			7			
Minaprine	0.035312947	13.50763582	0.884085511	0.377676633	0.555453814	-6.001889826
2-cyano-3-(3,4-dihydroxy-5-nitrophenyl)-N,N-diethylpropanamide	0.075554754	12.97737653	0.883966972	0.37774047	0.555453814	-6.001991779
5-Phenylvaleric acid	0.152952856	13.94499537	0.88322553	0.378139916	0.555455261	-6.002629174
SN38 glucuronide carboxylate form	-0.072479952	13.23722874	-0.879592447	0.380100992	0.557748192	-6.005744752
Berteroin; 7-Cyano-7-carbaguanine	-0.033452923	14.17689052	-0.875902889	0.382098983	0.560090413	-6.008895719
L-2-Aminoethyl seryl phosphate	-0.055289337	13.82828096	-0.873506463	0.383400179	0.561146763	-6.01093528
5-Oxoavermectin ''2b'' aglycone	0.036159764	13.45258356	0.871907671	0.384269799	0.561146763	-6.012292903
Peonidin-3-glucoside	0.061511976	12.94449435	0.87135262	0.384571	0.561146763	-6.012763646

			5	986		
2,6-Di-tert-butylbenzoquinone	-0.0399659	12.82452377	-0.871158269	0.384677835	0.561146763	-6.012928412
Deoxyribose	0.046408563	13.36778132	0.870544809	0.385012051	0.561146763	-6.013448236
(S)-2,3,4,5-Tetrahydropyridine-2-carboxylate	0.05181263	12.32923199	0.869946096	0.385338405	0.561146763	-6.013955213
Omeprazole	0.13971182	14.42480103	0.869355001	0.385660773	0.561146763	-6.0144554
Hydroxyphenylacetylglycine	-0.128015749	12.97111477	-0.868660058	0.386039989	0.561146763	-6.015043031
Myxalamid A	-0.071207197	13.1250198	-0.865844833	0.387578547	0.562505123	-6.017418765
cis-Methylbixin	-0.043047561	14.57063001	-0.864443467	0.388345814	0.562505123	-6.018598507

Vitisidin A	0.117078562	15.04071278	0.861831841	0.3897782	0.562505123	-6.020792047
1,2-Diacylglycerol-LD-PI-pool	0.067835601	12.99111395	0.861131269	0.390162989	0.562505123	-6.021379346
Hexonic acid; 1,3-Dimethyluric acid	0.101050214	17.40375095	0.86074077	0.390377571	0.562505123	-6.021706501
C14:1	0.072195852	16.20998589	0.860639273	0.390433356	0.562505123	-6.02179151
1,2-Dinitrobenzene	-0.029960916	13.93053019	-0.860607749	0.390450684	0.562505123	-6.021817911
Uracil	-0.061374321	14.07662241	-0.860429697	0.39054856	0.562505123	-6.021967009
Benzosemiquinone	0.058918856	13.48528639	0.860324963	0.39060614	0.562505123	-6.022054697
Streptamine	0.124076317	13.25768458	0.855129662	0.393468891	0.566042966	-6.026391147
Dicrotophos	0.055613587	12.2129261	0.85325976	0.394502	0.566389323	-6.027945548

			1	382		
[3-(7-hydroxy-4-oxo-4H-chromen-2-yl)phenyl]oxidanesulfonic acid	0.047597565	14.01154651	0.853223822	0.394522262	0.566389323	-6.02797539
LysoPE(0:0/18:1(11Z))	-0.063170915	16.31134697	-0.851623749	0.395407958	0.566749794	-6.029302752
(E)-4-(Trimethylammonio)but-2-enoate	-0.03210391	12.52108782	-0.851301506	0.395586478	0.566749794	-6.029569774
Ribitol	0.105686097	15.17639574	0.849811849	0.396412369	0.56734994	-6.030802851
Methylgingerol	0.046604849	13.7020003	0.848589724	0.397090718	0.567737909	-6.031812876
Oryzarol	-0.026611189	12.82799647	-0.844738443	0.399233008	0.570215997	-6.034986324
Glutarate	0.024468722	14.38034852	0.843165866	0.40010977	0.570883336	-6.036278003
Cuminaldehyde	0.110261417	13.94337895	0.83751620	0.403269	0.574802992	-6.04089879

			5	244		
2-(2H-1,3-benzodioxol-5-yl)-2-oxoacetic acid	-0.057447648	12.63015347	-0.835088332	0.404631601	0.576128277	-6.04287504
Phosphoglycerate; Diethyldithiophosphate	-0.039419658	12.66102316	-0.834387069	0.405025618	0.576128277	-6.043444796
1-Propenyl 1-(propylsulfinyl)propyl disulfide	0.073600594	14.96242969	0.830093648	0.407442984	0.578647358	-6.046922714
Disinomenine	-0.026056132	13.59724322	-0.829767872	0.407626761	0.578647358	-6.047185884
Tryptophanamide	0.034036269	13.43049858	0.823239435	0.411320086	0.583296235	-6.052438089
2-Quinolinecarboxylic acid	0.031116611	13.24781759	0.818619667	0.413945667	0.586423029	-6.056129848
C13:0	-0.031598438	13.31178782	-0.816446151	0.415184403	0.58758077	-6.057859614

Ammeline	0.086319289	11.49811171	0.810100538	0.417667672	0.590418822	-6.06130432
2-Benzothiazolesulfonamide	0.071466214	12.21084765	0.811101229	0.418239964	0.590418822	-6.062093875
Dihydrothymine	0.051311535	16.40569572	0.810716532	0.418460399	0.590418822	-6.062397567
Naringenin	0.108627581	15.05199004	0.808619625	0.419663159	0.591517131	-6.064050416
Fesoterodine	-0.030950376	12.98677475	-0.807706558	0.420187521	0.591657984	-6.064768795
C19:2	-0.039892367	13.98692185	-0.80160349	0.423702378	0.596005161	-6.069549833
Benzothiazole	0.101382637	12.88054249	0.799328531	0.425016985	0.59725169	-6.071322778
GMP	0.031224767	13.20374444	0.797623114	0.426004048	0.598035895	-6.072648578
(R)-3,4-Dihydro-2-methyl-2-(4,8,12-trimethyl-3,7,11-tridecatrienyl)-2H-1-be...	-0.038376583	13.10057707	-0.79625625	0.426796134	0.598545081	-6.073709152

			2			
LysoPE(0:0/22:6(4Z,7Z,10Z,13Z,16Z,19Z))	-0.080820557	16.01401316	-0.794055091	0.428073505	0.599733132	-6.075413276
L-3,4-Dihydroxybutan-2-one 4-P	0.070263997	12.36509731	0.791741094	0.429418771	0.601013823	-6.077199701
Uridine	0.042803136	17.15376035	0.79038498	0.430208311	0.60151493	-6.078244225
Torvanol A	-0.050251553	13.84491219	-0.789012211	0.431008411	0.602029785	-6.079299765
Octanoic acid	-0.142824685	17.04401016	-0.787825364	0.431700849	0.602393377	-6.080210876
Tricin 7-glucoside	0.054678832	12.93144706	0.785972428	0.432783199	0.603299779	-6.081630602
Beauvericin	-0.037240374	13.40357073	-0.784526269	0.433629037	0.603875003	-6.082736346

Dextromethorphan	-0.039190857	12.11832062	-0.781095201	0.435639668	0.60572376	-6.085351667
UDP-2,3-diacetamido-2,3-dideoxy-alpha-D-glucuronate	-0.020989486	14.05185588	-0.780329396	0.436089174	0.60572376	-6.085933844
Acetaminophen	0.131621685	17.39541081	0.779796292	0.436402249	0.60572376	-6.086338783
Fasciculic acid A	0.052428706	13.53768619	0.779298548	0.436694677	0.60572376	-6.086716615
Alprenolol	-0.041405543	12.09747774	-0.772391075	0.440764581	0.610761258	-6.091935243
4-Methyl-2-oxopentanoate	-0.037489781	16.18163018	-0.767542246	0.443634561	0.613946048	-6.095570965
Lirioresinol A	-0.034410901	13.51105561	-0.767020916	0.443943771	0.613946048	-6.09596051

Hydroxyl frovatriptan	0.164701276	13.64205972	0.765254059	0.444992645	0.614261698	-6.097278776
5-Hydroxytryptophol glucuronide	0.080174518	13.11209336	0.765151939	0.445053311	0.614261698	-6.097354875
Bumetanide	0.044724347	13.00465602	0.764358803	0.445524646	0.614304013	-6.097945579
N-(3-acetamidopropyl)pyrrolidin-2-one	0.045007071	13.18154783	0.762751023	0.446480977	0.61501431	-6.099141135
4-Propylphenol	0.083286198	13.79836573	0.760192781	0.448005 08	0.616504523	-6.101038301
Octadecyl fumarate	-0.026981729	13.98844933	-0.757261066	0.449755 34	0.618302706	-6.103204639
1,4-Dimethyl-7-ethylazulene	0.043033322	12.62208713	0.750070324	0.454064768	0.623612105	-6.108482862
{4-[(E)-2-{3,5-dihydroxy-4-[(1E)-3-methylbut-1-en-1-yl]phenyl}ethenyl]pheny...	0.047255378	13.49172974	0.746999619	0.455912171	0.624939768	-6.110721594
Labetalol	0.03032225	13.84080577	0.746973205	0.455928 08	0.624939768	-6.110740812

3,4,5-trihydroxy-6-[(4-hydroxy-7-methoxy-2,2-dimethyl-3,4-dihydro-2H-1-benz...	0.053909809	14.22176478	0.746155965	0.456420476	0.625000141	-6.11133507
8-Hydroxy-5,6-octadienoic acid	0.032849171	13.90247216	0.741801009	0.459049455	0.627983258	-6.11449088
Hydrocinnamic acid	0.04227571	13.81915553	0.739628372	0.460364211	0.629164421	-6.116058407
Cephapirin	0.046735573	12.68341681	0.738453787	0.461075885	0.629519866	-6.116903949
Apigenin 7-[rhamnosyl-(1->2)-galacturonide]	-0.02728271	14.6260352	-0.736180622	0.462454 94	0.630784918	-6.118536524
(±)-(Z)-2-(5-Tetradecenyl)cyclobutanone	0.04334814	12.98871008	0.732789833	0.464516322	0.632731814	-6.120962467
Stearoylethanolamide	-0.022999215	12.48212404	-0.732340154	0.464790084	0.632731814	-6.121283354
GDP-alpha-D-mannose(2-)	0.031591835	13.98199002	0.729370817	0.466600068	0.634576093	-6.123397326
Mecarbam	0.031772212	13.12373571	0.72760178	0.467680	0.63542524	-6.124652703

				27		
psi-Pelletierine	0.030683242	11.62988852	0.722176713	0.471001588	0.639314716	-6.128483628
Rubraflavone A	-0.025935983	17.50327075	-0.719454206	0.472673281	0.640959682	-6.130395386
(R)-3-Hydroxy-5-phenylpentanoic acid	0.092520391	14.21625029	0.709104358	0.479058298	0.648375977	-6.13759753
Cilastatin; 2-{4-[(1E)-1,2-diphenylbut-1-en-1-yl]phenoxy}acetic acid	-0.065422764	14.46993501	-0.709081202	0.479072637	0.648375977	-6.137613527
Nitrosopiperidine	-0.051885618	12.73092771	-0.707818467	0.479854889	0.648804767	-6.138485091
Dehydrophytosphingosine	-0.029967862	13.34865286	-0.70532201	0.481403482	0.649848794	-6.140203644
1-Methylpyrrolo[1,2-a]pyrazine	0.019071565	13.02477382	0.705070901	0.481559 4	0.649848794	-6.140376171
C4:0 (Butyric acid)	0.024456884	12.97078765	0.70413137	0.482143	0.650007121	-6.141021144

			6	015		
Bisisodiospyrin; Brilliant blue	0.079040616	14.68661225	0.702896625	0.482910608	0.650412934	-6.141867484
Succinic aldehyde	-0.021719686	15.65634497	-0.701900875	0.483530111	0.650618701	-6.142548928
Maslinic acid	-0.043906928	14.65078505	-0.700990171	0.484097082	0.650753454	-6.143171328
Procaine	0.04667897	12.26453635	0.693816942	0.488575545	0.656140953	-6.148045603
C14:0	-0.049824757	18.80330892	-0.691580629	0.489976328	0.657388837	-6.149554996
Kamahine C	-0.039510687	15.52735664	-0.68867291	0.491800917	0.659114918	-6.151510299
3-Nitrotyrosine	-0.051127388	14.49568502	-0.688024194	0.492208486	0.659114918	-6.151945411

1-Acetoxy-2-hydroxy-16-heptadecen-4-one	0.033368744	14.17915036	0.686522985	0.49315235	0.659382237	-6.15295075
Annoglabasin F	-0.044011322	13.87476737	-0.686202238	0.493354141	0.659382237	-6.153165266
3-hydroxynonanoyl carnitine	-0.02683145	13.40129839	-0.679442275	0.497617383	0.66394197	-6.157663132
Sulfolithocholylglycine	0.071268929	14.25874684	0.679282579	0.497718335	0.66394197	-6.157768852
O-Isopentenylhalfordinol	0.057650869	13.26900627	0.66960509	0.503856429	0.671076597	-6.164129296
1-Phenyl-1-pentanone	-0.13308979	15.44630946	-0.66933305	0.504029553	0.671076597	-6.164306779
Allyl isothiocyanate	-0.018719749	11.86868995	-0.668377579	0.504637862	0.6712454	-6.164929574
Arabinopyranobiose	0.034664235	14.47670794	0.66456066	0.507071818	0.673839956	-6.167408679

(7''S,8''S)-4,7''-Epoxy-3,8''-bilign-7-ene-3'',5-dimethoxy-4'',9,9''-triol ...	0.027492403	13.42276348	0.661636865	0.508940444	0.675679028	-6.169298135
Levetiracetam	-0.097113267	12.65383876	-0.656176265	0.512440077	0.679677894	-6.172804748
Glycerol trihexanoate	-0.018698958	13.17905336	-0.65418842	0.513717193	0.680284432	-6.17407409
Acetone	0.026183339	14.00892651	0.653792028	0.513972 06	0.680284432	-6.174326749
Capsianoside I	-0.022780519	13.37126835	-0.653186689	0.514361 4	0.680284432	-6.174712295
Alpha-Linolenic acid	0.060883091	18.85417128	0.652013939	0.515116125	0.680636851	-6.175458218
Quercetin 4'',7-diglucoside	0.019201251	13.553944	0.64677117	0.518497186	0.683888939	-6.17877654
2'',7-Dihydroxy-4''-methoxy-8-prenylflavan 2'',7-diglucoside	0.020806734	13.51786484	0.646676194	0.518558543	0.683888939	-6.178836407
Cyanidin 3-glucogalactoside	-0.017295898	13.39543867	-	0.521025	0.686492453	-6.181232849

			0.642862911	118		
2-Methyl-4-heptanone	-0.024839798	11.73690724	-0.641361711	0.521997818	0.687124606	-6.1821724
3-hydroxyundecanoyl carnitine	-0.033699319	13.08879967	-0.639706696	0.523071271	0.687539423	-6.183205683
cis-4-Decenedioic acid	0.038017367	13.79075269	0.63935524	0.523299374	0.687539423	-6.183424767
Tromethamine	-0.017289412	11.72444956	-0.637465076	0.524527016	0.688033355	-6.184600964
6-O-Glc-paromamine	0.013294939	12.51526267	0.637256692	0.524662451	0.688033355	-6.184730423
(R)-Skyrin 2-xyloside	0.018740289	13.66691092	0.635213392	0.525991399	0.688897517	-6.185997598
Cholestane-3,7,12,25-tetrol-3-glucuronide	0.040537696	14.20454797	0.634724243	0.526309796	0.688897517	-6.186300348

N1,N8-Diacetylspermidine; 3-[[5-Methyl-2-(1-methylethyl)cyclohexyl]oxy]-1,2...	-0.024258211	12.73493444	-0.624934554	0.532702878	0.696181745	-6.192310648
Nicotinamide	0.023094192	13.29998007	0.623975825	0.53333109	0.696181745	-6.192894249
2''-(E)-Feruloyl-3-(arabinosylxylose); 12-Hydroxynevirapine glucuronide	0.026201397	14.00018563	0.623905845	0.53337696	0.696181745	-6.192936813
Indole-5,6-quinone	0.02336683	13.3500498	0.622540694	0.534272172	0.696181745	-6.193766179
Epanolol	-0.050306156	16.13815753	-0.62228323	0.534441092	0.696181745	-6.193922392
Retinal	-0.034219381	14.91346753	-0.621627643	0.53487134	0.696181745	-6.194319872
Resveratrol 4''-(6-galloylglucoside)	0.018230951	13.86401466	0.614717668	0.539416893	0.701443236	-6.19848398
Monoisobutyl phthalic acid	0.057678358	14.46691688	0.612293977	0.541015861	0.702677424	-6.199933566
1-Octanal	0.027531458	11.85397699	0.61132624	0.541654	0.702677424	-6.200510764

			4	964		
Thiobenzamide S-oxide	-0.030944222	11.88942877	-0.610198889	0.542399962	0.702677424	-6.201182021
N-desmethylalmotriptan	0.078686346	12.65280386	0.609752424	0.542695144	0.702677424	-6.201447516
Toluene	0.021661461	12.05482429	0.609219415	0.543047651	0.702677424	-6.201764222
Anisidine	0.064859165	12.68999571	0.608013099	0.543845876	0.702677424	-6.202479979
gamma-Glutamylisoleucine	0.028771754	14.56804632	0.607939637	0.543894505	0.702677424	-6.202523522
Androstenol	-0.045700523	13.05091519	-0.606605011	0.544778358	0.703167621	-6.203313668
Methyl propenyl ketone	-0.021625419	12.3641235	-0.603092641	0.547107843	0.70448755	-6.205384848
erythro-3-Hydroxy-Ls-aspartate; Dihydro-4,6-	0.034501944	11.89651002	0.60287398	0.547253	0.70448755	-6.205513388

dimethyl-4H-1,3,5-dithiazine			8	022		
3-Oxohexadecanoic acid	-0.019174312	15.23696957	-0.599835618	0.549272404	0.70448755	-6.207294746
Desulfoglucotropeolin	0.040523873	13.77298548	0.599640559	0.549402172	0.70448755	-6.207408801
Anhydroamarouciaxanthin B	0.049197764	13.90864574	0.598561874	0.550120068	0.70448755	-6.208038859
Lipoyl-AMP	-0.019788987	13.26590671	-0.598208892	0.550355089	0.70448755	-6.20824479
6-Methylquinoline	-0.029726211	14.38249746	-0.598132206	0.550406154	0.70448755	-6.208289512
Testosterone enanthate	-0.015381745	13.23922039	-0.597571341	0.550779707	0.70448755	-6.208616432
Isopulegone caffeate	0.023696855	13.66112739	0.597370669	0.550913391	0.70448755	-6.208733326

ADP-ribose	0.022201634	13.76262485	0.597281348	0.5509729	0.70448755	-6.208785345
Creatinine	-0.031646719	16.97590614	-0.59638625	0.551569425	0.70448755	-6.209306198
Clerodendrin A	0.032916945	13.59795747	0.595671846	0.552045757	0.70448755	-6.209721348
Acrolein	-0.028214163	11.99238457	-0.595184526	0.552370798	0.70448755	-6.210004252
Dibenzo[1,4]dioxin-2,3-dione	-0.097327313	15.50295008	-0.593506816	0.553490545	0.705270403	-6.210976448
Dihydroergotamine	0.023950231	13.54016264	0.588940812	0.556543678	0.708513139	-6.213608498
Methylsyringin	0.109399443	15.11351897	0.587612393	0.557433497	0.708998445	-6.214370454
N-Formyl-norleucyl-leucyl-phenylalanyl-methylester	0.017257356	13.10975046	0.586382145	0.558258181	0.709400095	-6.215074572
Hygromycin A	-0.035271321	12.79919318	-	0.558772	0.70940718	-6.215512832

			0.585615108	657		
Xanthurenic acid	0.035786667	13.07138104	0.584695759	0.559389 6	0.709544224	-6.216037365
Dihydrolipoate	-0.035555504	13.67108335	-0.58276663	0.560685 253	0.710378537	-6.217135357
4-Hydroxydebrisoquine	-0.023980419	12.59320668	-0.582199323	0.561066 549	0.710378537	-6.21745756
Leukotriene C5	-0.017472676	13.14798069	-0.575448916	0.565613 282	0.715485404	-6.221267462
2-amino-4-({1-[(carboxymethyl)-C-hydroxycarbonimidoyl]-2-({2,3,4,6-tetrahyd...	-0.039703066	13.55197407	-0.572386544	0.567681 803	0.716757909	-6.222981249
Cys-Gly	-0.019112585	13.89645404	-0.572108408	0.567869 854	0.716757909	-6.22313645
Bisnorcholic acid	-0.026463984	13.90795984	-	0.568161	0.716757909	-6.223377163

			0.571676759	757		
4,11,13,15-Tetrahydroridentin B	-0.019622858	13.5384517	-0.568510643	0.570305052	0.71881125	-6.225137241
Propenoic acid C3:1	-0.024695664	15.34975377	-0.563274646	0.573858041	0.722636052	-6.228026607
3,17-Androstanediol glucuronide	-0.023160374	13.5242714	-0.560312041	0.575873045	0.724518975	-6.229649648
LysoPE(0:0/18:2(9Z,12Z))	-0.05591264	16.11631333	-0.558219301	0.577298437	0.725657368	-6.230790997
Glycolate	-0.023696984	14.77807769	-0.556698752	0.578335152	0.726305587	-6.231617612
Catheduline E2	-0.024584853	13.91757614	-0.55424087	0.580012805	0.727756841	-6.232949034

L-Cladinose	-0.044383047	13.06283549	-0.549897552	0.582982988	0.730289237	-6.235287427
Piperolein B	-0.041051177	14.80663184	-0.549757543	0.583078852	0.730289237	-6.235362501
Sulfasalazine	0.034245665	14.17634778	0.548126821	0.584195952	0.731031559	-6.236235505
3,5,7-Trihydroxy-4''-methoxy-8-prenylflavone 3-[rhamnosyl-(1->6)-galactosid...	-0.027218	13.60556014	-0.546260187	0.585475889	0.73173685	-6.237231631
11beta,20-Dihydroxy-3-oxopregn-4-en-21-oic acid	-0.037305197	13.62397102	-0.545774093	0.585809415	0.73173685	-6.237490478
N-Palmitoyl phenylalanine	0.023832337	12.54902726	0.544669692	0.586567514	0.732027855	-6.238077722
{[8-(2,4-dihydroxyphenyl)-7-(3,7-dimethylocta-2,6-dien-1-yl)-5-hydroxy-2-me...	-0.031194047	13.65558197	-0.542978944	0.587728987	0.732572469	-6.238974448

4-Methyl-5-(2-phosphoethyl)thiazole	0.017574818	12.33591999	0.54158883	0.58868474	0.732572469	-6.239709643
Amino-dideoxy-hexose	0.051953416	12.6614839	0.5406871	0.589305097	0.732572469	-6.240185539
Thioacetic acid	-0.045201475	12.71821381	-0.539611474	0.590045486	0.732572469	-6.240752177
Dipiperamide C	0.016270612	13.46125321	0.539223848	0.590312408	0.732572469	-6.240956102
Tiropramide	-0.044067129	16.2230475	-0.538898178	0.590536709	0.732572469	-6.24112732
Isothipendyl	0.02293436	14.68362584	0.538233871	0.590994365	0.732572469	-6.241476253
MG(18:0e/0:0/0:0)	-0.019382409	12.39773179	-0.537923774	0.591208054	0.732572469	-6.241638987
Echimidine	-0.04096229	12.86059095	-0.53635306	0.592290986	0.733262552	-6.242461834

			5			
Falcarindiol	0.017573697	13.09098495	0.533939966	0.59395649	0.734672002	-6.243721311
DTDP-alpha-D-glucose(2-)	0.011652292	13.97371083	0.530152413	0.596574975	0.737256662	-6.245686739
Kansuinine B	-0.016359178	13.55006487	-0.524147276	0.600737377	0.74174305	-6.248774313
13S-hydroxyoctadecadienoic acid	-0.063224946	16.45362118	-0.523124812	0.601447403	0.741962549	-6.249296524
2-Carboxy-4-dodecanolide	-0.028665202	13.92714769	-0.521518531	0.602563617	0.742561689	-6.250114859
C22:0	0.030993722	14.90590384	0.52089316	0.602998445	0.742561689	-6.250432781
Amoxicillin	0.024803953	12.7632213	0.519942533	0.603659699	0.742719877	-6.250915326
Delphinidin 3-(3""-p-coumaroylglucoside)	0.015430597	13.11309096	0.51734026	0.605471	0.744292135	-6.252231758

			7	507		
Pseudoecgonine	-0.030625738	13.4222436	-0.516342504	0.606166842	0.744490377	-6.252734758
{3-[3-(2,4-dihydroxyphenyl)-2-hydroxy-3-[3,5,7-trihydroxy-2-(3-hydroxypheny...	0.01466872	13.83330859	0.511503981	0.609543871	0.747979011	-6.255160258
Galactose-beta-1,4-xylose	-0.028499336	15.00839457	-0.509042248	0.611265255	0.748997989	-6.256385556
2,5-Dihydro-4,5-dimethyl-2-(2-methylpropyl)thiazole	-0.049418088	11.80333478	-0.508053586	0.611957194	0.748997989	-6.256875991
4-Hydroxy-3-prenylbenzoic acid glucoside	0.068964733	14.83145234	0.508012207	0.611986162	0.748997989	-6.256896497
Capryloylglycine	-0.027056925	12.20075766	-0.501451624	0.616586656	0.753335201	-6.260126578
Polyoxyethylene (600) monoricinoleate	0.028279124	13.66722873	0.501417241	0.616610806	0.753335201	-6.260143396

Cytosine	0.034528416	12.14430679	0.498845757	0.618418205	0.754881767	-6.261397947
Propionylcarnitine	0.022609933	13.22173847	0.493940109	0.621872648	0.758434358	-6.263773421
10-Undecenyl acetate	-0.019419247	13.03845651	-0.492532008	0.622865757	0.758439202	-6.264450943
Undecanoic acid	-0.014304098	12.90879228	-0.492391676	0.622964768	0.758439202	-6.264518359
(E)-S-1-Propenyl thiosulfate	-0.021991292	11.39444818	-0.491558546	0.623552726	0.758492583	-6.264918206
13-Deoxytedanolide	-0.072438998	14.37333013	-0.489398207	0.625078 45	0.759685579	-6.265951878
Sakacin A	0.018454206	13.68397869	0.488616443	0.625630965	0.759694743	-6.266324815
Dihydrodioscorine	-0.0511424	12.87289702	-	0.628439	0.762441472	-6.268209423

			0.484646612	922		
Glutaminylisoleucine	-0.018603143	13.78566882	-0.482436871	0.630005836	0.76367664	-6.269251815
Linoleoyl ethanolamide	-0.020053656	12.38515909	-0.480797371	0.631168738	0.764150161	-6.270022138
(alpha-keto-dimethyl-delta-N,N-Dimethylguanidynol) valeric acid	0.023211593	12.40601736	0.480340705	0.631492816	0.764150161	-6.270236237
Evoxanthidine	0.014365008	14.49084255	0.47939131	0.632166793	0.764302264	-6.270680694
Tazobactam	-0.10862745	15.45218046	-0.478216537	0.633001193	0.764647889	-6.271229447
3-Methylpyrrolo[1,2-a]pyrazine	-0.019706082	12.63352871	-0.476967064	0.633889167	0.765057574	-6.271811619
Ceanothine C	0.015522613	13.25497845	0.47576006	0.634747	0.765334875	-6.272372561

				463		
2(R)-hydroxydocosanoic acid	-0.033711964	13.73690217	-0.475100102	0.635216966	0.765334875	-6.272678669
N-[(3a,5b,7a,12a)-3,12-dihydroxy-24-oxo-7-(sulfooxy)cholan-24-yl]-Glycine	0.016247992	13.12857816	0.472671593	0.636945911	0.766755268	-6.273801434
1-(beta-D-Ribofuranosyl)-1,4-dihydronicotinamide	-0.04613192	15.02907556	-0.470969961	0.638158554	0.767552221	-6.274584724
DG(8:0/13:0/0:0)	-0.01620685	13.38658205	-0.470047938	0.638816028	0.76768064	-6.275007969
Di-2-propenyl sulfide	-0.017056751	13.44690829	-0.466475461	0.641366179	0.769561675	-6.276640062
Tetradecanedioic acid	0.031444164	14.32952258	0.465769158	0.641870867	0.769561675	-6.276961266
1-Arachidonoylglycerophosphoinositol	-0.026400921	15.45748134	-0.46495977	0.642449417	0.769561675	-6.277328752

			3			
Valproic acid glucuronide	0.087217408	13.69189567	0.464763818	0.642589519	0.769561675	-6.277417626
Mitomycin	-0.022511505	14.2850691	-0.460908692	0.64534842	0.772202315	-6.279158486
1,11-Undecanedicarboxylic acid	0.021768283	13.7505018	0.459278767	0.64651635	0.772571894	-6.279890158
Isorhamnetin	0.015565322	16.60281334	0.458930927	0.646765711	0.772571894	-6.280045969
Dihydro-4,4-dimethyl-2,3-furandione	0.018578877	12.92721563	0.457568329	0.647742916	0.773076734	-6.280655192
5,6,7,8-Tetrahydroquinoxaline	-0.032084117	11.95502035	-0.448987256	0.653910953	0.779770632	-6.284450287
Dexmedetomidine	0.016364666	12.38690403	0.44791014	0.654686875	0.780028636	-6.284921591
Hypogeic acid	0.039791279	20.11124407	0.446587137	0.655640441	0.780497673	-6.285498939

11-Hydroxy-9-tridecenoic acid	-0.014018373	13.25209511	-0.445033634	0.656760864	0.780523916	-6.286174701
Hydroxidodioxidosulfidosulfate	0.025260609	13.12063146	0.445003896	0.656782319	0.780523916	-6.286187614
C15:1	0.020545771	13.56106234	0.440795323	0.659821583	0.782828978	-6.288006379
6-{[3,7-dihydroxy-2-(1-hydroxy-3-methoxy-4-oxocyclohexa-2,5-dien-1-yl)-6-me...	-0.018921938	14.90851206	-0.440762809	0.659845085	0.782828978	-6.288020363
14,19-Dihydroaspidospermatine	-0.035739493	18.65186757	-0.439548355	0.660723183	0.782839632	-6.288541953
Allolithocholic acid	-0.048261407	15.281853	-0.439197128	0.660977222	0.782839632	-6.288692532
Plastoquinone 3	0.045762915	15.77998444	0.435309238	0.663791914	0.785042766	-6.290351333
1-(11Z,14Z-eicosadienoyl)-glycero-3-phosphate	0.020553424	13.79178785	0.43507214	0.663963	0.785042766	-6.290452015

			4	717		
D-Glyceric acid	-0.021677912	13.6665845	-0.43414077 8	0.664638 774	0.785174959	-6.290846989
9-Octadecenal	0.014160654	12.63717405	0.43134259 7	0.666668 552	0.786723208	-6.292028562
Tolmetin	0.033091721	15.01865711	0.43077845 9	0.667078 072	0.786723208	-6.292265853
Quinalphos	0.043247714	14.51450617	0.42963025 1	0.667911 889	0.786751833	-6.292747863
5-Sulfosalicylic acid	0.052165638	13.9050584	0.42895217 5	0.668404 494	0.786751833	-6.293031912
C21:5	-0.022782855	13.79746674	-0.42841409 9	0.668795 497	0.786751833	-6.293256995
Hydroxybutanoic acid	-0.037489956	16.97670567	-0.42518217 9	0.671145 925	0.78858198	-6.29460301
Alpha-dihydroartemisinin	-0.026048261	15.34573264	-	0.671991	0.78858198	-6.295084195

			0.424020839	308		
(Iso)Leucine	-0.021251916	18.861692	-0.423942505	0.672048345	0.78858198	-6.295116604
2-(2,3,5-trihydroxy-4-methoxyphenyl)propanoic acid	-0.013018781	13.9904779	-0.418449364	0.676052792	0.792613618	-6.297374386
(S)-9-Hydroxy-10-undecenoic acid	-0.017834043	12.70859295	-0.416514471	0.677465518	0.793602464	-6.298162662
3,4,5-trihydroxy-6-{[1-(4-methoxyphenyl)pentan-3-yl]oxy}oxane-2-carboxylic ...	0.094162685	19.45853239	0.415113241	0.678489315	0.794134429	-6.298731247
Acenocoumarol	-0.024382227	14.92872519	-0.414320329	0.679068914	0.794146029	-6.299052144
Gomphidic acid	0.018300216	13.9467474	0.412582711	0.680339739	0.794453906	-6.299753228
Tyrosol 4-sulfate	0.02079703	14.7656571	0.41240194	0.680471	0.794453906	-6.299825993

			4	997		
Hydroxypyridine	0.014084566	13.7818125	0.410669706	0.681739893	0.795268126	-6.300521673
Cassitoroside	-0.013314882	13.54168195	-0.4096859	0.682460384	0.795442956	-6.300915476
LPA(P-16:0e/0:0)	-0.017374374	13.97045109	-0.404813792	0.686032764	0.798938741	-6.302851808
All-trans-retinoic acid	0.015809025	13.47385142	0.402332116	0.687855131	0.799438264	-6.303829215
Vestitone 7-glucoside	0.025966512	13.45342962	0.40119961	0.688687372	0.799438264	-6.304273258
C14:5	-0.036162949	13.91430984	-0.401137977	0.688732675	0.799438264	-6.304297388
Cibulins	-0.039886626	13.18734435	-0.400901642	0.688906402	0.799438264	-6.304389881
DHAP(10:0)	-0.046182123	13.15257113	-	0.689879	0.799438264	-6.304906532

			0.399578939	009		
Leucyl-phenylalanine	0.03434137	13.77238814	0.399546858	0.689902605	0.799438264	-6.304919041
2-Hydroxy-22-methyltetracosanoic acid	-0.015718444	13.71816397	-0.396451608	0.692180642	0.801411806	-6.306121295
3-(2-Furanyl)-2-phenyl-2-propenal	0.017326052	13.77379891	0.394696948	0.693473282	0.802242121	-6.306798692
Tryptanthrine	-0.087736407	15.28107217	-0.391968511	0.695485079	0.803902321	-6.307846061
Candesartan	-0.021093063	14.88361011	-0.377070399	0.706507902	0.815966873	-6.313437071
Cilazaprilat	0.015810389	12.88489738	0.36846118	0.712906259	0.822674938	-6.316569346
Hercynine	-0.02199249	13.1048436	-0.36635232	0.714476686	0.823805212	-6.317325591

			2			
Lipoamide	-0.020075513	12.6493297	-0.3652743	0.715279941	0.823934297	-6.317710501
Nitrosobenzene	-0.014803602	11.48676224	-0.364615803	0.715770756	0.823934297	-6.317945061
2-Methyl-1-methylthio-2-butene	-0.014293397	14.12799691	-0.358128667	0.72061228	0.828823034	-6.320233217
Penicillin G	-0.021675789	14.15106444	-0.350892456	0.726026193	0.834361511	-6.322737187
Myricanol 5-glucoside	-0.010249359	13.75200021	-0.347752064	0.728380054	0.836044231	-6.323807983
Tiocarbazil	0.020079532	13.4661354	0.347338923	0.728689914	0.836044231	-6.323948138
Pemirolast	-0.010331161	13.48809768	-0.34443371	0.730870108	0.837672627	-6.32492901

			6			
3,5-Didecanoylpyridine	-0.011246361	12.30463851	-0.343846512	0.731311038	0.837672627	-6.325126265
3,4,5-trihydroxy-6-{[2-oxo-6-(3-oxobutyl)-2H-chromen-7-yl]oxy}oxane-2-carbo...	-0.022399371	12.92001102	-0.342931979	0.731997937	0.837771038	-6.325432808
Androsterone glucuronide	-0.022133327	14.44180015	-0.337812094	0.735847427	0.8414859	-6.327133885
Mezerein	0.01829087	13.86360085	0.331503841	0.740599608	0.846226109	-6.329194649
2-Hydroxy-6-pentadecylbenzoic acid	-0.019462805	13.54591941	-0.329917406	0.741796292	0.846899288	-6.329706796
Nicotinic acid adenine dinucleotide	0.010444713	13.47731214	0.327704299	0.743466739	0.84773866	-6.33041715
Benzofuran	0.021047952	12.9556845	0.327332141	0.743747763	0.84773866	-6.330536135

UDP-2-acetamido-4-dehydro-2,6-dideoxyglucose	0.008764562	14.11042283	0.32024336	0.749107162	0.853149824	-6.332776741
Avocadene	0.014802402	14.0486794	0.318052374	0.750766121	0.854341203	-6.33345935
Sulfo-Cys	-0.013662866	12.44684799	-0.308722996	0.757843003	0.861690983	-6.336313537
Decanoic acid (FA10:0)	0.045758663	17.86469142	0.305702167	0.7601389	0.86289922	-6.337219523
Phosphoserine	-0.017038832	13.12534368	-0.305494365	0.760296912	0.86289922	-6.337281518
4-Methoxycinnamic acid	0.012788184	13.5474782	0.304881945	0.760762655	0.86289922	-6.337463982
7-Methoxypradimicinone II	-0.040892489	13.9577013	-0.300793839	0.763873872	0.865723722	-6.338672614
Isoliensinine	0.014175186	12.96766305	0.297918603	0.766064352	0.86750098	-6.339512902

Orotidine	0.024555226	14.18841495	0.29549367	0.767913237	0.868888841	-6.340215321
Indan-1-ol	-0.036775859	13.45721885	-0.294449198	0.768710003	0.869084951	-6.340516101
Methyl-[10]-shogaol	-0.02585577	13.79788977	-0.291225481	0.771170736	0.871160459	-6.341437734
Cholesterol sulfate	-0.025396769	17.83041823	-0.287982923	0.773648193	0.87193162	-6.342354528
Tobramycin	0.013453441	13.53268873	0.287424781	0.774074873	0.87193162	-6.342511301
Serine	-0.012230323	14.43196632	-0.286782914	0.774565643	0.87193162	-6.342691215
Sulfapyridine	0.029382546	13.52021108	0.286504514	0.774778535	0.87193162	-6.342769126
Indoxyl sulfate	0.04121641	17.29685177	0.28621296	0.775001	0.87193162	-6.342850635

			2	503		
Cyromazine	0.011571203	14.37235638	0.284881599	0.776019916	0.87193162	-6.343221793
C16:4	-0.018244938	13.42328865	-0.284604658	0.776231808	0.87193162	-6.343298781
Fosfomycin	-0.058153946	12.49202189	-0.283532448	0.777052331	0.872150523	-6.343596145
5-Amino-4-hydroxy-3-(phenylazo)-2,7-naphthalenedisulfonic acid	-0.008597651	13.71567908	-0.282709211	0.777682495	0.87215559	-6.343823699
9-Aminocamptothecin	0.022437911	13.15197466	0.276915134	0.782121834	0.876429129	-6.345406556
2,5-Diamino-6-(5-phospho-D-ribosylamino)pyrimidin-4(3H)-one; 5-[(6-carboxy-...	0.017740089	15.48434332	0.271545061	0.786242704	0.88033922	-6.346844338
(3Z,6Z,9Z)-3,6,9-Dodecatrien-1-ol	-0.013890538	13.1147492	-0.265127315	0.791175447	0.884065924	-6.348525719

N-Cyclopropyl-trans-2-cis-6-nonadienamide	0.022837654	12.01544729	0.2650392	0.791243232	0.884065924	-6.348548525
4-Hydroxymethylphenylhydrazine	-0.014802027	13.15804021	-0.264739687	0.791473654	0.884065924	-6.348625986
N-Ethylmaleimide	0.012876911	14.04543621	0.261229865	0.794175196	0.885709044	-6.349527197
Diplosporin	0.046975636	16.02084823	0.260842056	0.794473849	0.885709044	-6.349626037
Geranylacetone	-0.012094186	12.1234231	-0.260352634	0.794850799	0.885709044	-6.349750565
Formamidopyrimidine nucleoside triphosphate	-0.007355805	13.65487236	-0.255511053	0.798582337	0.8876545	-6.350969859
Adenophostin A	-0.007219533	13.88460399	-0.255346822	0.798708995	0.8876545	-6.351010817
OA-6129 D	0.012673993	13.2612738	0.25498701	0.798986	0.8876545	-6.351100461

				51		
Cytochalasin Ppho	0.016147507	13.66000224	0.254783146	0.799143757	0.8876545	-6.351151195
5''-xanthylate(2-)	-0.007625315	13.51076871	-0.253107141	0.800436826	0.88838291	-6.351566757
Isopropylmaleate	-0.011141613	13.53211205	-0.246676012	0.805403642	0.892583834	-6.353135905
5-Hydroxy-2-furoic acid	-0.010728992	12.17005135	-0.246548135	0.805502484	0.892583834	-6.353166697
3,4,5-trihydroxy-6-({2-[6-(2-methylbut-3-en-2-yl)-7-oxo-2H,3H,7H-furo[3,2-g...	-0.009606451	13.92644506	-0.243611905	0.807772877	0.894108833	-6.35386933
Ethyl cinnamate	0.021628619	14.07685737	0.242789678	0.808408944	0.894108833	-6.354064579
Sodium salicylate	0.009551482	12.44890806	0.241813142	0.809164 55	0.894108833	-6.354295614

3-O-Methylniveusin A	0.007614736	13.89051547	0.24145166	0.809444295	0.894108833	-6.354380899
11-beta-Hydroxyandrosterone-3-glucuronide	0.018597524	14.5811862	0.240579363	0.810119455	0.894146097	-6.354586178
Etonogestrel	-0.010455745	13.19254336	-0.239294424	0.811114259	0.894535821	-6.354887212
8-[3,7-dihydroxy-2-(3-hydroxyphenyl)-3,4-dihydro-2H-1-benzopyran-4-yl]-2-(3...	0.004866584	13.28489583	0.23445242	0.814865705	0.897962682	-6.356007114
2,2,7,7-Tetramethyl-1,6-dioxaspiro[4.4]nona-3,8-diene	0.028426367	15.05703753	0.230265397	0.818113145	0.900829166	-6.35695708
Aspidospermatine	-0.018003079	17.19357058	-0.225869818	0.821525724	0.903872817	-6.357935955
17-Beta-Estradiol-3,17-beta-sulfate	-0.012025524	13.00777494	-0.221359764	0.825030718	0.907013265	-6.358920724
Porson	-0.017985851	15.86810447	-0.21995770	0.826121 05	0.907496252	-6.359222818

			4			
Oxobutanoic acid	0.010641927	15.61693017	0.214963133	0.830007881	0.910884263	-6.36028338
Nicardipine	0.009144462	13.56759162	0.214256823	0.83055788	0.910884263	-6.360431395
10-Nitrolinoleic acid; Dapiprazole	0.008523653	12.86224324	0.213476572	0.831165554	0.910884263	-6.360594339
N-Undecylbenzenesulfonic acid	0.014566657	16.00062524	0.20985117	0.833990411	0.913262085	-6.361343657
2,4-Dimethylthiazole	0.020116408	11.98562068	0.205624464	0.837286519	0.91597223	-6.362201059
Fumitremorgin B	0.009708855	13.36201171	0.204992646	0.837779479	0.91597223	-6.362327727
Ne,Ne dimethyllysine	-0.007706904	13.58074974	-0.202873904	0.839433037	0.916525393	-6.362749653
Piperacillin	-0.058055794	16.52436764	-0.202659537	0.839600378	0.916525393	-6.362792098

Ornithine	0.009202182	17.04357736	0.200419978	0.841349079	0.917715662	-6.363232851
Traumatic acid	0.01277169	14.23662125	0.196402724	0.844487817	0.92019859	-6.364011194
Cervonoyl ethanolamide	0.009125868	13.58071585	0.195817052	0.844945621	0.92019859	-6.364123352
OA-6129 C	0.029269728	13.86123908	0.194671186	0.845841463	0.920455113	-6.364341821
UDP-2-acetamido-2-deoxy-alpha-D-ribo-hex-3-uluronate	0.005844675	14.02091057	0.189676708	0.849748498	0.923985496	-6.365279091
FMLP	0.005425336	13.01888202	0.185244149	0.85321908	0.926785882	-6.366090515
p-Toluenesulfonic acid	-0.017176201	15.22271583	-0.184689489	0.853653567	0.926785882	-6.366190701
Palmitic amide	-0.010726219	15.01969191	-0.183126042	0.854878518	0.927393506	-6.366471484
(1xi,3xi)-1,2,3,4-Tetrahydro-1-methyl-beta-	0.015432538	14.47754384	0.17627795	0.860248	0.93249285	-6.367673228

carboline-3-carboxylic acid			7	067		
Corchorifatty acid F	0.008588676	14.61656984	0.175303376	0.861012766	0.932596578	-6.367840533
{3-[2-(3,4-dihydroxy-5-methoxyphenyl)ethyl]phenyl}oxidanesulfonic acid	-0.005985798	13.66811147	-0.173219337	0.862648435	0.933642794	-6.368195184
1,3-Benzenedisulfonamide	0.010711403	14.39248229	0.171460047	0.864029685	0.934412243	-6.36849127
4-Vinylphenol sulfate	-0.011260625	13.88023045	-0.169831611	0.865308573	0.935069884	-6.368762641
Pyrroline carboxylic acid	-0.007563141	13.22433542	-0.165998882	0.868319991	0.937383008	-6.369391129
Ammelide	0.011877052	12.52608131	0.165395812	0.868794007	0.937383008	-6.369488715
Homocysteine thiolactone	0.008164442	11.6558979	0.163160384	0.870551475	0.938552789	-6.369847341
Roxburghine B	-0.006094277	13.46802227	-	0.871469	0.938816799	-6.370032746

			0.161992605	826		
UDP-3-O-(3-hydroxytetradecanoyl)-D-glucosamine	-0.010171401	14.13054371	-0.158057304	0.874565859	0.941424562	-6.370647739
Indole	-0.007679412	15.01339411	-0.156196217	0.876030716	0.941583449	-6.370933316
Androstenedione	0.007189436	13.89784379	0.156153464	0.876064372	0.941583449	-6.370939837
Pseudooxynicotine	-0.013828961	12.94075144	-0.153273727	0.87833186	0.943293231	-6.371374937
Cyclohexaneundecanoic acid	0.011158127	16.52464055	0.151838104	0.879462639	0.943389154	-6.371588821
Cyanuric acid	-0.006431264	11.39537915	-0.151442	0.879774677	0.943389154	-6.37164748
4-Sulfobenzoate	-0.00585435	12.97832795	-0.14990138	0.880988502	0.943964621	-6.371874172

			5			
Dihydrozeatin riboside monophosphate; Tolmetin glucuronide	0.011174354	12.9505223	0.14638689 9	0.883758 556	0.94482997	-6.372382635
Wybutoxine	-0.017606404	13.70379591	-0.14621365 7	0.883895 139	0.94482997	-6.372407387
5,7-Dihydro-2-methylthieno[3,4-d]pyrimidine	-0.02746146	14.7530515	-0.14554595 5	0.884421 586	0.94482997	-6.372502511
3-hydroxy-3-(3,4,5-trimethoxyphenyl)propanoic acid	-0.017864118	16.36385238	-0.14486341 1	0.884959 788	0.94482997	-6.3725993
Xanthine	-0.028719959	16.45036701	-0.14457777 3	0.885185 036	0.94482997	-6.37263967
Diosmetin 7-O-beta-D-glucuronopyranoside	-0.004814794	13.98773728	-0.14369053 2	0.885884 756	0.944853366	-6.372764559
Vanillactic acid	0.011760089	14.34071061	0.14138960	0.887699	0.946065376	-6.373084859

			1	793		
(2R)-O-Phospho-3-sulfolactate	-0.02249598	12.88723807	-0.139717985	0.889018782	0.946331738	-6.373314313
Itaconate	0.006803967	14.88205948	0.139352204	0.889307444	0.946331738	-6.373364158
2-amino-4-({1-[(carboxymethyl)-C-hydroxycarbonimidoyl]-2-[(1-hydroxy-2,4-di...	-0.010202287	13.35418954	-0.136538538	0.891528377	0.94797144	-6.37374321
C12:4	0.008946226	12.97106519	0.133776081	0.893709724	0.94945804	-6.374107843
13-Dihydrocarminomycin	0.006128639	12.97478787	0.133043077	0.89428867	0.94945804	-6.374203345
Aminobutanoic acid (ABA)	0.006729502	15.05018644	0.130541497	0.89626491	0.950832027	-6.374525324
Dodecanoic acid (FA12:0)	0.008406538	16.51231036	0.127942976	0.898318419	0.951727066	-6.374853309
Oxidized dithiothreitol	-0.007977638	12.85978048	-0.12774608	0.898474045	0.951727066	-6.374877892

			2			
2-(2-Thienylmethylene)-1,6-dioxaspiro[4.4]non-3-ene	0.028618823	15.27588565	0.12623212 2	0.899670 815	0.952271159	-6.375065654
Chondroitin 4-sulfate	0.006029029	13.39265853	0.11901389	0.905379 871	0.957489546	-6.375930084
3D,7D,11D-Phytanic acid	-0.005686303	16.29186264	-0.11826220 2	0.905974 685	0.957489546	-6.376017179
Azomycin	0.019964428	12.92261238	0.11661431 7	0.907278 851	0.957495907	-6.376206181
Quinic acid	0.006320791	15.276558	0.11651881 2	0.907354 443	0.957495907	-6.376217053
4-Hydroxyaminoquinoline N-oxide	0.015782569	13.80709809	0.11396834 2	0.909373 448	0.958900595	-6.37650411
Threonate; 1-Pentanesulfenothioic acid; Hypoxanthine	-0.008198817	17.02094763	-0.11051553 3	0.912107 7	0.959625442	-6.376882606
Melatonin glucuronide	-0.010941523	13.23520353	-0.11011248	0.912426 941	0.959625442	-6.376926029

			3			
Thymol Sulfate	0.009196803	14.05889646	0.109969718	0.912540023	0.959625442	-6.376941372
2-Octenedioic acid	0.005385491	14.07662661	0.109623274	0.912814445	0.959625442	-6.376978522
5''-O-Desmethyl omeprazole	-0.030163946	16.7323049	-0.107244715	0.914698803	0.960881787	-6.377230413
Capsidiol	0.003820605	12.855543	0.105386169	0.916171 53	0.961704151	-6.37742339
Cucurbic acid	-0.00366082	13.25418413	-0.103504378	0.917662971	0.962544907	-6.377615344
Alanyl-Methionine; 1-Hydroxypyrene	0.011342575	13.97570282	0.100244931	0.920246982	0.964529544	-6.377939644
Delphinidin 3-sambubioside	-0.005639513	13.91057831	-0.094589193	0.924732712	0.967411111	-6.378477745
Maltitol	-0.007826807	13.05088863	-	0.925208	0.967411111	-6.378532916

			0.093990082	028		
Pyridoxal	0.011215643	15.4397493	0.093509	0.925589723	0.967411111	-6.378576965
Suberic acid	-0.005514255	14.05289069	-0.093279039	0.925772182	0.967411111	-6.37859794
(Z)-4-Dodecenal	-0.004129647	12.14666445	-0.091356215	0.927297973	0.968279681	-6.378771307
1,9-Nonanedithiol	-0.00745586	13.82803899	-0.089858489	0.928486629	0.968795181	-6.378903844
Debromoaplysiatoxin	-0.011040914	14.16533139	-0.088237211	0.929773522	0.969412333	-6.379044846
4-Hydroxypropofol	0.011854919	13.74148534	0.087209254	0.930589561	0.969538003	-6.379132917
Dehydroepiandrosterone	-0.003261864	13.48657546	-	0.932811	0.970733269	-6.379367429

			0.084411027	291		
Sultamicillin tosilate	0.005161161	14.6182773	0.083842552	0.933262712	0.970733269	-6.379414137
Cymorcin diglucoside	-0.00315715	13.46377066	-0.08313336	0.933825907	0.970733269	-6.379471964
Hexahomomethionine	0.003827544	12.55938161	0.08169855	0.934965441	0.97119361	-6.379587456
Gravacridonetriol glucoside	-0.01384949	13.75273065	-0.079867804	0.936419624	0.971219177	-6.379731898
Cefuroxime	0.006193392	13.37735599	0.079633152	0.936606026	0.971219177	-6.379750175
Glutamate	0.005353863	16.5209883	0.078803913	0.937264784	0.971219177	-6.379814333
Acetaminophen glucuronide	0.013203838	17.06527008	0.078159291	0.937776909	0.971219177	-6.379863744
Dihydro-5-(2-octenyl)-2(3H)-furanone	0.002442751	13.68874851	0.076744342	0.938901118	0.971661587	-6.379970777

2-Hydroxy-2,4-pentadienoic acid	-0.003775266	16.3989151	-0.073797572	0.941242784	0.973362345	-6.380187409
Pyrrole-2-carboxylic acid	0.003381924	13.01719424	0.070927176	0.943524252	0.974700392	-6.380390272
3-(3,4,5-Trimethoxyphenyl)propanoic acid	0.007865314	17.33967612	0.069885639	0.944352209	0.974700392	-6.380461892
Hericenone B	0.00322563	13.58622654	0.069530784	0.944634311	0.974700392	-6.380486051
2-Hydroxyacetaminophen sulfate	0.010817553	16.96897408	0.065896255	0.947524076	0.976298338	-6.380726418
5-Hydroxypentanoic acid	-0.00611218	16.16189857	-0.065821298	0.947583681	0.976298338	-6.380731239
4-Methyl-1-phenyl-2-pentanone	0.007381007	12.93245426	0.062052931	0.950580607	0.977736438	-6.380966558
Crotanecine	0.009881923	12.86337676	0.061507545	0.951014404	0.977736438	-6.380999467
2-amino-4-({1-[(carboxymethyl)-C-	-0.00286136	13.31878858	-	0.952044	0.977736438	-6.381076449

hydroxycarbonimidoyl]-2-({5,11-dihydroxy-1...			0.060212437	583		
Ciceritol	-0.010925963	14.09964212	-0.059690869	0.952459481	0.977736438	-6.381106988
Istamycin AO	-0.002763967	14.12805846	-0.059656994	0.952486429	0.977736438	-6.381108963
Gemfibrozil	0.002841742	12.38389873	0.051696482	0.958820436	0.983153858	-6.381541843
2,6-Dimethoxy-4-propylphenol	0.004418867	15.47390407	0.051161308	0.959246362	0.983153858	-6.381568725
4-Mercaptobutyl glucosinolate	0.003045465	13.26799592	0.049818297	0.960315264	0.983153858	-6.381634952
Alfuzosin	-0.001548761	12.76450707	-0.047569332	0.962105377	0.983153858	-6.38174191
2-(4-Methyl-5-thiazolyl)ethyl butanoate	-0.000524262	16.70059273	-0.04725598	0.962354812	0.983153858	-6.38175642

Dimethylurea	-0.001855217	12.14381396	-0.046892005	0.962644548	0.983153858	-6.381773154
1-Palmitoyl-2-(5-hydroxy-8-oxo-6-octenoyl)-sn-glycero-3-phosphatidylcholine	-0.002316865	13.32446886	-0.045952815	0.963392199	0.983153858	-6.381815737
Xanthoplanine	-0.005156812	16.73731352	-0.045935292	0.963406148	0.983153858	-6.381816524
3-Methyluric acid	-0.00252601	15.37527774	-0.043917513	0.965012527	0.98407276	-6.381905062
CI Acid Orange 3	0.0025014	13.26675775	0.036289821	0.971086268	0.989542586	-6.38220383
Disaccharide	0.005039527	14.0413677	0.035344936	0.971838782	0.98958602	-6.382236884
Quercetin 3-arabinoside 7-glucoside	-0.002044597	14.55396721	-0.033338474	0.973436825	0.989999029	-6.382304183

Butanal	0.002620537	12.63580834	0.033052303	0.973664755	0.989999029	-6.382313461
Tartaric acid; 2-Methyl-2-(methyldithio)propanal	-0.003084812	16.26088282	-0.030623721	0.975599156	0.991242874	-6.38238898
6-{[6-(3,4-dihydroxy-6-methyl-5-oxooxan-2-yl)-5-hydroxy-2-(3-methoxyphenyl)...	0.00082963	13.56387387	0.027339335	0.978215445	0.993177226	-6.382481948
Proline	0.001145238	17.86846222	0.025507917	0.979674429	0.99393461	-6.382529213
{[(3E)-4-(1-oxo-1H-isochromen-3-yl)but-3-en-2-yl]oxy}sulfonic acid	-0.001671936	12.97622731	-0.023779931	0.981051076	0.994607418	-6.382570805
Carboxytolbutamide	0.002586144	13.67421525	0.021443356	0.982912662	0.995770532	-6.382622408
4''-O-Methylkanzonol W	0.001804321	14.41780767	0.020213734	0.983892359	0.996039179	-6.382647422
Avermectin B2b aglycone	0.000873344	13.45839314	0.017499372	0.986055104	0.996819813	-6.382697413
(R)-Bitalin A	0.001323716	15.78762595	0.01745101	0.986093	0.996819813	-6.382698238

			9	631		
GTP	0.000571915	14.0880322	0.015637008	0.987539055	0.997557567	-6.38272755
Tetraphyllin B sulfate	-0.000500146	12.86471318	-0.014515019	0.988433089	0.997737673	-6.382744071
Pyridoxine	-0.000266126	13.51042031	-0.011219027	0.991059514	0.999158253	-6.382785492
Simvastatin	0.000500169	13.54741665	0.010667891	0.991498 7	0.999158253	-6.382791383
D-Urobilin	-0.000735381	13.84325979	-0.00810689	0.993539522	0.999158253	-6.382814864
N-[2-(3,4-dimethoxyphenyl)ethyl]-3-[4-methoxy-3-(sulfooxy)phenyl]prop-2-eni...	0.000399505	12.99272165	0.007139229	0.994310649	0.999158253	-6.382822068
Daucic acid	0.000374627	16.0200739	0.005866675	0.995324752	0.999158253	-6.382830151
10,11-dihydro-20-trihydroxy-leukotriene B4	-0.000229974	14.01300587	-0.00453827	0.996383372	0.999158253	-6.382836901

Valsartan	0.001103496	13.73929651	0.004450039	0.996453684	0.999158253	-6.382837288
Malvidin 3-(6-malonylglucoside) 5-glucoside	0.0001092	13.81488947	0.003137847	0.997499389	0.999158253	-6.38284215
11-O-Demethylpradimicinone II	-0.000233615	13.57865153	-0.002691765	0.997854879	0.999158253	-6.38284342
2-Heptanethiol	0.000112065	15.71194912	0.002589409	0.997936449	0.999158253	-6.382843684
3-Methyl-4-phenyl-3-buten-2-one	-0.000271318	13.70582083	-0.002458429	0.998040829	0.999158253	-6.382844007
4-Demethylsimmondsin 2"-(E)-ferulate	-0.000102671	13.4505651	-0.001613295	0.998714332	0.999158253	-6.382845688
o-O-glucuronide rosiglitazone	-5.98E-05	13.24761493	-0.00105625	0.999158253	0.999158253	-6.382846414

Ο Πίνακας 7 παρουσιάζει τα αποτελέσματα της αξιολόγησης των μεταβολιτών που διεξήχθη σε αυτή τη μελέτη μεταξύ ασθενών που διαγνώστηκαν με MALS και μη ταξινομημένων ατόμων. Από τους 1394 μεταβολίτες που αξιολογήθηκαν, συνολικά 312 μεταβολίτες

8. Πίνακας 8: Μεταβολίτες που διαφοροποιούνται ανάμεσα σε ασθενείς με ανοσοπαράλυση που προκαλείται από σήψη και σε ασθενείς με μη ταξινομημένη κατάσταση

Metabolites	logFC	AveExpr	t	P-value	Adjusted p-value	B

βρέθηκαν να παρουσιάζουν σημαντικές διαφορές μεταξύ πολλαπλών δοκιμών. Αυτά τα ευρήματα υποδηλώνουν ότι υπάρχουν μεταβολικές αλλοιώσεις που μπορούν να αποδοθούν στο MALS, το οποίο μπορεί να είναι χρήσιμο για τον εντοπισμό πιθανών βιοδεικτών για τη νόσο. Τα αποτελέσματα αυτής της μελέτης θα μπορούσαν να παράσχουν πολύτιμες πληροφορίες σχετικά με τους υποκείμενους μηχανισμούς του MALS και μπορεί να ανοίξουν το δρόμο για μελλοντική έρευνα σε αυτόν τον τομέα.

MALS: σύνδρομο ενεργοποίησης μακροφάγων

PA(8:0/16:0)	-0.177480706	15.51333386	-4.52471596	1.02E-05	**0.014206546**	3.080394854
LysoPC(15:0)	-0.20365343	19.42502296	-4.320609637	2.42E-05	**0.016837114**	2.334035118
Protoveratrine B	-0.155649293	14.59236943	-3.804089202	0.00018737	0.066599799	0.573471119
2-Hydroxyestradiol-3-methyl ether	0.21085455	13.41651312	3.734108311	0.000243543	0.066599799	0.349569372
Arginyl-Cysteine	0.192260359	13.37852023	3.660858957	0.000319176	0.066599799	0.119051616
Zeaxanthin diglucoside	-0.118450133	13.95828331	-3.554054085	0.000469985	0.066599799	-0.209956321
Magnoloside C	-0.078106288	13.58394577	-3.539729351	0.00049469	0.066599799	-0.25343676

Carbamoyl phosphate	-0.060748927	12.62672315	-3.5340251	0.000504862	0.066599799	-0.270708344
LPA(0:0/16:0)	-0.145585878	15.51733045	-3.505707708	0.000558337	0.066599799	-0.356087777
Thiothixene	0.23056192	13.25658427	3.501503918	0.000566715	0.066599799	-0.368711245
Sulfoacetyl-CoA	-0.127492949	13.7952077	-3.465911494	0.000642052	0.066599799	-0.475057768
Tetradecanoyl-CoA	-0.064051689	13.53066177	-3.463161773	0.000648755	0.066599799	-0.483233906
[3-(6-hydroxy-4-{5-[(E)-2-[6-hydroxy-3-(3-hydroxyphenyl)-2-(4-hydroxyphenyl...	-0.071886963	13.82673773	-3.44818118	0.000683733	0.066599799	-0.527677506
Mycothione	-0.067393129	13.64547722	-	0.000719	0.066599799	-

			3.433568273	548		0.570866734
Cortisol 21-sulfate	0.285901056	14.66918907	3.431189192	0.000725542	0.066599799	-0.577882929
Riccionidin A	-0.088849557	17.0256228	-3.416192543	0.000764417	0.066599799	-0.622011066
Trihexosylceramide (d18:1/12:0)	-0.079583709	14.00191433	-3.3759882	0.000878746	0.072033756	-0.739470674
beta-D-Galactosyl-beta-1,4-N-acetyl-D-glucosaminylglycopeptide	-0.072669943	13.79696292	-3.348348351	0.000965876	0.074801735	-0.819507883
Norepinephrine sulfate	0.250752828	13.62922234	3.317969706	0.001071278	0.078597955	-0.906802044
Homovanillic acid	0.301743086	16.07956484	3.283959268	0.001201948	0.083775751	-1.003692360

						7
Carnosol	0.221152299	15.26626786	3.262801818	0.001290564	0.085668865	-1.063517555
24-Hydroxycalcitriol	-0.128419945	14.95436513	-3.231491929	0.0014329	0.087778031	-1.151416124
Hypaconitine	-0.101970887	13.802293	-3.228284868	0.001448275	0.087778031	-1.160376752
Hexuronate	0.25534974	14.9004789	3.187001145	0.001660 35	0.096438674	-1.275012853
Sulpyrine	0.15815176	13.61326411	3.157792055	0.001827406	0.101896143	-1.355320247
Arachidonic acid	-0.214209984	18.52631737	-3.101916163	0.002191086	0.114783368	-1.507090246

Secogalioside	0.102320608	13.4578397	3.090147308	0.002275746	0.114783368	-1.538745165
Tragopogonsaponin L	-0.090385276	14.04889856	-3.061984542	0.002490736	0.114783368	-1.614053519
Tetrahydroaldosterone-3-glucuronide	0.253332471	15.36182924	3.061001363	0.002498569	0.114783368	-1.616671312
2,4-Di-tert-butylphenol	-0.083122528	13.10947791	-3.059471584	0.002510802	0.114783368	-1.620742957
Cortolone-3-glucuronide	0.37914002	16.08876655	3.054299414	0.002552571	0.114783368	-1.634495511
3-Methoxy-4-hydroxyphenylethyleneglycol sulfate	0.247991033	14.5815457	3.000423008	0.003027355	0.126619395	-1.776495458
5a-Cholesta-8,24-dien-3-one	-0.133233244	12.87403918	-	0.003036	0.126619395	-

			2.999486486	283		1.778943524
Methyl-Lys	-0.123483887	15.43052874	-2.991193562	0.0031164	0.126619395	-1.800590912
PA(15:0/20:3(5Z,8Z,11Z))	-0.116979777	14.0688724	-2.984495349	0.003182523	0.126619395	-1.818035771
PC(22:4(7Z,10Z,13Z,16Z)/22:6(4Z,7Z,10Z,13Z,16Z,19Z))	-0.102390196	14.79242561	-2.960501755	0.003430093	0.126619395	-1.88023269
Punigluconin	-0.059853276	14.42549721	-2.960451923	0.003430625	0.126619395	-1.880361392
Acetylornithine	-0.125383809	15.20158176	-2.958492643	0.003451605	0.126619395	-1.885420026
Serinyl-Valine	-0.120702795	15.89691594	-2.94934858	0.003551081	0.126928396	-1.90898856

			8			8
Phenprocoumon	0.21774185	15.33103448	2.937565319	0.003683143	0.127656041	-1.93926151
Glyoxylic acid	0.146007307	13.34402584	2.93135084	0.003754589	0.127656041	-1.955182887
Hydroxyethylpromethazine	0.351164046	15.2104302	2.901747021	0.004112675	0.133563501	-2.030604513
Saphenamycin	0.14635705	12.5707341	2.898292199	0.004156438	0.133563501	-2.039360765
2,3-Dimethylthiophene	-0.128781504	13.24488951	-2.893660395	0.004215778	0.133563501	-2.051085111
O-phosphonato-L-homoserine(2-)	-0.08967052	13.22052429	-2.871381666	0.004512161	0.136708009	-2.107238755
Bufotenin	-0.09726993	14.08971904	-	0.004556	0.136708009	-

			2.868178167	308		2.115280503
gamma2-Solamarine	-0.068829749	13.50086941	-2.862635432	0.004633624	0.136708009	-2.12917501
Trandolaprilat	0.145858587	14.54012712	2.854396465	0.004750763	0.136708009	-2.149782892
Succinyl sulfathiazole	-0.116564793	16.91882425	-2.850618503	0.004805375	0.136708009	-2.159214379
5-Hydroxymethyluracil	-0.066241286	12.43886455	-2.835079985	0.005036056	0.1378219	-2.197884976
4-(1,1,3,3-Tetramethylbutyl)-phenol	-0.122199156	14.55043911	-2.834670794	0.005042265	0.1378219	-2.198900705
PC(DiMe(11,3)/MonoMe(11,5))	-0.091300732	14.31406233	-2.77437993	0.006037032	0.156277627	-2.34708615

			3			
MG(P-18:0e/0:0/0:0)	-0.165575913	13.24662924	-2.770652418	0.006104021	0.156277627	-2.356151522
L-2-Amino-4-methylenepentanedioic acid	-0.103491467	13.72405654	-2.770527257	0.006106282	0.156277627	-2.35645572
Pyrithione zinc	0.123527168	13.19308605	2.761219224	0.006276574	0.156277627	-2.379042991
Pelargonidin 3-sophoroside 5-glucoside	-0.081985746	13.96985752	-2.753005957	0.006430 4	0.156277627	-2.398915434
Aspartate	-0.106567937	14.66382797	-2.751460262	0.006459729	0.156277627	-2.402649222
Inodxyl glucuronide	0.195256116	13.12576536	2.744347519	0.006596257	0.156277627	-2.419805848

alpha-Ionol O-[arabinosyl-(1->6)-glucoside]	0.127009604	13.310217	2.743415808	0.006614333	0.156277627	-2.422050189
(R)-3-Hydroxy-hexadecanoic acid	-0.111194079	16.2474042	-2.736832888	0.006743333	0.1566701	-2.437887329
PIP2(16:0/20:4(5Z,8Z,11Z,14Z))	-0.05555674	13.82327986	-2.72734412	0.006933286	0.156975374	-2.460653502
Glycylproline	-0.113770737	14.75707977	-2.724963902	0.006981688	0.156975374	-2.466352841
Toluene-cis-dihydrodiol	-0.070768884	12.395554	-2.70277808	0.007447761	0.160514518	-2.519254595
Tryptophan	-0.128196177	17.10685457	-2.702396233	0.007456023	0.160514518	-2.520161602
4-Amino-1-piperidinecarboxylic acid	-0.126787228	17.2801529	-	0.007539	0.160514518	-

			2.69853831	964		2.529318726
Salsoline-1-carboxylate	0.228474878	13.88482656	2.692071224	0.007682591	0.160514518	-2.54464177
Estradiol	0.110585558	13.11498807	2.683266444	0.007880 69	0.160514518	-2.565448989
Edetic Acid	-0.145088487	22.77525126	-2.68149377	0.007921126	0.160514518	-2.569630489
Benzamide	0.133229038	12.67518099	2.680445632	0.007945123	0.160514518	-2.572101701
(Iso)Citrate	-0.171230937	18.96448389	-2.675281764	0.008064309	0.16059496	-2.584263567
Myricetin 7-(6""-galloylglucoside)	-0.078313958	14.57539073	-2.666502333	0.008270651	0.16238433	-2.604890854

2,3,4,7,8,9,15,22,23,28-decahydroxy-14-(hydroxymethyl)-13,25,32,35-tetraoxa...	-0.151804007	17.16646583	-2.647087908	0.008743933	0.169292258	-2.650281748
(-)-Nopol	-0.069814795	12.88890833	-2.636977578	0.008999933	0.170098588	-2.673797758
Zearalenone 4-sulfate	0.081377773	13.15818258	2.635821781	0.009029624	0.170098588	-2.676480748
Quinquenoside L1	-0.073324439	14.25511326	-2.623795709	0.009343824	0.171668179	-2.704332423
Methyl 3,4-dihydroxy-5-prenylbenzoate 3-glucoside	0.152377416	14.29371504	2.621225178	0.009412245	0.171668179	-2.710270267
24,25-Dihydroxyvitamin D	-0.110946367	14.62965832	-2.618294642	0.009490796	0.171668179	-2.717033110
L-N-(1H-Indol-3-ylacetyl)glutamic acid	0.080733861	13.26135798	2.61405293	0.009605	0.171668179	-

			5	537		2.726809303
Trilostane	0.168302054	13.43578056	2.60760312	0.009782395	0.172615937	-2.741646441
CDP-DG(a-13:0/i-22:0)	-0.056810493	14.06815792	-2.594773204	0.010142916	0.176740304	-2.771058942
1,8-Diazacyclotetradecane-2,9-dione	-0.057186778	13.68645735	-2.586492749	0.010381879	0.178518174	-2.789970115
Docosatrienoic acid	-0.096190792	14.30427421	-2.582426275	0.010501069	0.178518174	-2.799236646
N-(3-acetamidopropyl)pyrrolidin-2-one	0.131557648	13.18154783	2.575010251	0.010721597	0.180071167	-2.81610103
(±)-3-Hydroxynonanoic acid	-0.09657656	13.76815876	-2.570350867	0.010862265	0.180261876	-2.826673562

Protriptyline	0.089394131	12.37503724	2.559970621	0.011181604	0.183378299	-2.850163017
4-Aminohippuric acid	0.149400991	13.63093899	2.542448876	0.011739735	0.190292917	-2.889611749
Oxytocin	-0.049959966	13.74042338	-2.534945453	0.011986265	0.192055786	-2.906427718
Furoic acid	-0.146588766	16.34147512	-2.513876373	0.012703398	0.198768095	-2.953397457
X-206	-0.105542097	15.60574715	-2.511369986	0.012791206	0.198768095	-2.958960605
6""-Malonylapiin	-0.143186277	15.85828258	-2.510183886	0.012832947	0.198768095	-2.96159145
Diosmin	-0.057873157	14.07393852	-	0.013276	0.202064274	-

			2.497785129	609		2.989023067
N-Acetylglutamine	-0.14773555	17.71207161	-2.49616273	0.013335662	0.202064274	-2.992603139
1,4-Dimethyl-7-ethylazulene	0.122392744	12.62208713	2.463846191	0.014561678	0.21796335	-3.063460509
Vindesine	-0.058598683	13.6685877	-2.46041204	0.014697672	0.21796335	-3.070939374
Dracorubin	0.088259721	13.25471734	2.454295369	0.014942691	0.21926433	-3.084235974
Soyasaponin II	-0.071388054	14.053984	-2.448386994	0.015182801	0.220466921	-3.097050293
Glutamylthreonine	-0.122957631	17.80463578	-2.43795001	0.015615 32	0.224409858	-3.11961558

			9			8
Docosadienoate (22:2n6)	-0.075378073	14.57333737	-2.414716491	0.01661756	0.23637631	-3.16952258
Carthamin	-0.05912073	13.55518021	-2.400291438	0.017268078	0.243148497	-3.200282395
(3R,2'S)-Myxol 2'-alpha-L-fucoside	-0.06356595	13.89540111	-2.387797195	0.017849601	0.248662814	-3.226784835
12-Ketodeoxycholic acid	-0.093137156	14.74403733	-2.382520137	0.018100359	0.248662814	-3.237939277
Asparaginyl-Hydroxyproline	0.156500749	13.73754844	2.373244148	0.01854868	0.248662814	-3.257490176
Ethoxysulfuron	0.083725726	13.23459368	2.371803949	0.018619158	0.248662814	-3.260519226

Leonuridine	0.099486418	13.18627626	2.3665366	0.018878934	0.248662814	-3.27158284
Hydantoin-5-propionic acid	0.140107403	13.98986123	2.364403862	0.018985022	0.248662814	-3.27605588
Calystegin B2	0.100614704	13.10183933	2.36399003	0.019005668	0.248662814	-3.27692338
Isorhamnetin 7-glucoside	0.068219494	13.69986297	2.357529425	0.019330556	0.248662814	-3.290447922
1,4''-Bipiperidine-1''-carboxylic acid	-0.069751971	12.21893124	-2.356127323	0.019401707	0.248662814	-3.293378456
Citrulline	-0.072655576	14.12334533	-2.352487448	0.019587491	0.248662814	-3.300978486
6-Dehydrotestosterone glucuronide	0.226753578	13.25615276	2.350539354	0.019687567	0.248662814	-3.305041539
Metixene	0.320628334	13.52630367	2.34284564	0.020087	0.248662814	-

			4	208		3.321056937
8-Oxodeoxycoformycin	0.280111754	13.76801221	2.342388425	0.020111181	0.248662814	-3.322007135
N-lactoyl-Tryptophan	0.204182166	14.00212326	2.339654141	0.020255069	0.248662814	-3.327685903
Methacycline	0.100152997	13.47587155	2.335663175	0.020466712	0.248662814	-3.33596341
Tuliposide B; Edetic Acid	-0.11876838	17.41603746	-2.334780344	0.020513 79	0.248662814	-3.337792654
ADP	-0.064421499	13.42039952	-2.324602638	0.021063443	0.253124479	-3.358833923
Salicifoline	-0.062900586	12.20889903	-2.314721087	0.021609426	0.254049788	-3.379179863

1-Piperazinecarbodithioic acid	-0.344078992	15.20489895	-2.309044118	0.021928673	0.254049788	-3.390831606
Hericene A	-0.074293018	13.48649099	-2.306981126	0.022045707	0.254049788	-3.395059115
10-Undecenal	-0.063041712	12.92790865	-2.304418685	0.022191836	0.254049788	-3.400305128
LPA(a-25:0/0:0)	-0.069257133	14.18620033	-2.30396371	0.022217 87	0.254049788	-3.401236008
3-Sulfinoalanine	-0.071227375	12.73048529	-2.303683592	0.022233913	0.254049788	-3.401809044
Potassium acetate	-0.101166099	12.54230358	-2.292718108	0.022869922	0.255698856	-3.42418933
Topotecan	0.184771442	12.7020252	2.29187736	0.022919	0.255698856	-

			6	337		3.425901095
7-hydroxy-1-oxo-1H-isochromene-3-carboxylic acid	-0.327581295	15.59291736	-2.291721299	0.02292852	0.255698856	-3.426218785
Uvaricin	-0.062169655	13.68635763	-2.287761972	0.02316257	0.256258904	-3.434271542
2-Phenylacetamide	0.244263171	14.52207622	2.284060247	0.023383279	0.256663705	-3.441788455
Dihydrofukinolide	-0.150485416	14.13713447	-2.279226437	0.023674253	0.257267974	-3.451586898
Endoxifen O-glucuronide	0.234224101	14.43496721	2.277031213	0.023807438	0.257267974	-3.456030271
4-Acetamidobutanoate	0.13253948	14.18530563	2.264365561	0.024588722	0.263535873	-3.48158776

						5
Cyclohexenone	-0.051165129	12.53491938	-2.255912923	0.025122492	0.263535873	-3.498568871
TG(15:0/18:1(9Z)/16:1(9Z))	-0.076041759	13.92557059	-2.249271131	0.02554897	0.263535873	-3.511869823
3,4-Dimethyl-5-pentyl-2-furantridecanoic acid	-0.117154847	14.35625546	-2.247246983	0.025680192	0.263535873	-3.515916021
NIK250	0.084565204	13.10678795	2.245291922	0.025807492	0.263535873	-3.519820838
CDP-DG(16:1(9Z)/20:4(5Z,8Z,11Z,14Z))	-0.049836668	13.92154919	-2.244922295	0.025831621	0.263535873	-3.520558728
Cevimeline	0.271105962	12.71491065	2.242760195	0.025973157	0.263535873	-3.524872637

Corchoroside A	-0.052638051	13.52794705	-2.2422719	0.026005215	0.263535873	-3.525846357
TG(18:3(9Z,12Z,15Z)/18:2(9Z,12Z)/18:3(9Z,12Z,15Z))	-0.066305922	13.98541045	-2.240999451	0.026088917	0.263535873	-3.528382832
4-Amino-2-methyl-5-phosphomethylpyrimidine	-0.091613777	16.276183	-2.237303771	0.026333352	0.263892823	-3.535741989
L,L-Cyclo(leucylprolyl)	-0.076884117	13.17750409	-2.227360313	0.027000941	0.263892823	-3.555485063
6-[4-(5,7-dihydroxy-6-{4-hydroxy-6-methyl-5-oxo-3-[(3,4,5-trihydroxy-6-meth...	-0.047100868	13.91226351	-2.227049146	0.027022068	0.263892823	-3.556101555
Alliospiroside D	-0.071459489	13.97836932	-2.223515629	0.027262986	0.263892823	-3.563096446
Cyclotricuspidoside C	-0.055316485	13.84813746	-	0.027272	0.263892823	-

			2.22338336 3	04		3.56335807 5
Prostaglandin E2	-0.151403324	15.15396423	-2.22153036	0.027399 16	0.263892823	-3.56702183 1
6-Keto-decanoylcarnitine	0.116019668	13.33454616	2.21939698 4	0.027546 152	0.263892823	-3.57123635 2
Ceanothine C	0.062659815	13.25497845	2.21805880 9	0.027638 703	0.263892823	-3.57387797 7
Trigoforin	-0.140913077	17.49691148	-2.21314699 1	0.027980 734	0.265341112	-3.58356119 4
4-Oxoretinal	0.068505406	13.26233486	2.20947594 8	0.028238 759	0.265978581	-3.59078502 3
trans-4-Hydroxycyclohexanecarboxylate	-0.077877156	13.27479721	-2.20467330	0.028579 436	0.266853089	-3.60021840

			3			6
xi-7-Hydroxyhexadecanedioic acid	0.077662386	13.16859233	2.200490667	0.028879033	0.266853089	-3.608418082
Erythro-4-hydroxy-L-glutamate(1-)	-0.278779132	13.85273651	-2.196962135	0.029133389	0.266853089	-3.615323942
C24:4	-0.078735272	13.55323746	-2.193085577	0.029416131	0.266853089	-3.622898802
3-Methyl-3-butenyl apiosyl-(1->6)-glucoside	0.117060935	13.37859513	2.191932398	0.029500546	0.266853089	-3.625149683
Isofucosterol 3-O-[6-O-Octadecanoyl-b-D-glucopyranoside]	-0.069463112	14.68314665	-2.191704391	0.029517261	0.266853089	-3.625594593
2-Methylbutyrylglycine	0.094557249	13.42068177	2.189604225	0.029671613	0.266853089	-3.629690587
10-Hydroxymyristic acid methyl ester	-0.076161613	13.58619342	-	0.030330	0.271029117	-

			2.180745897	375		3.646926086
1-(Isothiocyanatomethyl)-4-methoxybenzene	0.094072366	12.90103923	2.175086546	0.030757834	0.273098223	-3.657902608
1-Cyclohexyl-11-heneicosanone	-0.048006504	12.70958054	-2.169844528	0.031158 41	0.274903948	-3.668045495
PG(a-13:0/i-22:0)	-0.091420526	16.55862372	-2.164397261	0.031579 44	0.275309266	-3.678560852
Pentanoic acid	-0.083637412	13.13225969	-2.16403344	0.031607 735	0.275309266	-3.679262273
Sulfaphenazole	-0.106152118	19.9732112	-2.161609108	0.031796 838	0.275309266	-3.683933348
1-(Hydroxymethyl)-5,5-dimethyl-2,4-imidazolidinedione	-0.08654481	13.6174417	-2.15841927	0.032047 139	0.275763654	-3.69007176

			1			4
PS(20:2(11Z,14Z)/24:1(15Z))	-0.082877083	14.7390644	-2.148727308	0.032818115	0.279148943	-3.708669712
Butynal	-0.097887173	12.0839955	-2.148441986	0.032841052	0.279148943	-3.709216011
3,6-Dihydro-4-(4-methyl-3-pentenyl)-1,2-dithiin	-0.082570154	14.88910838	-2.141506499	0.033402866	0.282203604	-3.722473941
beta-Damascenone	-0.072020634	12.75399533	-2.13768872	0.033715647	0.283130194	-3.729754609
[6]-Gingerdiol 3,5-diacetate	0.105729507	13.65015784	2.134885067	0.033946948	0.283365538	-3.735093414
N-[(3a,5b,7b)-7-hydroxy-24-oxo-3-(sulfooxy)cholan-24-yl]-Glycine	0.240827485	15.03347922	2.125380475	0.034741269	0.288269817	-3.753142671

Sedoheptulose; 1,3,7-Trimethyluric acid	-0.111088788	15.91008164	-2.121281364	0.035088746	0.289430246	-3.760903204
Cycloheptanecarboxylic acid	-0.123345281	12.95373632	-2.107275671	0.036298 63	0.293803627	-3.787311301
1-(Methylthio)propyl propyl disulfide	0.114089826	13.78527611	2.107106855	0.036313429	0.293803627	-3.787628592
C3:0 (Propionic acid)	0.092412971	13.79567525	2.105801563	0.036428 03	0.293803627	-3.790081065
2-Benzoxazolol	0.139495779	13.26691532	2.105415334	0.036462	0.293803627	-3.790806461
UDP-2,4-bis(acetamido)-2,4,6-trideoxy-beta-L-altropyranose	-0.053757181	14.43749243	-2.100920776	0.036859 305	0.29529811	-3.799238578
Pentoxifylline	0.128559309	13.33002078	2.09619071	0.037281	0.296331564	-

			5	433		3.808093945
(Z)-9-Cycloheptadecen-1-one	0.129345235	12.24149289	2.092936386	0.037574263	0.296331564	-3.814175462
Heptadecanoic acid	-0.107885663	17.43659295	-2.092363335	0.037626031	0.296331564	-3.815245415
Dehydroalanine	-0.096820083	14.69568418	-2.088010141	0.038021284	0.297762193	-3.823364202
(R)-3-Hydroxy-Octadecanoic acid	-0.070881817	15.50242768	-2.080639955	0.038698579	0.298849736	-3.837072926
Nicotinate	0.086114715	13.84104052	2.079829021	0.038773728	0.298849736	-3.838578455
1-Palmitoylglycerophosphoinositol	-0.076043125	13.79001141	-2.07880736	0.038868581	0.298849736	-3.84047439

			9			1
3,5-Dinitrosalicylic acid; Thiolutin	-0.093170375	13.43232517	-2.077205709	0.039017684	0.298849736	-3.84344489
Propyl 1-(propylsulfinyl)propyl disulfide	-0.147182824	16.72067694	-2.070778707	0.039620924	0.301811849	-3.855342653
2-Methyl-1-methylthio-2-butene	-0.071263176	14.12799691	-2.062194375	0.040439075	0.303807176	-3.871179133
2-Hydroxy-imipramine glucuronide	0.168305846	13.27058805	2.061236798	0.040531227	0.303807176	-3.872941785
2-Vinylthiophene	-0.038033985	12.42842475	-2.061180172	0.040536682	0.303807176	-3.873045993
N-tert-Butyloxycarbonyl-deacetyl-leupeptin	-0.060904771	13.97392544	-2.056649996	0.040975129	0.305450959	-3.881374044

Eremopetasitenin B2	0.252271711	13.80171833	2.052267197	0.041403157	0.305578563	-3.889414489
5-Hydroxypentanoic acid	0.164984618	16.16189857	2.051986845	0.041430666	0.305578563	-3.889928249
Isoleucyl-Isoleucine	-0.120420545	13.66650968	-2.048206094	0.041803167	0.306703237	-3.896850124
Arginyl-Arginine	0.063983949	13.78307779	2.044505274	0.042170555	0.307778816	-3.903613834
3-Hydroxydodecanoic acid	-0.065357983	14.004703	-2.026393202	0.044008508	0.317291312	-3.936547061
Resolvin D2	-0.215389073	14.07929903	-2.024252985	0.044230125	0.317291312	-3.94042009
PS(DiMe(11,5)/DiMe(13,5))	-0.053845616	14.19590642	-	0.044354	0.317291312	-

			2.023056881	393		3.942582905
a-Methyldopa mono-O-sulfate	0.065778484	12.83125327	2.022704953	0.044391012	0.317291312	-3.943219033
Phthalate	-0.05538195	15.28405996	-2.020586614	0.044611978	0.317291312	-3.947045805
Indole	-0.085882062	15.01339411	-2.017464062	0.044939398	0.317997566	-3.952679683
5''-(3'',4''-Dihydroxyphenyl)-gamma-valerolactone sulfate	0.12499816	14.06684474	2.014429548	0.045259 54	0.318645445	-3.958146721
3-Dehydroquinate; 5-(Methylthio)-2-[(methylthio)methyl]-2-pentenal	-0.124899861	16.4933483	-2.009970844	0.045733445	0.320363935	-3.966165306
N-Decanoylglycine	-0.069619302	12.66142214	-2.00232615	0.046555782	0.32361001	-3.97987397

			9			3
1-Palmitoyl-2-(5-hydroxy-8-oxo-6-octenedioyl)-sn-glycero-3-phosphatidylcholine	-0.056095579	13.0738176	-2.001210989	0.046676782	0.32361001	-3.981869544
2-Naphthol	-0.131887128	12.95724861	-1.998602707	0.046960832	0.32361001	-3.986532843
D-Urobilin	0.156854364	13.84325979	1.99709751	0.047125417	0.32361001	-3.989221304
Ethyl isovalerate	-0.056574177	12.92199917	-1.990165879	0.047889678	0.32473481	-4.001576957
Carnitine	-0.105718759	11.589064	-1.99005707	0.047901758	0.32473481	-4.001770581
Uracil	-0.122858861	14.07662241	-1.989280303	0.047988071	0.32473481	-4.003152531

4-Hydroxyphenylpyruvic acid	0.078435217	13.26040757	1.985392329	0.048422075	0.326088753	-4.010061871
Triphenyl phosphate	0.076065678	12.85348924	1.98019535	0.049007381	0.328443695	-4.019277201
3,4-Dihydroxyphenylglycol	-0.056667838	13.40036331	-1.977629222	0.049298588	0.328814504	-4.023818938
Triose	0.091945328	13.50338412	1.968915376	0.050298383	0.333137117	-4.039199214
4-Methyl-2-oxopentanoate	-0.083059529	16.18163018	-1.963991741	0.050870833	0.333137117	-4.047860798
Bensulfuron-methyl	-0.091639043	13.57171226	-1.959879848	0.051353108	0.333137117	-4.055078425
Dehydroepiandrosterone sulfate	-0.097704866	17.98178091	-	0.051469	0.333137117	-

			1.958890995	662		4.056811997
Epinephrine sulfate	0.119791535	14.12001891	1.955811386	0.051834078	0.333137117	-4.06220552
Azelaic acid	-0.136148053	15.41099033	-1.953040239	0.052163849	0.333137117	-4.06705185
(±)-2-Butylthiazolidine	-0.07281947	13.95105125	-1.952733319	0.052200482	0.333137117	-4.067588201
Serine	-0.072046888	14.43196632	-1.951153224	0.052389418	0.333137117	-4.070348183
3-Hydroxycapric acid	-0.096634293	14.49717899	-1.950380647	0.052482006	0.333137117	-4.071696878
(3b,6b,8b,12a)-8,12-Epoxy-7(11)-eremophilene-6-angeloyloxy-8,12-dimethoxy-3-ol	-0.079797202	13.95323341	-1.948954862	0.052653239	0.333137117	-4.074184535

Nb-Feruloyltryptamine	-0.088451901	16.65097294	-1.947837737	0.052787731	0.333137117	-4.076132434
Aprobarbital	-0.057055518	14.05637326	-1.94660847	0.052936058	0.333137117	-4.078274629
Gentisic acid	-0.090689765	14.16606283	-1.945050281	0.053124578	0.333137117	-4.08098816
20-Carboxy-leukotriene B4	-0.088404333	13.58039743	-1.94200717	0.053494382	0.333137117	-4.086281606
Novapikromyin	-0.04753603	13.6093088	-1.941703866	0.053531359	0.333137117	-4.086808763
Azadirachtin A	-0.051111075	13.56624979	-1.937497559	0.054046379	0.334847346	-4.094111362
7,8,8,12,13,21,22-heptahydroxy-19-	-0.049541147	13.99098894	-	0.054957	0.335859465	-

(hydroxymethyl)-2,17,20,23-tetraoxapentac...			1.930138642	424		4.106850621
Methylthiouracil	-0.091715513	12.09558691	-1.929415987	0.055047581	0.335859465	-4.108099121
1-(3,4-Dimethoxyphenyl)-1,2-ethanediol 1-O-b-D-glucoside	0.05078077	13.65918764	1.927130144	0.055333577	0.335859465	-4.112045309
Cephapirin	-0.105450132	12.68341681	-1.924348339	0.055683307	0.335859465	-4.11684164
Carnosic acid	0.091970068	14.5416057	1.921316138	0.056066628	0.335859465	-4.12206211
Aurachin D	-0.073503403	12.84738462	-1.92037853	0.056185604	0.335859465	-4.123674766
TG(15:0/20:0/o-18:0)	-0.058428104	13.82856517	-1.920299935	0.056195587	0.335859465	-4.123809912

Prinomide	0.08279604	12.58577164	1.918096599	0.056476052	0.335859465	-4.12759645
Cefuroxime	-0.129051652	13.37735599	-1.916415743	0.056690798	0.335859465	-4.130482269
LPA(a-13:0/0:0)	-0.075823505	15.08859219	-1.915951214	0.056750267	0.335859465	-4.131279379
BILA 2185BS	0.21791823	13.59433353	1.915095161	0.056859995	0.335859465	-4.132747835
Thiobenzamide S-oxide	-0.083820271	11.88942877	-1.908981446	0.057648829	0.339082144	-4.143216839
Paucin	-0.058611582	14.73418511	-1.904434448	0.058241439	0.339196736	-4.150982142
Biotinyl-CoA	-0.033926681	13.48908317	-1.90384199	0.058319027	0.339196736	-4.15199260

			8			8
C6:2	-0.058465159	12.70577462	-1.903163018	0.058408053	0.339196736	-4.153150284
(+/-)-3-[(2-methyl-3-furyl)thio]-2-butanone	0.12892483	13.43692261	1.899610383	0.058875724	0.339196736	-4.159201133
Dipiperamide C	0.049627519	13.46125321	1.899540588	0.058884943	0.339196736	-4.159319898
PS(20:3(5Z,8Z,11Z)/24:1(15Z))	-0.06522938	14.39540455	-1.895823778	0.059377637	0.339710497	-4.165638496
2-Arachidonylglycerol	-0.067605705	14.02342432	-1.895193534	0.059461522	0.339710497	-4.166708733
Debromoaplysiatoxin	0.205096007	14.16533139	1.893061636	0.059746 01	0.339942603	-4.170326437

Hydroxyadipate; (-)-1-Methylpropyl 1-propenyl disulfide	-0.129232811	16.02052716	-1.889781172	0.060185987	0.341053927	-4.175885532
CDP-DG(18:2(9Z,11Z)/a-15:0)	-0.052529532	15.05783829	-1.884426171	0.060910014	0.342924194	-4.1849402
Arginine	-0.081106077	15.853689	-1.883705289	0.061008034	0.342924194	-4.186157236
Linocinnamarin	0.083236592	13.29755338	1.875551323	0.062125943	0.347733668	-4.199892013
Musabalbisiane A	0.041748251	13.03585823	1.873168831	0.062455787	0.347733668	-4.203894315
2-Thiophenecarboxaldehyde	-0.050329272	12.04872031	-1.869562823	0.062957795	0.347733668	-4.209942653
alpha-EMTBL	-0.12050301	12.67004397	-	0.063006	0.347733668	-

			1.869215697	297		4.210524293
Ethosuximide	-0.250887708	12.76894086	-1.868467692	0.063110917	0.347733668	-4.211777288
Polyoxyethylene 40 monostearate	-0.063908052	14.20922656	-1.858250532	0.064554477	0.3527606	-4.228843804
Hexahomomethionine	0.075207447	12.55938161	1.854025758	0.065159356	0.3527606	-4.235874407
3,3''-Thiobispropanoic acid	0.104731916	14.73718088	1.850509002	0.06566645	0.3527606	-4.241715003
13-L-Hydroperoxylinoleic acid	0.210042032	17.43011347	1.850209426	0.065709798	0.3527606	-4.242212042
Aromatic aldehyde	-0.083517814	12.16984908	-1.85013715	0.065720259	0.3527606	-4.24233193

			4			9
N6,N6,N6-Trimethyl-L-lysine	-0.11451053	13.60679048	-1.846761211	0.066210459	0.3527606	-4.247927528
Aniline	0.165074567	12.68716554	1.84629799	0.066277957	0.3527606	-4.248694543
Annonisin	-0.0458075	13.39633041	-1.845094784	0.066453547	0.3527606	-4.250685978
Proline	-0.071673009	17.86846222	-1.84372297	0.066654214	0.3527606	-4.252954951
5alpha-Androstan-3alpha,17beta-diol disulfate	0.090357006	13.20473917	1.843177412	0.066734157	0.3527606	-4.253856848
2-(4-Methyl-5-thiazolyl)ethyl butanoate	0.01770031	16.70059273	1.84268156	0.066806886	0.3527606	-4.25467635
Mabioside E	-0.041779957	13.85215791	-	0.067479	0.354969091	-

			1.838114983	777		4.262213598
Diethylpropion	-0.085497139	12.00015209	-1.835670409	0.067842291	0.35553441	-4.266241011
8,11,14-Eicosatrienoic acid	-0.126366519	16.91803372	-1.829693596	0.06873541	0.358865773	-4.276065975
Hippurate	0.218573033	16.7750628	1.824854554	0.069465621	0.361324911	-4.283997961
5a-Androst-3-en-17-one	-0.06890416	12.75650768	-1.818626485	0.070414868	0.363008656	-4.294176944
Asparagoside F	-0.040473365	13.9039025	-1.814301495	0.071080345	0.363008656	-4.301225818
Spinoside A	0.081230112	13.608581	1.814129419	0.071106929	0.363008656	-4.30150593

						2
11beta,20-Dihydroxy-3-oxopregn-4-en-21-oic acid	-0.107359566	13.62397102	-1.814032804	0.071121859	0.363008656	-4.301663196
Validamycin B	0.056426745	13.02983801	1.812965713	0.071286926	0.363008656	-4.303399602
3-Hydroxy-1-phenyl-1-eicosanone	-0.043913745	12.76791588	-1.811373131	0.071533868	0.363008656	-4.305989267
1-(alpha-Methyl-4-(2-methylpropyl)benzeneacetate)-beta-D-Glucopyranuronic acid	0.094792729	13.06920875	1.810869025	0.071612181	0.363008656	-4.306808525
Butanal	0.12415785	12.63580834	1.808616336	0.071963	0.363465299	-4.31046684
1-Tridecene	0.126790877	11.41994921	1.805649057	0.072427268	0.364489572	-4.315278917
PIP2(16:0/22:3(10Z,13Z,16Z))	-0.042863423	13.95204644	-	0.073467	0.365359385	-

			1.799057358	463		4.325941452
Aciclovir	-0.100192252	15.59363214	-1.797968808	0.073640418	0.365359385	-4.327698632
C9:1	0.15444674	13.84610585	1.796081515	0.073941078	0.365359385	-4.33074274
Petunidin 3-rutinoside	0.063436374	13.18512659	1.795246139	0.074074481	0.365359385	-4.332089172
L-beta-aspartyl-L-alanine	-0.09740609	14.89521924	-1.793468885	0.074358956	0.365359385	-4.334951679
Dopamine	0.105589548	12.75496321	1.793408561	0.074368628	0.365359385	-4.335048792
N-Gluconyl ethanolamine; Dihydrobiopterin	0.159073196	14.41478984	1.792996201	0.074434767	0.365359385	-4.335712541
Kinetensin 1-7	-0.060056032	14.35958591	-	0.074854	0.366130062	-

			1.790386766	424		4.339909352
Heptanoylcarnitine	0.061288761	12.31237322	1.787993955	0.075240952	0.366733873	-4.343752569
PC(14:1(9Z)/22:2(13Z,16Z))	-0.061403212	15.42934488	-1.782313893	0.076165069	0.369944623	-4.352855712
Methyl methanesulfonic acid	-0.054065214	11.71581817	-1.778303952	0.076823066	0.370995193	-4.359265373
Histidinol	-0.128942104	11.90791584	-1.777018504	0.077034982	0.370995193	-4.361317132
Nonadeca-10(Z)-enoic acid	-0.097772956	15.56270284	-1.772711317	0.077748555	0.370995193	-4.36818156
PA(15:0/20:0)	-0.046484967	13.93613272	-1.77225618	0.077824274	0.370995193	-4.36890597

						8
[(6-{5,7-dihydroxy-4-oxo-6-[3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]-2-...	-0.043889753	13.9880901	-1.771720266	0.077913508	0.370995193	-4.369758733
Rhein	-0.056217749	15.69777296	-1.771332145	0.077978186	0.370995193	-4.370376162
Isopetasoside	0.093483783	14.21093433	1.766780102	0.078740048	0.371197304	-4.377607853
Nitrosonornicotine	0.166171939	13.23607796	1.764931359	0.079051203	0.371197304	-4.380539755
NONOate; D-2-Hydroxyisocaproate	0.102952736	14.17863686	1.76219279	0.079513973	0.371197304	-4.384877362
Xanthine	-0.303072226	16.45036701	-1.762076079	0.079533744	0.371197304	-4.385062075

Caffeic acid 3-sulfate	0.085242474	13.84229026	1.760047324	0.079878067	0.371197304	-4.388271004
delta-(L-2-Aminoadipyl)-L-cysteinyl-D-valine	0.090743405	12.87684498	1.758338788	0.080168987	0.371197304	-4.390970658
Anthopleurine	0.150740472	12.48377992	1.75785838	0.080250944	0.371197304	-4.391729293
5-Methylquinoxaline	-0.067634625	12.36080855	-1.757195129	0.080364207	0.371197304	-4.392776334
5,6-Epoxy-8,11,14-eicosatrienoic acid	-0.199576768	15.37565694	-1.756218884	0.080531157	0.371197304	-4.394316787
Leukotriene B4	-0.180071034	15.42923169	-1.755329568	0.080683489	0.371197304	-4.395719351
Tetrahydrofurfuryl butyrate	-0.037041203	14.33149812	-	0.081013	0.371491178	-

			1.753405567	858		4.39875139
Ethyl glucuronide	0.109754334	13.66977717	1.74850144	0.081860949	0.374144798	-4.406465259
Phenylacetaldehyde	0.073272922	15.24023414	1.744633311	0.082534186	0.375989068	-4.412534816
Fumitremorgin B	-0.071359843	13.36201171	-1.740143048	0.083321366	0.37833871	-4.419564251
(3beta,17alpha,23S,24S)-17,23-Epoxy-3,24,29-trihydroxy-27-norlanost-8-en-15...	-0.076140371	14.0204077	-1.73699096	0.083877604	0.379627856	-4.424488313
PC(o-22:2(13Z,16Z)/22:3(10Z,13Z,16Z))	-0.054514331	14.10979149	-1.729096084	0.085284083	0.384744376	-4.436783405
Saponin H	-0.056232011	13.68256116	-1.72609644	0.085823482	0.385034443	-4.44144067

			5			2
Cavipetin C	-0.04682372	13.7478101	-1.725015528	0.086018533	0.385034443	-4.443116992
Pentonic acid; S-Propyl 1-propanesulfinothioate; Methylxanthine	-0.096380873	17.13887413	-1.723541439	0.086285113	0.385034443	-4.445401417
5-Hydroxymethyl-4-methyluracil	0.096791808	13.88757643	1.719837163	0.086957976	0.385034443	-4.451133651
Medroxyprogesterone	-0.157080251	15.07861088	-1.719203554	0.087073495	0.385034443	-4.452112941
3,4-Diethylthiophene	0.070885817	13.17762706	1.717891913	0.087313026	0.385034443	-4.454139069
Argyrolobine	0.07112735	12.7821246	1.717089936	0.087459747	0.385034443	-4.455377167

N-Acetylpuromycin	0.048488878	13.25040687	1.715393773	0.087770718	0.385034443	-4.457993868
Succinylproline	0.048087821	14.1355578	1.714842358	0.087872006	0.385034443	-4.458844007
10,12-Tritriacontanedione	-0.050381452	13.06772743	-1.712135837	0.088370 54	0.385034443	-4.463012914
6-Acetyl-1,2,3,4-tetrahydropyridine	-0.086447455	11.72691896	-1.711117965	0.088558623	0.385034443	-4.464579111
3''-Ketolactose	0.074133136	13.65807647	1.710554492	0.088662881	0.385034443	-4.465445737
Mevalonate	0.073259826	14.23581904	1.706355912	0.089442877	0.387215436	-4.471894473
Neuroprotectin D1	-0.188116563	14.64208504	-	0.090599	0.391007844	-

			1.700184997	379		4.481344688
5,7-Dihydro-2-methylthieno[3,4-d]pyrimidine	-0.27702947	14.7530515	-1.695755718	0.091436924	0.392798245	-4.488107269
3-Methoxybenzyl alcohol	0.152848596	13.4541631	1.694746719	0.091628592	0.392798245	-4.489645406
Mazaticol hydrochloride	0.089562528	12.47066025	1.692727344	0.092013168	0.392798245	-4.492721112
Hydroxy-valine	0.088719703	12.87852259	1.692055846	0.092141339	0.392798245	-4.493743081
N-Nonanoylglycine	-0.049790602	12.6966528	-1.685155753	0.093466767	0.396331743	-4.504221706
Epsilon-(gamma-Glutamyl)-lysine	0.122839876	13.86916685	1.684782818	0.09353884	0.396331743	-4.504786871

2-Methylthiophene	0.05352313	14.34897814	1.681407639	0.094193169	0.397894782	-4.509896255
Thio-THIP	-0.046668861	12.68027195	-1.675386043	0.095369722	0.401381267	-4.518987119
Sebacic acid	0.102081318	14.64211496	1.674187233	0.095605365	0.401381267	-4.520793196
Leukotriene A4	-0.146216125	14.22820944	-1.671220804	0.096190478	0.401381267	-4.525256897
o-O-glucuronide rosiglitazone	0.081960067	13.24761493	1.670866814	0.096260493	0.401381267	-4.525789046
Leucomycin V	-0.040178478	13.46621617	-1.669868369	0.096458195	0.401381267	-4.527289408
4-Pyridoxate	0.160470522	16.00602912	1.66781414	0.096865	0.401878504	-

			7	981		4.530373546
LysoPE(0:0/16:0)	-0.079892271	16.01257959	-1.664128507	0.097601101	0.402767949	-4.535897797
1'-Hydroxy-gamma-carotene	-0.067695085	14.10935527	-1.663117863	0.097803462	0.402767949	-4.537410536
Acamprosate	-0.098576154	14.66421918	-1.662401241	0.097947155	0.402767949	-4.538482639
Glyphosate	-0.046350383	13.30966769	-1.647921705	0.100887083	0.413637038	-4.560048618
4-O-(beta-L-Arabinofuranosyl-(1->2)-beta-L-arabinofuranosyl-(1->2)-beta-L-a...	0.046591107	13.2133255	1.646157919	0.101249991	0.413907588	-4.562663096
8-iso-15-keto-PGE2	-0.090076604	14.13207407	-1.64443980	0.101604509	0.414142355	-4.56520726

			2			2
3-(Acetylthio)-2-methylfuran	-0.052174503	12.70945213	-1.64064326	0.102391422	0.415012358	-4.570819978
1,4-Dimethoxyglucobrassicin	0.101532316	13.23667862	1.640537662	0.102413379	0.415012358	-4.570975913
2-Hydroxymyristic acid	-0.052575333	13.41051151	-1.63788756	0.102965653	0.416040927	-4.574886041
Orcinol	-0.097837449	15.49394883	-1.634838904	0.103603932	0.417074072	-4.579376622
Saccharin	0.152770577	14.92072443	1.633366693	0.103913292	0.417074072	-4.581542233
beta-Rhodomycin	0.02797396	12.78365336	1.632390061	0.104118922	0.417074072	-4.582977806

2,5-Dimethyl-3-furanthiol acetate	-0.063928364	14.12567392	-1.628103837	0.105025241	0.417978588	-4.589268346
C24:5	-0.0604372	14.48245411	-1.626899686	0.10528099	0.417978588	-4.591032686
L-Capreomycidine	-0.080023526	12.86923426	-1.626648507	0.105334	0.417978588	-4.591400557
3,4,5-trihydroxy-6-[(3-methylbut-2-enoyl)oxy]oxane-2-carboxylic acid	0.269176864	15.28960004	1.625663353	0.105544091	0.417978588	-4.592842859
Alprenolol	0.075214111	12.09747774	1.620462178	0.106656702	0.421188223	-4.600443485
Taurocholic acid	0.208854093	14.84053553	1.616456073	0.107520037	0.421334419	-4.606281571
Naringenin	0.187770147	15.05199004	1.61432704	0.107981	0.421334419	-

			6	115		4.609378475
Rifamycin S	-0.039911746	13.73572289	-1.614100804	0.108030205	0.421334419	-4.609707336
2-Hydroxymethylclavam	0.088639708	13.67619807	1.614031193	0.108045312	0.421334419	-4.609808513
N-Acetylneuraminic acid	0.111427538	14.2976094	1.613296034	0.108204966	0.421334419	-4.610876769
{1-[5-hydroxy-8-(2-hydroxypropan-2-yl)-2-oxo-2H,8H,9H-furo[2,3-h]chromen-4-...	-0.061253682	15.07264347	-1.606514881	0.109686 5	0.425913594	-4.620708113
TG(14:0/22:6(4Z,7Z,10Z,13Z,16Z,19Z)/o-18:0)	-0.045252329	13.87977972	-1.598042702	0.111560128	0.431797849	-4.632934486
C22:4	-0.116481725	15.94682666	-1.59687031	0.111821394	0.431797849	-4.63462142

			5			6
C15:0	-0.092035437	16.46275922	-1.593624021	0.112547367	0.432440373	-4.639286207
N-Desmethylvenlafaxine	0.054853198	12.24653339	1.590105732	0.113338388	0.432440373	-4.644331398
Aminophenol	0.07927485	14.09907418	1.58910753	0.113563616	0.432440373	-4.645760831
Piroxicam	-0.048693747	15.15062647	-1.588003211	0.113813202	0.432440373	-4.647341209
S-Inosyl-L-homocysteine	0.074131192	12.87678336	1.587769872	0.113865994	0.432440373	-4.647675
Geldanamycin	0.097923091	13.57566145	1.585426957	0.114397149	0.432440373	-4.651023894
Licoricesaponin E2	-0.064267623	14.17415408	-	0.114479	0.432440373	-

			1.58506415	575		4.651542048
(+)-7-epi-Syringaresinol 4''-glucoside	0.038268268	13.56315217	1.584054823	0.114709132	0.432440373	-4.652982945
Benzyl methyl disulfide	-0.092315491	14.67589277	-1.582777423	0.115000181	0.432440373	-4.654805257
PE(14:0/22:6(4Z,7Z,10Z,13Z,16Z,19Z))	-0.052336288	14.00309645	-1.58221101	0.115129422	0.432440373	-4.655612832
Fosamine	-0.059400471	12.22464455	-1.581026119	0.115400157	0.432440373	-4.657301303
TG(16:0/16:0/20:4(5Z,8Z,11Z,14Z))	-0.043606981	14.13323698	-1.574659597	0.116863482	0.43594995	-4.666352512
Ribothymidine	0.106824636	14.86691829	1.573142564	0.117214324	0.43594995	-4.66850401

						2
Sulfapyridine	0.139568717	13.52021108	1.571777054	0.117530835	0.43594995	-4.670438889
cis-Methylbixin	-0.067753795	14.57063001	-1.571384561	0.117621935	0.43594995	-4.670994734
2-Methyl-4-heptanone	-0.052654492	11.73690724	-1.57018641	0.117900381	0.43594995	-4.672690709
3,4,5-trihydroxy-6-{2-[(3-methylbut-2-enoyl)oxy]-2-{9-[(3-methylbut-2-enoyl...	0.046714767	13.42197093	1.55900749	0.120523487	0.444470214	-4.68845365
Minaprine	0.053644231	13.50763582	1.551115531	0.122402866	0.448073399	-4.699515678
Venoterpine	0.086189401	12.80212903	1.55097258	0.12243712	0.448073399	-4.699715546
Dihydrolipoate	-0.081926255	13.67108335	-	0.122464	0.448073399	-

			1.550856984	824		4.699877154
4-Hydroxyaminoquinoline N-oxide	0.185350116	13.80709809	1.545824527	0.123675722	0.451319257	-4.706901346
2-Carboxy-4-dodecanolide	-0.073420582	13.92714769	-1.54274223	0.124422012	0.451934597	-4.711192554
6-Mercaptopurine ribonucleoside 5''-diphosphate	-0.036066589	13.78556863	-1.540393339	0.124993101	0.451934597	-4.714457099
Urolithin B 3-O-glucuronide	0.074723573	12.86780404	1.540138937	0.125055078	0.451934597	-4.714810383
3-(2-Methylpropanoyloxy)-8-(2-methylbutanoyloxy)-9,10-epoxy-p-mentha-1,3,5-...	-0.039989545	13.97400871	-1.539304352	0.125258566	0.451934597	-4.715968954
11,12-Dihydrolactaroviolin	-0.046191045	12.90003545	-1.53845736	0.125465344	0.451934597	-4.71714411

			4			7
Glycyl-Phenylalanine	0.104009958	13.32324754	1.536034449	0.126058337	0.452900313	-4.720502334
Undecanoic acid	-0.038580056	12.90879228	-1.533818163	0.126602682	0.453573756	-4.723569639
Annoglabasin F	-0.085012054	13.87476737	-1.530837286	0.127337725	0.453573756	-4.727688313
Phosphatidylinositol-3,4,5-trisphosphate	-0.047592053	14.50517938	-1.529671223	0.127626169	0.453573756	-4.729297333
Goniodomin A	-0.040204307	14.08852483	-1.528786062	0.127845468	0.453573756	-4.730517945
S-Decyl GSH	0.068021954	13.01237279	1.528432222	0.127933215	0.453573756	-4.731005688

Valine; Betaine	-0.052086004	17.8316875	-1.524801523	0.128836299	0.453573756	-4.736003979
Indole-3-acetate	0.072583384	13.89488004	1.524647781	0.12887465	0.453573756	-4.736215377
p-Cresol sulfate	-0.229861983	20.67444325	-1.524031997	0.129028347	0.453573756	-4.737061876
Sulfasalazine	0.082412192	14.17634778	1.523448322	0.129174162	0.453573756	-4.73786393
trans-Zeatin riboside diphosphate	0.074026191	13.61649561	1.518940409	0.130304685	0.456393795	-4.744048349
C22:6	-0.11117429	17.61533323	-1.516920765	0.130813686	0.457028267	-4.746813303
Procaine	0.088286352	12.26453635	1.515577043	0.131153198	0.457068894	-4.74865091

UDP-2,3-diacetamido-2,3-dideoxy-alpha-D-glucuronate	-0.0352145	14.05185588	-1.512023336	0.132054412	0.459061972	-4.753503123
Glycineamideribotide	-0.059868868	15.37908566	-1.507650105	0.133170081	0.459727206	-4.759459048
5-Methyl-3-isoxazolyl sulfate	-0.056677262	11.94747773	-1.507183552	0.133289538	0.459727206	-4.760093455
C13:0	-0.050431279	13.31178782	-1.504952244	0.133861998	0.459727206	-4.763124888
Kni 102	-0.038337757	13.37296486	-1.504934373	0.133866591	0.459727206	-4.763149146
Aspartyl-Tryptophan	0.114564768	12.79804869	1.503941451	0.134121955	0.459727206	-4.764496686
Rhazidigenine Nb-oxide	-0.0899433	17.89710681	-	0.134825	0.459727206	-

			1.501214929	126		4.76819252
Demethylphylloquinone	-0.058186398	14.5139722	-1.500586851	0.134987513	0.459727206	-4.769042959
Amrinone	-0.084201201	12.96786247	-1.500248383	0.135075086	0.459727206	-4.769501112
6-[(2-{[3-(3,4-dimethoxyphenyl)-7-methoxy-8-methyl-4-oxo-4H-chromen-5-yl]ox...	0.055451549	13.50493555	1.499712282	0.135213884	0.459727206	-4.770226578
N(tele)-methylhistaminium; Sulcatone	-0.049283271	12.05527592	-1.497141985	0.135880881	0.460870922	-4.773701248
Acetaldehyde diisoamyl acetal	0.056121293	11.71750479	1.494092569	0.136675527	0.462440983	-4.777816069
Xamoterol	0.068262476	13.23397646	1.492603722	0.137064815	0.462635236	-4.77982211

						3
Mecarbam	0.056248276	13.12373571	1.487703314	0.138352208	0.465852604	-4.786411031
(3S,5S)-Carbapenam-3-carboxylic acid	0.076104101	13.25433093	1.486406892	0.138694358	0.465863633	-4.788150613
Phytolaccoside A	0.102568537	13.51721004	1.485160707	0.139023867	0.465863633	-4.78982139
delta-Guanidinovaleric acid; 8-Hydroxyoctanoate	-0.040236476	12.39217877	-1.476066005	0.141447057	0.472846996	-4.80197332
Pyrazinamide	0.067378599	12.81467922	1.471352456	0.142715 73	0.475946716	-4.808242651
Epothilone C	0.098409865	13.18775356	1.463180238	0.144936145	0.480756326	-4.819065794
Avocadyne	-0.061991756	15.36488337	-	0.144969	0.480756326	-

			1.463058307	475		4.81922683
4''-O-Methylkanzonol W	0.112887684	14.41780767	1.460629418	0.145634642	0.480756326	-4.822431986
4-Nitrophenyl sulfate	0.018695837	13.86386197	1.459998784	0.145807 73	0.480756326	-4.823263319
3-Methyl-4-phenyl-3-buten-2-one	0.139486539	13.70582083	1.45972727	0.145882 3	0.480756326	-4.823621133
Slaframine	0.055372355	12.59398601	1.457173455	0.146585 134	0.4819332	-4.826983493
Methylpyrazine	0.084789362	14.97636242	1.452762719	0.147805 151	0.484004992	-4.83277712
1-Methylnaphthalene	-0.070741269	12.58604989	-1.452386035	0.147909 703	0.484004992	-4.833271108

10-Undecenyl acetate	-0.049477249	13.03845651	-1.449333831	0.148758975	0.484571389	-4.837269196
C26:0	-0.059995246	13.99345804	-1.449265553	0.148778016	0.484571389	-4.837358539
2,3-Dimethylmaleate	-0.042632427	14.71317826	-1.447474197	0.149278251	0.485067325	-4.839701101
2-Methylacetophenone	-0.046943366	13.90677073	-1.442794081	0.150591272	0.488195892	-4.845807926
Acetyl-Met	-0.058845932	14.55604052	-1.439855373	0.151420257	0.489744405	-4.849632597
C13:2	-0.044859613	12.96636507	-1.43728032	0.152149533	0.490964001	-4.852977708
Dimethyl trisulfide	-0.037793844	11.12644434	-	0.153343	0.493674105	-

			1.433084684	535		4.858415477
Phenylethyl alcohol	0.127252673	12.92696857	1.4277324	0.154877 1	0.49698765	-4.865329745
Quinoline yellow	-0.060177719	13.90832206	-1.427007101	0.155085 816	0.49698765	-4.866264763
PE(22:4(7Z,10Z,13Z,16Z)/P-18:1(11Z))	-0.055259495	19.2610386	-1.422183112	0.156479 472	0.498823329	-4.872471774
Nicotinurate	0.082130064	13.46882305	1.421973099	0.156540 361	0.498823329	-4.872741529
Kansuinine B	-0.038359257	13.55006487	-1.419458957	0.157270 699	0.498823329	-4.875967845
PE(14:0/P-16:0)	-0.037398253	13.42300378	-1.41843296	0.157569 489	0.498823329	-4.87728286

			1			6
Phosphoserine	-0.068490654	13.12534368	-1.418258851	0.157620236	0.498823329	-4.877505931
Verbasoside	0.076650011	12.88397153	1.417189805	0.157932 1	0.498823329	-4.878874974
Cyclopentolate	-0.056383108	13.67291146	-1.416397641	0.158163495	0.498823329	-4.879888784
3-Methyleneoxindole	0.095623217	16.04855505	1.411172713	0.159696204	0.502520336	-4.886561738
Luteolin 7-O-(2-apiosyl-4-glucosyl-6-malonyl)-glucoside	0.079425964	13.59221163	1.409300693	0.160248098	0.50312128	-4.88894669
{[1-(4-methoxyphenyl)pentan-3-yl]oxy}sulfonic acid	0.280873279	19.31222691	1.407109607	0.160895899	0.503766807	-4.891734194
Lumequoylacetone	-0.040348537	12.73702475	-	0.161532	0.503766807	-

			1.40496236	671		4.894461806
PC(15:0/18:4(6Z,9Z,12Z,15Z))	0.08830685	17.63010502	1.4047286	0.161602108	0.503766807	-4.894758501
2-Carboxy-2-hydroxy-8-carboxychromene	-0.079404036	12.58618615	-1.403729202	0.161899232	0.503766807	-4.896026421
TG(20:4(5Z,8Z,11Z,14Z)/20:4(5Z,8Z,11Z,14Z)/22:6(4Z,7Z,10Z,13Z,16Z,19Z))	-0.037615946	13.83717127	-1.401968574	0.162423682	0.50427308	-4.898257952
(5-{8-[5,7-dihydroxy-2-(4-hydroxyphenyl)-4-oxo-3,4-dihydro-2H-1-benzopyran-...	-0.041959148	14.34159536	-1.398799861	0.163370819	0.504563724	-4.902267266
Acetyl-Glu-semialdehyde	0.047403121	12.68139197	1.39735757	0.163803311	0.504563724	-4.904089228
Actinonin	0.088147397	12.59241304	1.395037986	0.164500693	0.504563724	-4.907015561

						1
3,4-Methyleneazelaic acid	-0.062646237	14.297317	-1.393629578	0.164925227	0.504563724	-4.908790052
Oxalosuccinic acid	-0.169689082	16.72121712	-1.393193303	0.165056902	0.504563724	-4.90933937
Monoisobutyl phthalic acid	0.113589297	14.46691688	1.392660691	0.165217 76	0.504563724	-4.910009759
Tenoxicam	-0.020680081	13.73634701	-1.392175295	0.165364462	0.504563724	-4.910620499
PA(16:0/22:6(4Z,7Z,10Z,13Z,16Z,19Z))	-0.034042752	13.9628542	-1.392015005	0.165412928	0.504563724	-4.910822135
6-Methylquinoline	-0.05984394	14.38249746	-1.390716534	0.165805939	0.50465825	-4.912454701

3-Hydroxynonyl acetate	0.046720596	12.74003815	1.38841211	0.166505165	0.505682352	-4.915348375
Phenytoin	0.088313117	12.68078336	1.384626001	0.167658 82	0.50807912	-4.920092399
6-O-Glc-paromamine	0.02492467	12.51526267	1.379806799	0.169136001	0.510488937	-4.926112533
N-Methoxyspirobrassinol methyl ether	0.223145387	15.17217236	1.379015628	0.169379448	0.510488937	-4.927098895
Polyethylene, oxidized	0.077749081	13.82360467	1.378242012	0.169617748	0.510488937	-4.928062836
Kanamycin	-0.044101783	13.16248989	-1.3764008	0.170185924	0.510488937	-4.930354895
16,17-Dihydro-16a,17-dihydroxygibberellin A4 17-glucoside	0.082414532	14.37676576	1.37363415	0.171042378	0.510488937	-4.933793335

						8
Methionine	0.076735955	14.46062011	1.372118833	0.171512841	0.510488937	-4.935673729
Porrigenin A	-0.048594628	14.46403842	-1.371922338	0.171573918	0.510488937	-4.935917415
Urocanate	0.08798107	14.62863958	1.370547364	0.172001768	0.510488937	-4.937621653
Diacetylhydrazine	-0.038558485	12.46904147	-1.370430464	0.172038 18	0.510488937	-4.937766469
Thioacetic acid	-0.099366223	12.71821381	-1.370023942	0.172164851	0.510488937	-4.938269977
alpha-L-Rhamnopyranosyl-(1->3)-alpha-D-galactopyranosyl-(1->3)-L-fucose	0.068415264	13.16705054	1.368109456	0.172762344	0.510488937	-4.940639244

Dihydrodioscorine	-0.124943507	12.87289702	-1.367472433	0.172961499	0.510488937	-4.94142687
14,15-DiHETrE	-0.064008847	14.99351729	-1.36601934	0.173416432	0.510488937	-4.943222153
1,3-Benzenedisulfonamide	-0.073856855	14.39248229	-1.365426134	0.173602411	0.510488937	-4.943954515
2,3-Butanediol glucoside; Histidinyl-Proline	0.247252319	14.5967956	1.364327992	0.173947091	0.510488937	-4.94530944
N4-Acetylsulfamethoxazole	0.245698762	17.27027472	1.359364472	0.175511444	0.513710975	-4.951420264
Thien-2-ylacetate	-0.032237848	12.64996077	-1.358509344	0.175782 02	0.513710975	-4.952470848
Isoliensinine	0.055898675	12.96766305	1.356847936	0.176308609	0.514171969	-4.95451014

						7
Acetylglucosamine P	0.116212432	14.97240958	1.352725711	0.177620278	0.514422773	-4.959559414
n-Decanohydroxamic acid	-0.093730447	12.28519784	-1.351065726	0.178150538	0.514422773	-4.961588455
1-Arachidonoylglycerophosphoinositol	-0.066417365	15.45748134	-1.350948382	0.178188067	0.514422773	-4.961731794
Isorhamnetin 3-(6''''-malonylglucoside)	-0.038887818	14.63915097	-1.350417953	0.178357782	0.514422773	-4.96237958
(3beta,17alpha,23R)-17,23-Epoxy-3,29-dihydroxy-27-norlanost-8-ene-15,24-dione	0.128627486	13.73629961	1.350306001	0.178393618	0.514422773	-4.962516269
2-Hydroxymethylserine; Adenine	0.044669223	13.26484813	1.349307336	0.178713526	0.514422773	-4.963735112

5-Hydroxyomeprazole	-0.205029369	15.31035358	-1.348279593	0.179043198	0.514422773	-4.96498852
N'-Nitrosoanatabine	-0.077685374	14.11262454	-1.346899826	0.179486505	0.514422773	-4.966669773
3-hydroxynonanoyl carnitine	-0.04602949	13.40129839	-1.346187014	0.179715847	0.514422773	-4.967537677
5-Aminolevulinic acid	0.05185933	14.72477019	1.342560898	0.180885921	0.516017755	-4.971945776
4-Acetylimidazo[4,5-c]pyridine	-0.054156219	12.13090413	-1.34216689	0.181013402	0.516017755	-4.97242405
4beta-(2-Aminoethylthio)epicatechin 3-gallate	0.223569862	16.44413729	1.33952531	0.181869817	0.517401071	-4.975627026
Formyl-Asp; Erucin	-0.053146727	12.15304681	-1.33652310	0.182846 82	0.517695632	-4.97925974

			8			8
Zizyphine A	0.068555117	13.67413607	1.336394638	0.182888715	0.517695632	-4.97941502
Deoxyribose	0.06163216	13.36778132	1.335245759	0.183263692	0.517695632	-4.980802939
13-Deoxytedanolide	0.171047273	14.37333013	1.334648505	0.183458854	0.517695632	-4.981523996
Lactate	0.100580957	19.78878866	1.330262093	0.184896933	0.520699645	-4.986809959
Canthiumine	0.079637899	13.58876681	1.319211221	0.188557165	0.529095652	-5.000051385
4-hydroxy-3-(sulfooxy)benzoic acid	0.064837537	12.53633771	1.318970764	0.188637402	0.529095652	-5.0003383
C9:2	-0.072800478	12.8186517	-1.31421368	0.190229999	0.532491202	-5.00600394

			4			4
Tyrosol 4-sulfate	0.057293998	14.7656571	1.312167667	0.190918033	0.532957524	-5.008434553
18-Oxocortisol	0.076768466	13.88589821	1.311445762	0.191161235	0.532957524	-5.009291268
Plantamajoside	0.044313842	13.24201552	1.307685809	0.192431636	0.53536599	-5.013745874
Cilastatin; 2-{4-[(1E)-1,2-diphenylbut-1-en-1-yl]phenoxy}acetic acid	0.104337601	14.46993501	1.306076879	0.192977161	0.53536599	-5.015648217
C22:5	-0.099210641	16.72593349	-1.305487583	0.193177255	0.53536599	-5.016344405
2,4-Dihydroxyacetophenone 5-sulfate	0.081840061	18.21536196	1.304324504	0.193572625	0.535397299	-5.017717547

Hydroxyprolyl-Valine	0.061034489	13.58600076	1.298317546	0.195624125	0.538588918	-5.024790286
Octadecyl fumarate	-0.040042131	13.98844933	-1.297937698	0.195754389	0.538588918	-5.025236449
Itaconate	-0.054854643	14.88205948	-1.297555161	0.195885639	0.538588918	-5.025685642
Gabapentin	-0.088498179	12.38358203	-1.295400626	0.196626085	0.539128203	-5.028213169
(3Z,6Z)-3,6-Nonadien-1-ol	-0.031334513	12.15926384	-1.294417849	0.196964519	0.539128203	-5.029364714
Erythro-5-hydroxy-L-lysinium(1+)	0.180232357	13.25893315	1.293316123	0.197344426	0.539128203	-5.030654613
Mandelonitrile	0.061374423	13.50009927	1.28997509	0.198499	0.539128203	-

			9	81		5.034559681
Maleamic acid	0.043216196	12.75392412	1.28993016	0.198515385	0.539128203	-5.034612139
TG(18:0/24:0/22:5(4Z,7Z,10Z,13Z,16Z))	-0.024705285	13.73750869	-1.289591436	0.198632806	0.539128203	-5.03500748
DG(18:0/22:4(7Z,10Z,13Z,16Z)/0:0)	-0.033714113	13.89951635	-1.289141028	0.198789022	0.539128203	-5.035533015
Phosphoglycerate; Diethyldithiophosphate	-0.052579951	12.66102316	-1.285392309	0.200092711	0.539778413	-5.03990001
6,8a-Seco-6,8a-deoxy-5-oxoavermectin "2b" aglycone	-0.036545543	13.48996356	-1.284686271	0.200338952	0.539778413	-5.040721097
PE(16:0/22:6(4Z,7Z,10Z,13Z,16Z,19Z))	0.085028165	17.81786932	1.284521872	0.20039632	0.539778413	-5.04091222

Streptamine	0.16125666	13.25768458	1.283575878	0.200726667	0.539778413	-5.042011531
Isophorone	0.052326635	12.20440576	1.282608949	0.201064738	0.539778413	-5.043134346
p-Toluenesulfonic acid	-0.103148282	15.22271583	-1.280966827	0.201639838	0.539778413	-5.045039301
7-(4-Hydroxy-3-methoxyphenyl)-5-methoxy-1-phenyl-3-heptanone	0.139651932	13.81896173	1.280683239	0.201739278	0.539778413	-5.045368037
Cholestane-3,7,12,25-tetrol-3-glucuronide	0.070629037	14.20454797	1.277232947	0.202952004	0.541982937	-5.049361889
3-hydroxyundecanoyl carnitine	-0.058151876	13.08879967	-1.274924037	0.203766533	0.54311768	-5.052028631
3-Hydroxymyristate	0.064935978	13.12497975	1.27016624	0.205452	0.54641373	-

			6	521		5.05750882
Dehydropipernonaline	0.04987421	13.27393899	1.269225499	0.205787093	0.54641373	-5.05859002
PS(18:0/24:0)	-0.046927381	14.82085958	-1.26374022	0.207745851	0.549530106	-5.064878564
CMP-pseudaminic acid	0.045876976	13.10833076	1.263730912	0.207749186	0.549530106	-5.064889213
Thiophene	0.043031681	11.27321903	1.261728346	0.208467682	0.550386266	-5.067178346
2-Benzothiazolesulfonamide	0.095836815	12.21084765	1.256225099	0.210451516	0.554573561	-5.073450718
3-Ethylpyridine	0.064361367	12.38381666	1.254238485	0.211171 03	0.555419651	-5.075708356
Tauroursodeoxycholic acid	0.18904828	16.05268991	1.25207445	0.211956	0.556436586	-

			9	835		5.078163609
Histamine	0.048427025	13.32147068	1.250819356	0.212413564	0.556587421	-5.079585709
Galactose-beta-1,4-xylose	-0.060538613	15.00839457	-1.248855989	0.213129465	0.557415524	-5.081807497
1-Isothiocyanato-2-phenylethane	-0.109721088	12.02899322	-1.246964521	0.213820807	0.558057941	-5.083944674
2,2,7,7-Tetramethyl-1,6-dioxaspiro[4.4]nona-3,8-diene	0.133119748	15.05703753	1.245405036	0.214392031	0.558057941	-5.085704346
Dihydroxy-Val	0.038642036	12.86905008	1.244903212	0.214576081	0.558057941	-5.086270128
4-ethylphenylsulfate	0.07253805	13.31855663	1.241435845	0.215850908	0.55983582	-5.09017328

CE(18:1(9Z))	-0.02645294	13.02325115	-1.240307068	0.216267102	0.55983582	-5.091441612
Oenanthic ether	-0.028831144	14.28088583	-1.238442382	0.216955909	0.55983582	-5.093534351
Marimastat	0.064029629	13.3404951	1.238024677	0.217110426	0.55983582	-5.094002717
Cycloheximide	0.295501506	16.35073819	1.237313161	0.217373811	0.55983582	-5.094800171
C20:1	-0.078476463	17.4209855	-1.23576764	0.217946721	0.55983582	-5.096530807
(2R)-O-Phospho-3-sulfolactate	0.172230872	12.88723807	1.235433006	0.218070911	0.55983582	-5.096905242
Coumarate	0.066548112	14.15080155	1.2325296	0.219150	0.561521683	-

				576		5.100149784
Tyramine glucuronide	0.081512104	13.73154716	1.231503072	0.219533226	0.561521683	-5.101295127
PC(18:4(6Z,9Z,12Z,15Z)/P-16:0)	-0.055041404	16.2987933	-1.229399752	0.220318771	0.561756123	-5.103638959
Callystatin A	-0.031152806	13.21479133	-1.228177331	0.220776251	0.561756123	-5.104999351
Pilosine	0.057465678	14.50249283	1.228023612	0.220833828	0.561756123	-5.105170327
Musaroside	0.073499587	13.38188391	1.22430448	0.222230159	0.563816217	-5.109300525
Sulfamethoxazole	0.183641427	15.57022706	1.223713578	0.222452596	0.563816217	-5.10995560

						4
2-Hydroxy-6-pentadecylbenzoic acid	-0.062436327	13.54591941	-1.222356712	0.222963977	0.564086722	-5.111458657
LysoPC(10:0)	0.046893231	13.57824909	1.218112674	0.224568954	0.567117974	-5.116149344
Catechol	-0.051789063	14.30007183	-1.216285182	0.225262616	0.567612119	-5.118164217
Glyceric acid 1,3-biphosphate	0.033859152	12.2079611	1.215453017	0.225578991	0.567612119	-5.119080722
(2R,3R,4R)-2-Amino-4-hydroxy-3-methylpentanoic acid	-0.037922901	14.42355965	-1.210452234	0.227486938	0.569904437	-5.12457532
2-Hydroxy-desipramine glucuronide	-0.160307439	13.31654735	-1.208980408	0.228050684	0.569904437	-5.126188239

Orange B	-0.031331884	14.10802976	-1.208299322	0.228311896	0.569904437	-5.12693396
Asparagine	0.054670869	14.54507609	1.207747187	0.228523809	0.569904437	-5.12753819
Homodolicholide	-0.036693638	13.8005707	-1.206621318	0.228956363	0.569904437	-5.128769443
Anhydroamarouciaxanthin B	0.085817249	13.90864574	1.205866092	0.229246847	0.569904437	-5.129594726
Dillapional	0.074205512	13.30769121	1.205593431	0.229351786	0.569904437	-5.129892555
Valproic acid glucuronide	-0.195629822	13.69189567	-1.20399588	0.229967326	0.570360532	-5.131636236
Phenylbutazone	0.07349932	13.18628565	1.202994808	0.230353644	0.570360532	-5.13272771

						6
PS(15:0/20:4(5Z,8Z,11Z,14Z))	-0.035877565	14.72134394	-1.20109742	0.231087129	0.571010355	-5.134794007
3b-Hydroxy-5-cholenoic acid	-0.075147373	14.5657673	-1.200198196	0.23143533	0.571010355	-5.135772157
Glutarate	0.030078681	14.38034852	1.197074922	0.232647654	0.572987333	-5.139163959
13-Dihydrocarminomycin	0.047611146	12.97478787	1.193706812	0.233960092	0.574549652	-5.14281189
Dieporeticenin	-0.040812203	14.03481857	-1.193332398	0.234106314	0.574549652	-5.143216785
12(13)Ep-9-KODE	0.077887491	15.20671095	1.190898258	0.235058525	0.574714644	-5.145846038
Pyridoxal	0.123630637	15.4397493	1.19046370	0.235228	0.574714644	-

			8	806		5.146314863
4-Demethylsimmondsin 2"-(E)-ferulate	0.065562745	13.4505651	1.189823381	0.235479883	0.574714644	-5.147005389
(Iso)Leucine	-0.051603844	18.861692	-1.188917531	0.235835399	0.574714644	-5.147981629
Allixin	-0.058947045	15.41572856	-1.187900698	0.236234929	0.574714644	-5.149076604
Anisidine	0.109579951	12.68999571	1.186406435	0.236822922	0.575141383	-5.150684023
Methyl-[10]-shogaol	-0.09098913	13.79788977	-1.183647032	0.237911487	0.576780196	-5.153647149
PS(DiMe(11,3)/MonoMe(13,5))	-0.042897341	15.27648726	-1.18035392	0.239215244	0.578571159	-5.15717447

			9			8
Imidazolone	0.030144899	11.59563545	1.179685961	0.239480315	0.578571159	-5.157888775
Nootkatol	-0.027534177	13.42476709	-1.174658505	0.241482059	0.582397907	-5.163252139
Undecanal	-0.035011679	11.91701044	-1.172698171	0.242265797	0.583278965	-5.165337335
Dihydrozeatin riboside monophosphate; Tolmetin glucuronide	0.077349451	12.9505223	1.170301657	0.243226364	0.584581985	-5.167881829
1,2-Dihydroxynaphthalene-6-sulfonate	0.046538061	12.42403931	1.167421321	0.244384 42	0.586354356	-5.170933232
Lactosamine	0.05719171	13.04269445	1.165501662	0.245158392	0.586854298	-5.172962787

Ethyl cinnamate	0.089809799	14.07685737	1.164356483	0.245620932	0.586854298	-5.174171956
Stearoylethanolamide	-0.031635366	12.48212404	-1.163411889	0.246002919	0.586854298	-5.175168451
(Ac)2-L-Lys-D-Ala	0.054615707	12.66450165	1.161729914	0.246684135	0.586854298	-5.176940867
Iso-Valeraldehyde	0.035652186	12.20459617	1.161696411	0.246697718	0.586854298	-5.176976146
Ornithine	-0.045980734	17.04357736	-1.156609855	0.248766	0.590766275	-5.182320677
[2-hydroxy-6-methoxy-4-(prop-2-en-1-yl)phenyl]oxidanesulfonic acid	0.082805687	14.13061216	1.153480291	0.250044588	0.591272021	-5.185597472
DG(14:1(9Z)/22:2(13Z,16Z)/0:0)	-0.029691603	13.546677	-	0.250189	0.591272021	-

			1.153126451	44		5.185967407
TG(22:0/22:6(4Z,7Z,10Z,13Z,16Z,19Z)/o-18:0)	-0.025440462	13.72840386	-1.152293831	0.250530524	0.591272021	-5.18683746
Tetrahydroharmol	0.102709754	13.64967134	1.149665787	0.251609252	0.591272021	-5.189579592
Bimatoprost	0.056174457	12.80046091	1.149233793	0.251786884	0.591272021	-5.190029749
Endoxifen sulfate	0.032575266	12.85016591	1.148788664	0.251970008	0.591272021	-5.190493418
Tetradecanedioic acid	-0.067144211	14.32952258	-1.148682661	0.252013631	0.591272021	-5.19060381
Sulfoglycolithocholate(2-)	0.107608508	14.71194784	1.147811826	0.252372204	0.591272021	-5.19151032

						2
Withaperuvin D	0.065050714	13.4650963	1.145577968	0.253293649	0.591566815	-5.193832598
5-Phenylvaleric acid	0.171579063	13.94499537	1.144297959	0.253822703	0.591566815	-5.195161259
Homocitrulline	-0.059825953	13.6172069	-1.144170773	0.253875314	0.591566815	-5.1952932
C24:1	-0.051206699	15.42823678	-1.143093941	0.254321055	0.591566815	-5.196409705
Epithienamycin B	0.12787087	15.30737525	1.140639413	0.255339125	0.591566815	-5.198950788
4-Hydroxy-17beta-estradiol-2-S-glutathione	0.04339409	13.31457574	1.140383677	0.255445361	0.591566815	-5.199215233

13-Heptadecyn-1-ol	0.044412813	12.62589146	1.139310804	0.255891384	0.591566815	-5.200324002
4-Oxo-4-(3-pyridyl)-butanamide	0.048538664	12.98489451	1.139064978	0.255993657	0.591566815	-5.200577907
Cibulins	-0.098040093	13.18734435	-1.13808594	0.256401 26	0.591566815	-5.201588588
2-oxo-3-(3,4,5-trihydroxyphenyl)propanoic acid	-0.090528581	13.0846155	-1.13657163	0.257032605	0.591566815	-5.203150152
3-Aminobutyrate	-0.03922233	13.21444863	-1.136251862	0.257166062	0.591566815	-5.203479637
SM(d18:1/26:0)	-0.065159164	14.09090496	-1.132420916	0.258768689	0.593698303	-5.207419875
Berteroin; 7-Cyano-7-carbaguanine	-0.037430862	14.17689052	-	0.258982	0.593698303	-

			1.131911649	258		5.207942682
Cytosine	0.067780874	12.14430679	1.130986975	0.259370349	0.593698303	-5.208891348
UDP-2-acetamido-4-dehydro-2,6-dideoxyglucose	0.026747774	14.11042283	1.12875162	0.260310216	0.594872854	-5.211181543
PC(15:0/18:3(6Z,9Z,12Z))	0.064279776	17.66609267	1.127445566	0.260860 45	0.595154611	-5.212517568
Sorbitan palmitate	-0.025536126	12.81049638	-1.125236782	0.261792844	0.596305922	-5.214773568
L-Cladinose	-0.078507602	13.06283549	-1.123407177	0.262566929	0.597093474	-5.216638978
Osmanthuside A	0.044766633	13.01361666	1.119056769	0.264413928	0.600314357	-5.22106249

						2
Benzoate	0.042189462	15.36517647	1.116709688	0.265414137	0.601190698	-5.22344198
Diplosporin	0.174039657	16.02084823	1.116127925	0.265662046	0.601190698	-5.224031012
3,4-Dimethyl-5-pentyl-2-furanundecanoic acid	-0.055503426	14.82011925	-1.11167589	0.267568134	0.603502534	-5.228528654
Homodolichosterone	-0.032278757	13.79739956	-1.111120098	0.267806701	0.603502534	-5.229088894
5-Hydroxy-7-(4-hydroxy-3-methoxyphenyl)-1-phenyl-3-heptanone	0.042035112	14.29858206	1.110709983	0.267982832	0.603502534	-5.229502113
Retinal	-0.052746297	14.91346753	-1.106651676	0.269730075	0.606457608	-5.233583025
Uridine	0.051763552	17.15376035	1.10394636	0.270899	0.607038901	-

			8	159		5.23629521
Hydroxyprolyl-Isoleucine	0.082282363	14.74220658	1.103338702	0.27116224	0.607038901	-5.236903519
Tricin 7-glucoside	0.066345319	12.93144706	1.101435761	0.271987233	0.607038901	-5.238806336
MG(0:0/22:4(7Z,10Z,13Z,16Z)/0:0)	-0.040152495	13.85274319	-1.101113043	0.272127315	0.607038901	-5.239128711
C14:0	-0.068681281	18.80330892	-1.101024091	0.272165935	0.607038901	-5.239217553
Acetyl-N-formyl-5-methoxykynurenamine	0.165651921	18.45098602	1.099737101	0.272725125	0.607114139	-5.240502146
Pyrrolidine	-0.059227478	10.7802443	-1.098942644	0.273070707	0.607114139	-5.241294383

TG(20:0/22:5(4Z,7Z,10Z,13Z,16Z)/22:6(4Z,7Z,10Z,13Z,16Z,19Z))	-0.022426801	13.88332914	-1.094743746	0.274902202	0.610073683	-5.245472159
Naltriben	0.084609734	12.90285001	1.093886512	0.27527715	0.610073683	-5.24632314
Cholylglycine	0.124997095	15.6845018	1.092693262	0.275799654	0.610261457	-5.247506589
Succinic aldehyde	-0.029178526	15.65634497	-1.089046451	0.277400755	0.612831461	-5.251115543
Proacaciberin	0.111437891	13.76098358	1.088026137	0.277849854	0.612852367	-5.252123131
1,2-Diacylglycerol-LD-PI-pool	0.073962252	12.99111395	1.084382793	0.279457569	0.613534913	-5.255713425
Gamma-Tocopherol	-0.043652972	14.51565702	-1.084335982	0.279478265	0.613534913	-5.25575947

			7			3
Indolelactic acid	0.080494817	15.45963484	1.084332792	0.279479677	0.613534913	-5.255762615
7-Methoxypradimicinone II	0.126539364	13.9577013	1.075008389	0.283623494	0.621652753	-5.264896652
Leukotriene C5	-0.028225154	13.14798069	-1.073604887	0.284250828	0.622049694	-5.266264752
5-Guanidino-3-methyl-2-oxopentanoate	-0.075202759	12.83560042	-1.0720937	0.284927353	0.622552868	-5.267735848
Octadecanedioic acid	0.065193141	15.88757588	1.067221716	0.287115895	0.624397803	-5.272464641
Tryptanthrine	0.20666082	15.28107217	1.066326719	0.287519176	0.624397803	-5.273331019

Indoxyl sulfate	0.13247491	17.29685177	1.062462418	0.289264826	0.624397803	-5.27706351
Candesartan	-0.051389495	14.88361011	-1.061006285	0.289924478	0.624397803	-5.278466502
Nitrosopiperidine	0.067209996	12.73092771	1.058935668	0.290864256	0.624397803	-5.280458277
Acetone	0.036714793	14.00892651	1.058806206	0.290923083	0.624397803	-5.280582682
Apigenin 7-[rhamnosyl-(1->2)-galacturonide]	-0.033963521	14.6260352	-1.058450102	0.291084935	0.624397803	-5.280924797
11-O-Demethylpradimicinone II	0.079518261	13.57865153	1.058191542	0.291202492	0.624397803	-5.281173137
Quercetin 3-arabinoside 7-glucoside	-0.056175952	14.55396721	-1.057911291	0.291329946	0.624397803	-5.281442227

Thioglycolic acid	-0.046639423	11.46861992	-1.057573131	0.291483787	0.624397803	-5.281766836
8,8-Dimethoxy-2,6-dimethyl-2-octanol	-0.044158649	12.59292959	-1.056951881	0.291766559	0.624397803	-5.282362922
Oxobutanoic acid	0.045285215	15.61693017	1.056479216	0.291981825	0.624397803	-5.282816209
Carboxytolbutamide	0.1100371	13.67421525	1.053755867	0.293224212	0.624397803	-5.285424008
Ketovaline	-0.034864689	14.05921754	-1.053477878	0.293351231	0.624397803	-5.285689829
Kuwanon Y	-0.026026546	13.68688805	-1.05249728	0.293799583	0.624397803	-5.286626947
Geranylacetone	-0.042332126	12.1234231	-	0.293804	0.624397803	-

			1.052485749	857		5.286637962
Telaprevir	-0.033514946	13.43683333	-1.0523276	0.293877211	0.624397803	-5.286789017
Gemfibrozil	-0.04996896	12.38389873	-1.049874828	0.295000902	0.624397803	-5.289128883
Sultamicillin tosilate	-0.055955928	14.6182773	-1.049842174	0.295015881	0.624397803	-5.289159997
2-(2H-1,3-benzodioxol-5-yl)-2-oxoacetic acid	-0.062526908	12.63015347	-1.049754929	0.295055905	0.624397803	-5.289243124
Mitomycin	-0.044381977	14.2850691	-1.049488804	0.295178014	0.624397803	-5.289496645
Lauroyl peroxide	-0.035368038	14.05626162	-1.04712270	0.296265 18	0.624631738	-5.29174789

			7			3
6-(2-amino-2-carboxyethyl)-4-hydroxybenzothiazole	0.05966487	12.71863605	1.046740075	0.296441244	0.624631738	-5.29211148
Cyclobrassinone	0.134434573	16.54086155	1.045581405	0.296974822	0.624631738	-5.293211679
Gravacridonetriol glucoside	0.156950762	13.75273065	1.045351118	0.297080948	0.624631738	-5.293430201
2-amino-4-({1-[(carboxymethyl)-C-hydroxycarbonimidoyl]-2-({2,3,4,6-tetrahyd...	0.062581499	13.55197407	1.042010619	0.298623269	0.626184505	-5.296594692
D-Glyceric acid	-0.045017948	13.6665845	-1.041261088	0.298970068	0.626184505	-5.297303355
C26:1	-0.031012053	13.97529729	-1.040005636	0.299551558	0.626184505	-5.298489225
Propafenone	0.060217671	14.20905674	1.03887835	0.300074	0.626184505	-

			7	329		5.299552821
(Z)-4-Heptenal	-0.031281015	11.9804834	-1.038621909	0.300193341	0.626184505	-5.299794622
Cervonoyl ethanolamide	-0.041882333	13.58071585	-1.037929873	0.300514659	0.626184505	-5.300446839
Evoxanthidine	0.026878465	14.49084255	1.035975649	0.301423266	0.627140347	-5.302286297
Taurine	-0.097591257	16.64443367	-1.033144476	0.302742871	0.628947187	-5.304945125
Paracetamol sulfate	0.1880309	19.27682389	1.031618575	0.303455694	0.629489936	-5.306375154
1-Palmitoyl-2-(5-keto-6-octendioyl)-sn-glycero-3-phosphatidylcholine	-0.031209467	13.32043432	-1.03036940	0.304040 08	0.629765039	-5.30754428

			1			7
Eicosadienoic acid	-0.062891522	16.59713281	-1.029330978	0.304526445	0.629836594	-5.308515107
Tobramycin	0.041602082	13.53268873	1.026518321	0.305846419	0.630393176	-5.311139792
Heptyl 4-hydroxybenzoate	0.051702717	12.96682085	1.025401719	0.306371496	0.630393176	-5.312179801
15(S)-Hydroxyeicosatrienoic acid	-0.055859282	14.80487757	-1.025031267	0.306545832	0.630393176	-5.312524595
N-Acetyl-2,3-dihydro-1H-pyrrole	0.109768931	12.12711328	1.024906785	0.306604429	0.630393176	-5.312640428
DL-2-Aminooctanoic acid	-0.067121424	12.83619357	-1.022888957	0.307555 31	0.631332992	-5.314516108

Malate	0.068094996	14.66023168	1.022015953	0.307967313	0.631332992	-5.315326479
Pentose; Diisopropyl disulfide	0.052817792	15.74399432	1.020709469	0.308584579	0.631669461	-5.316537953
UDP-3-O-(3-hydroxytetradecanoyl)-D-glucosamine	0.056803848	14.13054371	1.019465125	0.309173251	0.631946499	-5.317690381
Koenoline	-0.041966955	14.7222223	-1.01768453	0.310016911	0.632484186	-5.319337029
Griseorhodin A	0.098081134	13.56874486	1.015748872	0.310935778	0.632484186	-5.321123847
1-(Methylsulfinyl)propyl 1-propenyl disulfide	-0.05172065	13.06803366	-1.015285651	0.311155939	0.632484186	-5.321550949
3-Nitrotyrosine	-0.065311797	14.49568502	-	0.311251	0.632484186	-

			1.015085322	185		5.321735599
Inosine	-0.085636991	14.42846913	-1.014022952	0.311756605	0.632589094	-5.322714215
Propyl propane thiosulfonate	-0.046707704	13.52556152	-1.011899568	0.312768434	0.633719764	-5.324667162
Mycotoxin T 2	0.034281119	12.78885083	1.00848147	0.314401788	0.6353228	-5.327802392
Sinapyl alcohol	-0.047677221	14.97570876	-1.008336654	0.314471113	0.6353228	-5.327934992
Theophylline	-0.033386451	18.89290167	-1.003680853	0.316705307	0.638109686	-5.332188009
4-Hydroxyphenytoin glucuronide	0.07448993	12.9568093	1.003554533	0.316766071	0.638109686	-5.33230312

						9
Glucocaffeic acid	0.097369172	13.06144875	0.99947481	0.318732671	0.639092375	-5.336013433
Bufencarb	0.05781585	13.69235886	0.999374647	0.318781055	0.639092375	-5.336104338
Tetraethylene glycol	0.052679778	12.11067735	0.998909859	0.319005635	0.639092375	-5.336526049
2-Hydroxyacetaminophen sulfate	0.141958021	16.96897408	0.998740013	0.319087728	0.639092375	-5.336680104
Hexadecanedioic acid	0.080523216	14.89972323	0.994883896	0.320955296	0.641910592	-5.340170756
(S)-2,3,4,5-Tetrahydropyridine-2-carboxylate	0.051125136	12.32923199	0.991407033	0.322645 34	0.644366195	-5.34330664
Sulfolithocholylglycine	0.089889009	14.25874684	0.98950421	0.323572	0.645068454	-

			3	74		5.345018249
Dehydrophytosphingosine	-0.03637563	13.34865286	-0.988787581	0.323922466	0.645068454	-5.345662024
Cerulenin	0.068415311	12.84899067	0.985747644	0.325408754	0.646240036	-5.348387771
Sulpiride	0.036889041	12.86431404	0.985688016	0.325437952	0.646240036	-5.348441153
6-Carboxyhexanoyl-CoA	-0.033937953	13.52101355	-0.982894039	0.326808	0.648037486	-5.350938886
9-Aminocamptothecin	0.068756604	13.15197466	0.98003028	0.328216177	0.648680814	-5.353491718
Gein	0.035863801	13.34779126	0.979979387	0.328241238	0.648680814	-5.35353701

						8
Capsianoside IV	0.033059407	13.44791825	0.977861776	0.329285114	0.648680814	-5.355419875
Cyclohexaneundecanoic acid	-0.062194356	16.52464055	-0.977465076	0.329480909	0.648680814	-5.35577215
trans-Piceid	0.07298414	13.50386112	0.97722448	0.329599693	0.648680814	-5.355985732
Ginsenoyne A linoleate	-0.041683513	14.48845195	-0.975708153	0.330348962	0.648680814	-5.357330616
Citronellyl formate	-0.051263267	13.92587974	-0.9745659	0.330914122	0.648680814	-5.358342355
13''-Carboxy-gamma-tocotrienol	-0.026073396	13.13185375	-0.973482956	0.331450518	0.648680814	-5.359300479

1-Hydroxyepiacorone	0.044652552	12.71615381	0.972454353	0.331960522	0.648680814	-5.360209547
PE(22:6(4Z,7Z,10Z,13Z,16Z,19Z)/P-18:1(11Z))	-0.042974136	16.02345542	-0.971415316	0.332476218	0.648680814	-5.361126871
Lasiodine A	-0.02468941	13.56139229	-0.971382075	0.332492725	0.648680814	-5.361156203
Tyramine	0.228909553	14.43612528	0.970931577	0.332716486	0.648680814	-5.361553614
p-Hydroxyphenylacetothiohydroximate	0.171525389	17.42236193	0.968572659	0.333889751	0.649068939	-5.363631577
6-Methylnicotinamide	0.038307038	13.38538243	0.968102099	0.334124117	0.649068939	-5.364045494
2,3,6-Trihydroxypyridine	0.039198182	12.45714405	0.96772420	0.334312	0.649068939	-

			1	409		5.364377758
(E)-4-(Trimethylammonio)but-2-enoate	-0.031512533	12.52108782	-0.965093974	0.335624859	0.650058826	-5.366686809
Desulfoglucotropeolin	0.056426263	13.77298548	0.964322172	0.336010611	0.650058826	-5.367363185
Tyrosine	0.072723307	17.80671021	0.963900987	0.336221244	0.650058826	-5.367732069
Rifamycin Z	-0.030929313	13.40938942	-0.961137414	0.337605416	0.650643277	-5.370148512
5''-xanthylate(2-)	0.025044917	13.51076871	0.960123364	0.338114 24	0.650643277	-5.371033466
Hexanoic acid	-0.025064076	13.19624582	-0.96007405	0.338138994	0.650643277	-5.37107647

			6			2
Maltitol	0.06917643	13.05088863	0.959436744	0.338459 05	0.650643277	-5.371632147
2-Oxoglutaramate	0.043614085	12.39980927	0.958644352	0.338857 259	0.650643277	-5.372322528
2-Amino-4-oxo-4-alpha-hydroxy-6-(erythro-1'',2'',3''-trihydroxypropyl)-5,6,...	0.092124126	13.4696045	0.957220918	0.339573 353	0.651121394	-5.373561293
(-)-Epigallocatechin 3-(3-methyl-gallate)	0.066158098	14.32109075	0.954615086	0.340886 812	0.652742055	-5.375824332
Cyromazine	-0.033474503	14.37235638	-0.951833148	0.342292 649	0.654534914	-5.378233569
Pyrrole-2-carboxylic acid	-0.039123379	13.01719424	-0.947645683	0.344415 792	0.65687083	-5.3818469

Benzosemiquinone	-0.056187551	13.48528639	-0.947565252	0.344456655	0.65687083	-5.381916149
Creatinine	0.043310061	16.97590614	0.942645788	0.346961919	0.660100742	-5.386140599
Menthol	0.034007436	11.98040697	0.942380305	0.347097449	0.660100742	-5.386367956
N-Acetyl-O-demethylpuromycin-5'-phosphate	0.062660864	13.38355561	0.940276294	0.348172754	0.661243623	-5.388167562
Demethoxyegonol	0.089821172	13.82055831	0.938947831	0.348852794	0.661633735	-5.389301772
CI Acid Orange 20	0.034221859	12.69721344	0.933111228	0.351850612	0.666033528	-5.394266105
Dimethylsulfonioacetate	-0.019953739	11.41102497	-	0.352834	0.666033528	-

			0.931203212	168		5.395882318
5-Sulfoxymethylfurfural	-0.066579925	14.3977708	-0.93109146	0.352891829	0.666033528	-5.395976878
DG(14:1(9Z)/16:1(9Z)/0:0)	-0.035605091	14.32219399	-0.930719542	0.353083771	0.666033528	-5.396291498
2-N,6-N-Bis(2,3-dihydroxybenzoyl)-L-lysine	0.067054702	13.55965935	0.927718392	0.354635061	0.66657122	-5.398825726
Fosfomycin	0.164707296	12.49202189	0.927464351	0.354766574	0.66657122	-5.399039871
Tricholomic acid	0.036198098	12.23682468	0.927393356	0.354803332	0.66657122	-5.399099707
Disinomenine	-0.025150802	13.59724322	-0.92503746	0.35602449	0.667965194	-5.40108269

			3			6
Nicotinamide	0.02960066	13.29998007	0.923692018	0.356723087	0.668376321	-5.402212934
2-Octaprenylphenol	-0.035369505	14.5419358	-0.922308582	0.357442316	0.668824951	-5.403373387
5-Oxoavermectin "2b" aglycone	0.033077297	13.45258356	0.921161419	0.358039407	0.669044147	-5.404334341
Italidipyrone	-0.024406805	13.88353219	-0.918388409	0.359485 35	0.669302115	-5.406652338
3b,12a-Dihydroxy-5a-cholanoic acid	-0.042092547	16.94586714	-0.917625049	0.359884 04	0.669302115	-5.407289226
(3beta,5alpha,9alpha,22E,24R)-3,5,9-Trihydroxy-23-methylergosta-7,22-dien-6...	-0.043302514	13.49368716	-0.917509037	0.359944656	0.669302115	-5.407385971

5-Amino-4-imidazole carboxylate	0.14288061	12.77605544	0.916319296	0.360566662	0.669302115	-5.408377427
Terpendole I	0.030734092	13.29906305	0.916297406	0.360578112	0.669302115	-5.408395656
Irbesartan	0.184769962	17.26678083	0.91318728	0.362207349	0.669683207	-5.410981355
Heptanone	-0.048196742	11.83621621	-0.912074083	0.362791623	0.669683207	-5.411904728
Quinic acid	-0.042828524	15.276558	-0.91183984	0.362914644	0.669683207	-5.412098884
Codonocarpine	0.039671428	13.13382794	0.911670342	0.363003678	0.669683207	-5.412239346
MG(18:0e/0:0/0:0)	-0.028431463	12.39773179	-	0.363185	0.669683207	-

			0.911324394	441		5.412525949
Dodecanoic acid (FA12:0)	-0.05158681	16.51231036	-0.906773392	0.365581898	0.672665382	-5.416286219
Euglobal Ia1	0.058402781	14.68123735	0.905969368	0.366006311	0.672665382	-5.416948604
Palmitoylglycine	0.050311898	13.67466965	0.904289091	0.366894262	0.672665382	-5.418331001
GMP	-0.030628908	13.20374444	-0.903630413	0.367242712	0.672665382	-5.418872213
Obtusilactone A	-0.04107845	12.84363453	-0.903009897	0.367571165	0.672665382	-5.419381712
Glycogen	0.035673237	13.77449914	0.902770359	0.367698007	0.672665382	-5.419578300

						1
Carumonam sodium	0.02388115	14.81980891	0.901709671	0.368259999	0.672810536	-5.420448188
Ciceritol	0.14261867	14.09964212	0.899881616	0.369229836	0.673603592	-5.421945025
OA-6129 C	0.117044254	13.86123908	0.899070802	0.369660508	0.673603592	-5.422607966
Fumonisin FP2	-0.028538083	13.58285506	-0.897390535	0.370553999	0.674350229	-5.423979908
2-Hydroxyethanesulfonate	0.069795413	14.10961571	0.892606073	0.373105554	0.676170537	-5.427872492
Medicagenic acid	0.053664177	13.94708851	0.890418125	0.374276031	0.676170537	-5.429645705

7(14)-Bisabolene-2,3,10,11-tetrol	0.035230454	13.10747566	0.890171125	0.374408311	0.676170537	-5.429845615
Integerressine	-0.048326489	13.43982246	-0.889355103	0.374845536	0.676170537	-5.43050567
Dopamine 4-sulfate	-0.130762857	15.13953876	-0.888183014	0.375474097	0.676170537	-5.431452687
Leucyl-phenylalanine	-0.066037245	13.77238814	-0.887360018	0.37591584	0.676170537	-5.432116905
Piperolein B	-0.057349923	14.80663184	-0.88703188	0.376092059	0.676170537	-5.432381566
20-Oxo-leukotriene E4	0.033128526	13.22925	0.886531687	0.376360774	0.676170537	-5.432784813
O-methoxycatechol-O-sulphate	-0.090987459	16.52980087	-	0.377446	0.676170537	-

			0.884512034	99		5.434410726
Piperacillin	0.219230388	16.52436764	0.883859104	0.377798567	0.676170537	-5.434935577
Glycine	-0.030503508	14.92819775	-0.88360031	0.377937974	0.676170537	-5.4351435
Adenophostin A	-0.021630007	13.88460399	-0.883565606	0.37795667	0.676170537	-5.435171378
2-Heptanethiol	-0.033092636	15.71194912	-0.883123672	0.378194811	0.676170537	-5.435526287
Sulfamethoxazole N4-hydroxylamine	0.042465154	12.761533	0.882844926	0.378345064	0.676170537	-5.435750052
4-Sulfobenzoate	0.029769721	12.97832795	0.880364477	0.379683737	0.677694148	-5.437738166

Tsugarioside B	-0.023117318	13.20461142	-0.87874573	0.380558939	0.678387673	-5.439032623
gamma-Glutamylisoleucine	-0.035905127	14.56804632	-0.876216459	0.381928926	0.679291334	-5.441050463
N-[2-(3,4-dimethoxyphenyl)ethyl]-3-[4-methoxy-3-(sulfooxy)phenyl]prop-2-eni...	-0.042413175	12.99272165	-0.875368395	0.382388963	0.679291334	-5.441725752
Pyrogallic acid	-0.024184473	14.33246851	-0.875112652	0.38252776	0.679291334	-5.441929266
Urate	-0.040644414	21.05973125	-0.873108463	0.383616547	0.679555339	-5.443522106
Benzofuran	0.048606763	12.9556845	0.873044366	0.3836514	0.679555339	-5.443572988
Immunomycin	0.042725721	14.73948011	0.87047760	0.385048	0.681164789	-

			3	675		5.445607496
Eicosapentaenoic acid	-0.067063184	15.890985	-0.869127281	0.385785 01	0.681602413	-5.446675425
(-)-trans-Carveol	-0.044125473	13.14842765	-0.862062267	0.389651 689	0.686956131	-5.452236113
Beauvericin	-0.035417649	13.40357073	-0.861735527	0.389831 087	0.686956131	-5.452492192
PG(18:0/20:3(5Z,8Z,11Z))	-0.028101308	15.90558454	-0.860893595	0.390293 584	0.686956131	-5.453151604
C19:2	-0.037001999	13.98692185	-0.858728315	0.391484 576	0.687408402	-5.45484454
(1R,2R)-3-[(1,2-Dihydro-2-hydroxy-1-naphthalenyl)thio]-2-oxopropanoic acid	0.036700492	14.35069479	0.858049262	0.391858 54	0.687408402	-5.45537459

C10:1	-0.040984538	14.19129566	-0.85653211 6	0.392694 843	0.687408402	-5.45655733
Desmethyl frovatriptan	-0.096705793	12.5756577	-0.85516057	0.393451 822	0.687408402	-5.45762477 5
15(R)-hydroperoxy-EPE; Cinnamyl benzoate	0.07244725	15.52004498	0.85501926	0.393529 865	0.687408402	-5.45773465 7
Melatonin glucuronide	0.073515514	13.23520353	0.85447346 5	0.393831 382	0.687408402	-5.45815889 6
Dextromethorphan	0.037107464	12.11832062	0.85416405	0.394002 377	0.687408402	-5.45839928
Alpha-Terpineol	-0.044768658	11.98038169	-0.85314028 3	0.394568 474	0.687528298	-5.45919402 9
Corchorifatty acid F	-0.036153096	14.61656984	-0.85225660	0.395057 508	0.687528298	-5.45987927

			1			
Neosaxitoxin	0.063309659	15.55277379	0.848817045	0.396964488	0.68988718	-5.462539721
3-(2-Furanyl)-2-phenyl-2-propenal	0.032231851	13.77379891	0.848028024	0.39740273	0.68988718	-5.463148514
Pyrocatechol sulfate	-0.046352761	16.10903542	-0.84670376	0.398138919	0.690305538	-5.464169025
Aspidospermatine	-0.058238561	17.19357058	-0.843884196	0.399709133	0.691950831	-5.466336579
Delphinidin 3-sambubioside	0.043529056	13.91057831	0.843218135	0.40008061	0.691950831	-5.466847569
L-Menthyl acetoacetate	0.030811687	13.8219545	0.838062507	0.402963078	0.696072529	-5.470789327

Phenylalanine	-0.042881162	18.53108164	-0.836505841	0.403835855	0.696348928	-5.471974766
2-Ethyl-5-methylthiophene	-0.023891001	12.49799832	-0.835995646	0.404122154	0.696348928	-5.472362817
Cuminaldehyde	0.095117289	13.94337895	0.83443002	0.405001478	0.696482362	-5.473552151
Hydroxytyrosol	-0.02815044	12.89613827	-0.834078886	0.405198849	0.696482362	-5.473818588
Hydroxypyridine	0.024741125	13.7818125	0.83316197	0.405714515	0.696509894	-5.474513809
SM(d18:1/22:1(13Z))	-0.028900489	14.87122283	-0.829279737	0.407902223	0.698317018	-5.477448972
Oxidized dithiothreitol	-0.044736667	12.85978048	-	0.408983	0.698317018	-

			0.827366038	227		5.478890816
Homoserine lactone	-0.034202182	14.03630359	-0.826380904	0.409540375	0.698317018	-5.47963176
(E)-S-1-Propenyl thiosulfate	-0.032001549	11.39444818	-0.826145084	0.409673812	0.698317018	-5.479808996
Capsianoside I	0.02489832	13.37126835	0.8245264	0.410590433	0.698317018	-5.4810242
4-Coumaroylputrescine	0.034692516	12.73843461	0.822878183	0.411525038	0.698317018	-5.482259144
Tolmetin	0.054728086	15.01865711	0.822821611	0.41155714	0.698317018	-5.482301487
N-Undecylbenzenesulfonic acid	-0.04937659	16.00062524	-0.821548864	0.412279741	0.698317018	-5.483253363

11-Hydroxy-9-tridecenoic acid	-0.02240475	13.25209511	-0.821478388	0.412319776	0.698317018	-5.483306028
Roxburghine B	0.02675436	13.46802227	0.821350207	0.412392597	0.698317018	-5.483401804
2-Methoxyacetaminophen sulfate	0.113616091	16.67209685	0.821033984	0.412572279	0.698317018	-5.483638021
Gamma-glutamyl-L-putrescine	-0.030573842	13.07046483	-0.820452905	0.412902578	0.698317018	-5.484071848
C21:1	-0.036538389	13.38844117	-0.819790248	0.413279441	0.698317018	-5.484566207
5''-O-Desmethyl omeprazole	0.198185603	16.7323049	0.813805577	0.416692291	0.7032313	-5.489012964
Humilixanthin	0.067676222	12.97879014	0.80829917	0.419847	0.70769881	-

			9	142		5.493075772
1,2-Dinitrobenzene	-0.024184039	13.93053019	-0.802305575	0.423297156	0.711859168	-5.49746692
1,11-Undecanedicarboxylic acid	0.03292227	13.7505018	0.80223718	0.423336622	0.711859168	-5.497516842
C15:1	-0.032161484	13.56106234	-0.796913935	0.426414904	0.715722484	-5.501389312
Mycinamicin VI	-0.084608641	13.28586429	-0.794433448	0.427853779	0.715722484	-5.503185031
(S)-9-Hydroxy-10-undecenoic acid	0.029451592	12.70859295	0.794419456	0.427861903	0.715722484	-5.503195144
Wybutoxine	0.0827316	13.70379591	0.793504717	0.428393247	0.715722484	-5.50385594

						3
Cholesterol sulfate	0.060549188	17.83041823	0.792971188	0.428703336	0.715722484	-5.504241011
Pyruvate	0.037237068	15.63317082	0.792271452	0.429110224	0.715722484	-5.504745646
Plastoquinone 3	-0.072034266	15.77998444	-0.791378323	0.429629896	0.715722484	-5.505389108
1,9-Nonanedithiol	-0.056652859	13.82803899	-0.788576832	0.431262347	0.715722484	-5.507402791
Gliclazide	-0.116175508	13.26350581	-0.78846018	0.431330 4	0.715722484	-5.507486486
Protobassic acid	-0.027050504	14.13744563	-0.788111838	0.431533653	0.715722484	-5.507736338

Lipoamide	-0.037467831	12.6493297	-0.787357246	0.431974 14	0.715722484	-5.5082772
Bumetanide	0.039862736	13.00465602	0.786830477	0.432281 793	0.715722484	-5.508654463
Ceftizoxime	0.024741913	12.90477108	0.786784412	0.432308 702	0.715722484	-5.508687442
4-Propylphenol	0.074229797	13.79836573	0.782509793	0.434810 051	0.718839071	-5.511739396
SR 49498	0.056012464	13.66840222	0.781806311	0.435222 508	0.718839071	-5.512240079
Acetaminophen	0.114027634	17.39541081	0.780233585	0.436145 431	0.719510924	-5.513357802
Guaifenesin	-0.06345102	14.20780909	-	0.438182	0.722016771	-

			0.77676936 3	344		5.51581190 8
Dibenzo[1,4]dioxin-2,3-dione	0.109714628	15.50295008	0.77270962 1	0.440576 412	0.725104508	- 5.51867407 9
MG(0:0/20:3(11Z,14Z,17Z)/0:0)	-0.024986809	13.48177093	- 0.77078503 4	0.441713 993	0.726119466	- 5.52002573
Oxalic acid	-0.026462585	11.76344303	- 0.76972828 8	0.442339 333	0.726157173	- 5.52076646 6
Milrinone	-0.043869438	14.01561175	- 0.76898621 8	0.442778 764	0.726157173	- 5.52128602 3
N-[(3a,5b,7a,12a)-3,12-dihydroxy-24-oxo-7-(sulfooxy)cholan-24-yl]-Glycine	0.022841368	13.12857816	0.76743699 8	0.443696 976	0.726437321	- 5.52236909 8
1-Propenyl 1-(propylsulfinyl)propyl disulfide	-0.058878233	14.96242969	- 0.76693992	0.443991 82	0.726437321	- 5.52271614

			3			8
Homocysteine thiolactone	0.033114042	11.6558979	0.764295313	0.445562389	0.727906345	-5.524558816
5-(2-carboxylatoethyl)-4-oxo-4,5-dihydro-1H-imidazol-5-ide	0.043048948	14.43964476	0.763663453	0.445938106	0.727906345	-5.524998137
Porson	-0.053950661	15.86810447	-0.762018926	0.446916829	0.727906345	-5.526139854
3-O-Sulfogalactosylceramide (d18:1/20:0)	-0.035834314	15.22482005	-0.760313443	0.447933128	0.727906345	-5.527321306
Succinate	-0.09579559	13.97668581	-0.760243361	0.447974918	0.727906345	-5.527369798
19-Norandrosterone	0.046754198	14.19095821	0.760163235	0.4480227	0.727906345	-5.527425235

Zileuton O-glucuronide	0.097270954	13.61550874	0.757440269	0.449648242	0.728868071	-5.529305711
Methylthioglycolic acid	-0.017901611	11.42380618	-0.757419992	0.44966036	0.728868071	-5.529319689
2-amino-4-({1-[(carboxymethyl)-C-hydroxycarbonimidoyl]-2-({5,11-dihydroxy-1...	0.031124434	13.31878858	0.75644257	0.450244686	0.728967586	-5.529993042
Nb-trans-p-Coumaroylserotonin glucoside	0.022123757	13.86976147	0.754529083	0.451389867	0.729973868	-5.531308753
(R)-3-Hydroxy-5-phenylpentanoic acid	0.085064684	14.21625029	0.752978884	0.452318844	0.730628584	-5.532372239
Mosinone A	-0.022417392	13.34946998	-0.752017304	0.452895629	0.730713549	-5.533030821
13S-hydroxyoctadecadienoic acid	-0.078490053	16.45362118	-	0.454074	0.731769155	-

			0.750053573	834		5.534373173
Allyl isothiocyanate	-0.018149599	11.86868995	-0.748427421	0.455052645	0.732432296	-5.535482125
LPA(P-16:0e/0:0)	-0.027782757	13.97045109	-0.747622381	0.45553716	0.732432296	-5.536030236
N-desmethylalmotriptan	-0.083265696	12.65280386	-0.745214127	0.456988316	0.733919024	-5.537666391
LysoPE(0:0/20:4(5Z,8Z,11Z,14Z))	-0.060286813	16.17890227	-0.742496256	0.458629179	0.73428583	-5.539506595
DNDS	0.028936421	13.56098627	0.742271157	0.458765227	0.73428583	-5.539658704
Propofol	0.152079511	17.88902834	0.742218664	0.458796957	0.73428583	-5.53969416

						9
Alanine	-0.02870144	16.96862768	-0.738674822	0.460941914	0.736219165	-5.542082687
1-Methyl-4-phenyl-1,2,3,6-tetrahydropyridine N-oxide	-0.037317909	13.50005419	-0.73736677	0.461735054	0.736219165	-5.54296143
L-3,4-Dihydroxybutan-2-one 4-P	0.056604982	12.36509731	0.736657813	0.462165252	0.736219165	-5.543437057
{[8-(2,4-dihydroxyphenyl)-7-(3,7-dimethylocta-2,6-dien-1-yl)-5-hydroxy-2-me...	-0.036637301	13.65558197	-0.736538676	0.462237566	0.736219165	-5.543516939
CE(5D5)	-0.019798898	13.37315802	-0.735563259	0.462829874	0.736219165	-5.544170481
Alpha-dihydroartemisinin	-0.039094572	15.34573264	-0.734997282	0.463173 75	0.736219165	-5.544549298
Rifamycin	-0.035103668	13.6824429	-	0.463873	0.736491298	-

			0.733846663	285		5.545318531
Lirioresinol A	-0.02844363	13.51105561	-0.73224597	0.464847434	0.736572096	-5.546386662
1-Phenyl-1-pentanone	0.125943864	15.44630946	0.731535408	0.465280235	0.736572096	-5.546860072
Daucic acid	-0.040393235	16.0200739	-0.730571548	0.465867679	0.736572096	-5.54750151
Dihydro-5-(2-octenyl)-2(3H)-furanone	-0.020126536	13.68874851	-0.730292668	0.466037725	0.736572096	-5.547686946
Pseudoecgonine	0.037423707	13.4222436	0.72871705	0.466999106	0.737255667	-5.548733293
Nafcillin	0.118810961	14.8737227	0.726127343	0.468581649	0.738917216	-5.55044820

						3
Dihydroxycitracridone I	0.035392727	12.72036797	0.715659627	0.475008734	0.748205847	-5.557318074
3''-N-Acetyl-4''-O-(9-octadecenoyl)fusarochromanone	-0.019625392	13.61876882	-0.712174996	0.47715903	0.750394609	-5.559582995
Marcanine A	-0.059170199	13.81552483	-0.711663839	0.477474906	0.750394609	-5.55991431
cis-4-Decenedioic acid	0.036594058	13.79075269	0.710774059	0.47802503	0.750413167	-5.56049047
Gentamicin C1a	0.039153724	13.55938531	0.707855017	0.479832236	0.752402854	-5.562375605
Indan-1-ol	0.076184674	13.45721885	0.70449184	0.481919057	0.754086702	-5.564537999
O-Isopentenylhalfordinol	0.052415924	13.26900627	0.70313213	0.482764	0.754086702	-

			1	153		5.565409332
Cholesterol	-0.055767521	12.95908799	-0.702709903	0.483026743	0.754086702	-5.565679564
1b-Hydroxycholic acid	-0.027463593	13.59809362	-0.70264054	0.483069889	0.754086702	-5.565723942
2-C-Methyl-D-erythritol 2,4-cyclodiphosphate	0.026025678	13.43378387	0.697503268	0.486271255	0.756137422	-5.568998619
Delta-Hexanolactone	-0.019719483	13.01713519	-0.696538009	0.486874057	0.756137422	-5.56961124
Polyoxyethylene (600) monoricinoleate	-0.033993365	13.66722873	-0.69612667	0.487131061	0.756137422	-5.569872049
Carbamate	-0.018476425	10.60256728	-0.69607942	0.487160587	0.756137422	-5.56990199

			1			8
Hydroxidodioxidosulfidosulfate	-0.034210332	13.12063146	-0.696046252	0.487181315	0.756137422	-5.56992302
8-Hydroxy-5,6-octadienoic acid	0.026659872	13.90247216	0.695315456	0.487638122	0.756137422	-5.570385948
Palmitic amide	-0.035118744	15.01969191	-0.692473599	0.489416728	0.756159907	-5.572181544
Nopalinic acid	-0.028519146	13.72078188	-0.691597382	0.489965826	0.756159907	-5.572733697
2,5-Dimethyl-1H-pyrrole	0.021537359	12.00744263	0.691241362	0.490189029	0.756159907	-5.572957846
C25:0	-0.025005998	13.61366491	-0.690941778	0.490376891	0.756159907	-5.573146374

14,19-Dihydroaspidospermatine	-0.048540979	18.65186757	-0.689489427	0.491288183	0.756159907	-5.574059185
Formamidopyrimidine nucleoside triphosphate	0.017184693	13.65487236	0.689417096	0.491333592	0.756159907	-5.574104595
4-Vinylphenol sulfate	-0.039513534	13.88023045	-0.688276149	0.492050168	0.756159907	-5.574820272
Avocadene	-0.027735371	14.0486794	-0.688273782	0.492051655	0.756159907	-5.574821755
Tiropramide	0.048676948	16.2230475	0.687505379	0.492534573	0.756159907	-5.575303082
Xanthurenic acid	-0.036370121	13.07138104	-0.686300377	0.493292395	0.756490207	-5.576056816
7-Ketodeoxycholic acid	-0.035234147	14.7046482	-	0.494355	0.757154221	-

			0.684610864	981		5.577111398
Pyridine	0.033321565	11.37564237	0.683781994	0.494878225	0.757154221	-5.577627827
Tricin 7-[rhamnosyl-(1->2)-galacturonide]	-0.048938449	14.65495763	-0.682267096	0.49583348	0.757154221	-5.578570079
Patellamide A	-0.017226279	13.89669186	-0.682164843	0.495897994	0.757154221	-5.578633605
Dimethylurea	0.023139731	12.14381396	0.675496572	0.500114882	0.761838178	-5.58275586
N-Heptanoylglycine	-0.051630101	13.09388899	-0.674871863	0.500510916	0.761838178	-5.583139985
Tartaric acid; 2-Methyl-2-(methyldithio)propanal	-0.058848506	16.26088282	-0.674723038	0.500605288	0.761838178	-5.583231442

3D,7D,11D-Phytanic acid	-0.028027615	16.29186264	-0.673229209	0.501553073	0.76222297	-5.58414834
Tetrahydropentoxyline	0.026082081	13.91409859	0.671792688	0.502465 4	0.76222297	-5.585028154
Hydrocinnamic acid	0.033244372	13.81915553	0.671740595	0.502498501	0.76222297	-5.585060024
Mycophenolic acid	0.032097598	12.90873353	0.669819962	0.503719707	0.76324486	-5.586233326
Calcipotriol	0.029887815	13.12312061	0.666295936	0.505964505	0.765523829	-5.588377434
Thymol	0.107306767	15.36648276	0.665735369	0.506322073	0.765523829	-5.588717459
Acaciabiuronic acid	0.034791127	14.33069043	0.66428588	0.507247	0.766091766	-

			6	274		5.589595358
Geranyl 3-methylbutanoate	0.02932798	13.24264471	0.662919402	0.508120315	0.766390833	-5.590421243
Dodecylaldehyde	0.023638592	11.90747148	0.662255369	0.50854485	0.766390833	-5.590821965
Penitrem D	0.049484737	13.51535098	0.660647196	0.509573774	0.767112139	-5.591790788
Quinolinate	0.024899443	15.12072159	0.659515591	0.510298443	0.767374358	-5.592471102
Androstenedione	-0.026248525	13.89784379	-0.658449556	0.510981618	0.767573681	-5.593110935
Epitheaflavic acid 3''-gallate	-0.023924406	14.78859099	-0.65359683	0.514097585	0.768918676	-5.596010501

			7			9
2-(2,3,5-trihydroxy-4-methoxyphenyl)propanoic acid	-0.017596792	13.9904779	-0.653231194	0.514332 77	0.768918676	-5.596228122
Varenicline	-0.022018062	12.10123108	-0.652803061	0.514608 22	0.768918676	-5.596482771
Tyramine-O-sulfate	-0.033365484	17.9207444	-0.652588811	0.514746 092	0.768918676	-5.596610142
3-Oxodecanoic acid	-0.019711416	13.86971753	-0.651763917	0.515277 101	0.768918676	-5.597100152
cis-4-Hydroxycyclohexylacetic acid	-0.030658357	13.84330644	-0.651204787	0.515637 193	0.768918676	-5.59743194
4,4',6,6'-Tetranitro-2,2'-azoxytoluene	0.017957129	12.87119261	0.651048085	0.515738 136	0.768918676	-5.597524876

{3-[2-(3,4-dihydroxy-5-methoxyphenyl)ethyl]phenyl}oxidanesulfonic acid	0.019360075	13.66811147	0.647056424	0.51831293	0.771501162	-5.599884724
FMLP	-0.016397922	13.01888202	-0.646647347	0.51857718	0.771501162	-5.600125751
Cucurbic acid	-0.019706351	13.25418413	-0.643498323	0.520613688	0.773705203	-5.601976073
Cyanuric acid	-0.023604538	11.39537915	-0.641957597	0.521611602	0.774362698	-5.602878105
Cyclo[(Z)-alpha,beta-didehydrophenylalanyl-L-leucyl]	0.027005341	14.42016085	0.640203412	0.522748977	0.775225611	-5.603902487
Dexmedetomidine	0.020213198	12.38690403	0.638968703	0.523550304	0.775588868	-5.60462184
3-Phosphonooxypyruvate	0.024812608	12.0337824	0.63628509	0.525294158	0.775857262	-5.60618057

C14:1	-0.046178405	16.20998589	-0.635782624	0.525621001	0.775857262	-5.606471693
Ubiquinone-2	0.0194091	13.21295397	0.635451471	0.525836465	0.775857262	-5.606663434
Salicyluric acid	0.070658959	14.61472214	0.635265086	0.525957757	0.775857262	-5.606771308
Niazimicin A	0.036904258	13.69881609	0.633204337	0.527299764	0.776561796	-5.607961918
Tazobactam	0.124461535	15.45218046	0.632821127	0.527549513	0.776561796	-5.608182895
6-{[3,7-dihydroxy-2-(1-hydroxy-3-methoxy-4-oxocyclohexa-2,5-dien-1-yl)-6-me...	-0.023477853	14.90851206	-0.631623831	0.528330217	0.776890635	-5.608872454
(±)-(Z)-2-(5-Tetradecenyl)cyclobutanone	0.032150249	12.98871008	0.62770287	0.530891	0.77983363	-

			1	044		5.611121552
Pseudooxynicotine	0.048937229	12.94075144	0.626438371	0.531718255	0.780226576	-5.611843906
Rofecoxib	-0.021870499	19.39400052	-0.623005318	0.533967404	0.782703009	-5.613797745
Epanolol	-0.043531388	16.13815753	-0.621913934	0.534683432	0.782929311	-5.61441664
Azomycin	0.092031554	12.92261238	0.620858409	0.535376398	0.783121404	-5.615014172
1-Isothiocyanatobutane	0.031480555	12.39043936	0.618844284	0.53669996	0.783599808	-5.616151562
De-O-methylsterigmatocystin	-0.017301311	14.12188082	-0.61787209	0.537339415	0.783599808	-5.61669924

			9			4
L-cis-Cyclo(aspartylphenylalanyl)	0.030222829	13.99936179	0.61648604	0.538251761	0.783599808	-5.6174786
PGP(18:0/18:2(9Z,12Z))	-0.02612954	15.57328035	-0.614569184	0.539514783	0.783599808	-5.618553541
2-Dimethylamino-5,6-dimethylpyrimidin-4-ol	-0.019440979	13.33442021	-0.614434995	0.539603256	0.783599808	-5.618628667
Ammeline	0.056475082	11.49811171	0.613648426	0.540122004	0.783599808	-5.619068702
Cyclodopa glucoside	0.057524081	14.4235972	0.613506298	0.540215765	0.783599808	-5.619148153
dUDP	-0.026896866	13.88666823	-0.613206536	0.540413544	0.783599808	-5.619315664
Pyrroline carboxylic acid	0.024152008	13.22433542	0.61223343	0.541055	0.783599808	-

			4	833		5.619858885
Thymol Sulfate	0.04430279	14.05889646	0.611826278	0.541324688	0.783599808	-5.620085919
Aspidin	-0.038385127	13.23748342	-0.608450086	0.543556652	0.785155583	-5.621962719
Ethyl tiglate	0.027952336	13.44951735	0.607661983	0.544078321	0.785155583	-5.622399331
Istamycin AO	0.024343638	14.12805846	0.606840842	0.544622126	0.785155583	-5.622853646
1-Methylpyrrolo[1,2-a]pyrazine	0.014210952	13.02477382	0.606778835	0.544663202	0.785155583	-5.622887928
Photinus luciferin	0.023352722	13.48959896	0.605945108	0.545215641	0.785155583	-5.62334853

						3
Octanoic acid	-0.094932218	17.04401016	-0.604785152	0.54598471	0.785451688	-5.623988323
6-methoxy-3-methyl-2-all-trans-decaprenyl-1,4-benzoquinol	-0.027492796	15.17150494	-0.603487652	0.546845615	0.785879162	-5.624702523
3,5,7-Trihydroxy-4''-methoxy-8-prenylflavone 3-[rhamnosyl-(1->6)-galactosid...	-0.025846607	13.60556014	-0.599111551	0.549754184	0.789245451	-5.627100062
5-Amino-4-hydroxy-3-(phenylazo)-2,7-naphthalenedisulfonic acid	0.015702636	13.71567908	0.596339387	0.551600665	0.789942805	-5.628609856
Methylsyringin	0.096114388	15.11351897	0.596245409	0.551663314	0.789942805	-5.628660916
Aminoadipate	0.027683869	14.04626173	0.595830507	0.551939951	0.789942805	-5.628886247

Methyl beta-naphthyl ketone	0.015645483	13.92670514	0.594866564	0.552582928	0.790051899	-5.629409157
Aspartylglycosamine	-0.020826481	13.61177633	-0.586737675	0.558019794	0.797007779	-5.633785276
C.I. Food Brown 3	-0.012627176	13.90868967	-0.584183895	0.559733239	0.798163054	-5.635147698
Benzene	-0.031160168	11.78912422	-0.583825671	0.559973792	0.798163054	-5.635338334
Isopulegone caffeate	0.019950902	13.66112739	0.58086676	0.561962683	0.79950304	-5.636908523
Quinalphos	-0.050609799	14.51450617	-0.580666959	0.562097107	0.79950304	-5.637014263
Allolithocholic acid	-0.055142362	15.281853	-	0.562835	0.79950304	-

			0.57956971 8	599		5.63759431 1
Cefepime hydrochloride	0.094699381	13.78804843	0.57901663 8	0.563208 024	0.79950304	- 5.63788627 7
2,4-Dimethylthiazole	0.048803487	11.98562068	0.57615058 9	0.565139 841	0.801429236	- 5.63939479 2
UDP-2-acetamido-2-deoxy-alpha-D-ribo-hex-3-uluronate	-0.015315435	14.02091057	- 0.57404216 9	0.566563 036	0.802630967	- 5.64049977 6
(4-{[2-methoxy-4-(prop-2-en-1-yl)phenoxy]carbonyl}phenyl)oxidanesulfonic acid	0.014730482	12.91239441	0.57295954	0.567294 488	0.802851285	- 5.64106559 2
Clerodendrin A	-0.027318806	13.59795747	- 0.57096578	0.568642 715	0.803943149	- 5.64210481
PE(14:0/14:1(9Z))	-0.012695542	13.10593253	- 0.56721266	0.571184 839	0.805265142	- 5.64405127 4

Vanillactic acid	0.040822889	14.34071061	0.56685423	0.571427901	0.805265142	-5.644236496
Aminobutanoic acid (ABA)	-0.025280934	15.05018644	-0.56639528	0.571739202	0.805265142	-5.644473492
Ethylene glycol	0.026245821	11.70204815	0.566175295	0.571888444	0.805265142	-5.644587022
1-(11Z,14Z-eicosadienoyl)-glycero-3-phosphate	-0.023017131	13.79178785	-0.56271577	0.574237901	0.806501957	-5.646366629
Pyridoxaminium(1+)	-0.018317718	13.25289368	-0.562529173	0.574364755	0.806501957	-5.646462307
Phenyl acetate	0.014196586	15.70146442	0.56163747	0.574971144	0.806501957	-5.646919093
14-hydroxyclarithromycin	0.028577395	14.583834	0.56105916	0.575364	0.806501957	-

			5	574		5.647214951
Gibberellin A110	0.027265181	13.35820438	0.560625666	0.575659575	0.806501957	-5.647436527
Vestitone 7-glucoside	0.031281573	13.45342962	0.558208288	0.577305943	0.80799647	-5.648669004
16-Dehydroprogesterone	-0.025194382	14.60149363	-0.555969131	0.578832923	0.809321057	-5.649805881
2-Methylglutaric acid	0.021309495	14.8031164	0.551843166	0.581651594	0.812001935	-5.651888809
C21:5	-0.025383913	13.79746674	-0.551283498	0.582034431	0.812001935	-5.652170158
Bisisodiospyrin; Brilliant blue	-0.053609191	14.68661225	-0.55060633	0.582497801	0.812001935	-5.65251019

			1			3
Bisnorcholic acid	-0.021956896	13.90795984	-0.547806356	0.584415599	0.81361885	-5.653911761
Ammelide	0.034012333	12.52608131	0.547032418	0.584946217	0.81361885	-5.65429791
Suberic acid	-0.027906712	14.05289069	-0.545213625	0.586194082	0.81361885	-5.655203238
2,5-Dihydro-4,5-dimethyl-2-(2-methylpropyl)thiazole	-0.045837158	11.80333478	-0.54425456	0.586852593	0.81361885	-5.655679415
LysoPE(0:0/18:1(11Z))	-0.03494259	16.31134697	-0.544059619	0.586986485	0.81361885	-5.655776101
p-Hydroxyphenylacetic acid	-0.043932734	16.55667319	-0.543673409	0.587251789	0.81361885	-5.655967551
Rishitin	0.019240801	13.19351429	0.54221910	0.588251	0.81361885	-

			9	312		5.65668725
Hydroxyphenylacetylglycine	-0.069173446	12.97111477	-0.542109068	0.588326973	0.81361885	-5.656741628
3,4,5-trihydroxy-6-{[1-(4-methoxyphenyl)pentan-3-yl]oxy}oxane-2-carboxylic ...	0.105303906	19.45853239	0.53615831	0.592425324	0.818090231	-5.659665904
Euphornin	0.041394974	15.20771681	0.53514418	0.59312508	0.818090231	-5.660161051
2''-(E)-Feruloyl-3-(arabinosylxylose); 12-Hydroxynevirapine glucuronide	-0.019382642	14.00018563	-0.533050547	0.594570904	0.818090231	-5.661180306
Isopropylmaleate	-0.020840632	13.53211205	-0.532905894	0.594670859	0.818090231	-5.661250581
Butyl (S)-3-hydroxybutyrate glucoside	0.042539854	13.14134578	0.532605529	0.594878434	0.818090231	-5.661396443

(alpha-keto-dimethyl-delta-N,N-Dimethylguanidynol) valeric acid	0.022272086	12.40601736	0.532311858	0.595081416	0.818090231	-5.661538975
(R)-2-Methylimino-1-phenylpropan-1-ol	0.100861761	12.90908715	0.531070545	0.595939748	0.818244878	-5.662140577
Amoxicillin	0.021910415	12.7632213	0.53045172	0.59636786	0.818244878	-5.662439966
Delavirdine	0.021669596	13.13170446	0.527940137	0.598106854	0.818933962	-5.663651507
Isoelemicin	0.088345637	15.54031025	0.527661172	0.598300149	0.818933962	-5.66378572
3-Oxooctadecanoic acid	0.027522251	17.05809417	0.526843167	0.598867111	0.818933962	-5.664178865
[3-(7-hydroxy-4-oxo-4H-chromen-2-yl)phenyl]oxidanesulfonic acid	0.025400751	14.01154651	0.525878715	0.599535891	0.818933962	-5.66464161

						4
Propenoic acid C3:1	0.019948115	15.34975377	0.52548725	0.599807442	0.818933962	-5.6648292
11-Dehydrocorticosterone	0.031310164	12.99300383	0.521223083	0.602769028	0.821576921	-5.666863517
Mulberrofuran T	-0.011502779	13.75674631	-0.521003168	0.602921944	0.821576921	-5.666967984
Vitisidin A	0.060944353	15.04071278	0.51813083	0.604920824	0.823495731	-5.668328407
3-(3,4,5-Trimethoxyphenyl)propanoic acid	0.050125422	17.33967612	0.514387858	0.607530065	0.826240889	-5.670089935
Campesterol 6"-(9Z-octadecenoyl)-glucoside	-0.017264961	15.8608463	-0.511747512	0.609373698	0.827940483	-5.67132488
2,3,5-Trimethylfuran	-0.012132038	12.29496992	-	0.610681	0.828352611	-

			0.509876368	748		5.672196217
2-(3,4-dihydroxyphenyl)-8-[1-(2,4-dihydroxyphenyl)-3-(3,4-dihydroxyphenyl)-...	-0.012859757	13.6441718	-0.509613681	0.610865483	0.828352611	-5.672318287
2-Octenedioic acid	-0.021443189	14.07662661	-0.504112683	0.614718792	0.831969998	-5.674860191
Myxalamid A	-0.035870862	13.1250198	-0.503754343	0.614970174	0.831969998	-5.675024818
1-(beta-D-Ribofuranosyl)-1,4-dihydronicotinamide	0.042657546	15.02907556	0.502977262	0.615515466	0.831969998	-5.675381421
3,4,5-trihydroxy-6-{[2-oxo-6-(3-oxobutyl)-2H-chromen-7-yl]oxy}oxane-2-carbo...	0.028379514	12.92001102	0.501808407	0.616336075	0.831969998	-5.675916775
Avocadienofuran	-0.018566659	12.7824543	-0.50082714	0.617025359	0.831969998	-5.67636525

			1			2
MK826	0.029035573	13.23805999	0.500523326	0.617238841	0.831969998	-5.67650393
8-8"-Dehydrodiferulic acid	0.031535325	12.68461338	0.499851731	0.617710866	0.831969998	-5.676810184
(R)-Skyrin 2-xyloside	-0.012744037	13.66691092	-0.498897377	0.618381 9	0.832069854	-5.677244674
15beta-Hydroxydesogestrel	-0.026081439	13.61402112	-0.495478996	0.620788091	0.834502024	-5.67879417
Heptabarbital	-0.045286836	12.09633291	-0.491488634	0.623602075	0.836344468	-5.680589493
Hericenone C	-0.011398334	13.14737898	-0.49134592	0.623702819	0.836344468	-5.680653434
Isochesnatin	-0.013379332	13.86794078	-	0.623958	0.836344468	-

			0.490983669	57		5.680815652
Tromethamine	0.011445754	11.72444956	0.48739537	0.626494387	0.838595324	-5.682416069
N-Undecanoylglycine	0.018967843	13.65959037	0.486905413	0.626840981	0.838595324	-5.682633686
Avenanthramide 1c	0.025308037	13.17697734	0.486043463	0.627450923	0.838606506	-5.683015995
L-2-Amino-4-(hydroxymethylphosphinyl)butanoate	-0.025164951	12.9987595	-0.482965513	0.629631066	0.840714277	-5.684375676
Cys-Gly	-0.013891925	13.89645404	-0.480266327	0.631545606	0.842290678	-5.685560947
CI Acid Orange 3	0.028622974	13.26675775	0.479597882	0.632020121	0.842290678	-5.68585345

						2
Monomethyl sulfate	0.017002992	12.54433951	0.476416856	0.634280356	0.843136911	-5.687239868
3,5-Didecanoylpyridine	0.013483905	12.30463851	0.476133892	0.63448158	0.843136911	-5.68736275
Nornicotine	0.023768551	12.7248342	0.475538395	0.634905142	0.843136911	-5.687621114
6-{[6-(3,4-dihydroxy-6-methyl-5-oxooxan-2-yl)-5-hydroxy-2-(3-methoxyphenyl)...	0.012460826	13.56387387	0.474253974	0.635819129	0.843136911	-5.688177281
Tryptophyl-Valine	-0.04355104	12.88636589	-0.473811599	0.63613405	0.843136911	-5.688368486
6''''-O-Malonyldaidzin	-0.031582441	14.02661876	-0.472818841	0.636841023	0.843136911	-5.688796932
C24:0	-0.019871967	14.8903605	-	0.636888	0.843136911	-

			0.472751586	93		5.688825925
Dehydroepiandrosterone	-0.015724696	13.48657546	-0.469976732	0.638866815	0.844526835	-5.690018548
2-Dodecylbenzenesulfonic acid	0.045177771	15.48977369	0.469579024	0.639150 51	0.844526835	-5.690188907
Linoleoyl ethanolamide	-0.016892361	12.38515909	-0.467756353	0.640451344	0.845444293	-5.690967814
PE(18:1(11Z)/22:6(4Z,7Z,10Z,13Z,16Z,19Z))	0.025023184	15.91719785	0.465051457	0.642383871	0.846495134	-5.692118163
1-Cyano-2-hydroxy-3-butene	-0.01121476	12.16392313	-0.464269716	0.642942844	0.846495134	-5.692449385
SN38 glucuronide carboxylate form	0.033111646	13.23722874	0.464093162	0.643069115	0.846495134	-5.69252411

						4
Threonine	-0.021523329	15.18877767	-0.461666544	0.644805677	0.847980296	-5.693548336
Valsartan	-0.098347986	13.73929651	-0.458056655	0.647392636	0.85027063	-5.695062078
Hypogeic acid	-0.03527785	20.11124407	-0.457278964	0.647950518	0.85027063	-5.695386637
2-cyano-3-(3,4-dihydroxy-5-nitrophenyl)-N,N-diethylpropanamide	-0.033784083	12.97737653	-0.456506733	0.648504679	0.85027063	-5.695708372
5,6,7,8-Tetrahydroquinoxaline	0.028200469	11.95502035	0.455786089	0.649021998	0.85027063	-5.696008125
4-Oxocyclohexanecarboxylate	0.012542808	12.18332866	0.453978047	0.650320663	0.85027063	-5.696758103

MG(0:0/22:5(4Z,7Z,10Z,13Z,16Z)/0:0)	0.01374941	13.16650381	0.453490466	0.650671062	0.85027063	-5.696959843
Koeniginequinone B	-0.043429111	14.90444525	-0.452151646	0.651633602	0.85027063	-5.697512677
2-[(Methylthio)methyl]-2-butenal	-0.034178686	14.30445553	-0.451957567	0.651773184	0.85027063	-5.697592682
Pyridoxine	0.009244848	13.51042031	0.450120599	0.653094933	0.85027063	-5.698348235
Kamahine C	-0.022348074	15.52735664	-0.449882749	0.653266153	0.85027063	-5.698445839
(R)-3,4-Dihydro-2-methyl-2-(4,8,12-trimethyl-3,7,11-tridecatrienyl)-2H-1-be...	-0.018721212	13.10057707	-0.448622779	0.654173469	0.85027063	-5.698962023
1-Octanal	-0.017473038	11.85397699	-	0.654551	0.85027063	-

			0.44809806 6	472		5.69917656 1
Oxoglutarate; Di-2-propenyl disulfide, 9CI	0.018901195	12.99469798	0.44735339 5	0.655088 085	0.85027063	-5.69948060 2
Viguiestenin	0.026938066	14.34372885	0.44612284 6	0.655975 217	0.85027063	-5.69998191 6
Cholate	-0.030942521	15.39775598	-0.44567214 6	0.656300 26	0.85027063	-5.70016518 2
(Z)-4-Dodecenal	0.017425329	12.14666445	0.44521212 1	0.656632 095	0.85027063	-5.70035204 9
Methamidophos	0.016970548	12.10843606	0.44481805 6	0.656916 405	0.85027063	-5.70051197
Diisopropyl sulfide	0.018586785	14.48129025	0.44120006 6	0.659529 047	0.851913646	-5.70197362 8

Ne,Ne dimethyllysine	-0.014495466	13.58074974	-0.440696115	0.659893295	0.851913646	-5.702176277
Myricanol 5-glucoside	-0.011226099	13.75200021	-0.439908831	0.660462496	0.851913646	-5.702492399
Amino-dideoxy-hexose	-0.036540225	12.6614839	-0.43920161	0.660973098	0.851913646	-5.702775891
Cycloartanyl ferulate	0.013519521	13.60878295	0.438831887	0.661241439	0.851913646	-5.702923915
3''-Hydroxy-e,e-caroten-3-one	-0.011708721	13.56397914	-0.43703081	0.662544966	0.852425891	-5.703643222
psi-Pelletierine	0.016031305	11.62988852	0.435784637	0.663447485	0.852425891	-5.704139185
Dicrotophos	-0.024590928	12.2129261	-	0.663473	0.852425891	-

			0.435748695	523		5.704153469
Tiocarbazil	-0.021626631	13.4661354	-0.432065456	0.666143 96	0.855068767	-5.705610976
Threonate; 1-Pentanesulfenothioic acid; Hypoxanthine	-0.02761002	17.02094763	-0.429832933	0.667764 673	0.855425162	-5.706488405
Pratenol B	0.03466495	13.4154237	0.428834389	0.668490 078	0.855425162	-5.706879385
Androsterone glucuronide	0.024274285	14.44180015	0.427893556	0.669173 843	0.855425162	-5.707246939
Resveratrol 4"-(6-galloylglucoside)	-0.01093504	13.86401466	-0.425841096	0.670666 46	0.855425162	-5.708045973
N-Ethylmaleimide	-0.0181684	14.04543621	-0.42568525	0.670779 845	0.855425162	-5.70810648

			7			5
(3Z,6Z,9Z)-3,6,9-Dodecatrien-1-ol	0.019304	13.1147492	0.42554306 2	0.670883 309	0.855425162	-5.70816168
Maleimide	-0.013205874	12.88464554	-0.42470540 2	0.671492 938	0.855425162	-5.70848645 7
PC(15:0/18:2(9Z,12Z))	0.020539963	20.36868666	0.42469982 2	0.671496 999	0.855425162	-5.70848861 9
Lipoyl-AMP	0.012127701	13.26590671	0.42341729 3	0.672430 816	0.855425162	-5.70898463 5
Fesoterodine	-0.014042384	12.98677475	-0.42324254 6	0.672558 09	0.855425162	-5.70905210 3
Nicardipine	0.015574623	13.56759162	0.42145851 9	0.673857 994	0.856297214	-5.7097393
Entacapone	0.051422062	13.60708711	0.42058212 6	0.674496 925	0.856328518	-5.71007582

Eremopetasinorol	-0.031317128	13.02232723	-0.418103484	0.676305245	0.857085542	-5.711023792
5-Hydroxy-2-furoic acid	0.015715641	12.17005135	0.41709572	0.67704101	0.857085542	-5.711407618
Deoxycholic acid glycine conjugate	0.053906757	17.53498314	0.41671444	0.677319461	0.857085542	-5.711552595
5-Hydroxytryptophol glucuronide	0.037638973	13.11209336	0.414867967	0.678668584	0.857085542	-5.71225282
17-Beta-Estradiol-3,17-beta-sulfate	-0.019507657	13.00777494	-0.41472537	0.678772815	0.857085542	-5.712306766
5''-Hydroxypiroxicam	-0.025303598	13.81508687	-0.414712481	0.678782237	0.857085542	-5.712311642
1-(1-Methoxy-1-methylethyl)-4-methylbenzene	0.073805353	15.97510025	0.411855846	0.680871611	0.858671296	-5.71338842

						3
Toluene	-0.012662633	12.05482429	-0.411311472	0.681270053	0.858671296	-5.713592777
3-(4-Methyl-3-pentenyl)thiophene	-0.01847077	15.60697624	-0.408644838	0.683223124	0.860355045	-5.714589913
Glutamylmethionine	0.028172757	13.81376104	0.405946221	0.685201798	0.862067966	-5.715592417
(R)-Bitalin A	0.026504718	15.78762595	0.403561593	0.686952061	0.863026933	-5.71647276
Dynemicin A	-0.02900863	13.69556105	-0.402398873	0.687806086	0.863026933	-5.716900128
Dihydro-4,4-dimethyl-2,3-furandione	0.01413055	12.92721563	0.401935515	0.688146537	0.863026933	-5.717070096
(1xi,3xi)-1,2,3,4-Tetrahydro-1-methyl-beta-	0.030437053	14.47754384	0.40153560	0.688440	0.863026933	-

carboline-3-carboxylic acid			3	423		5.717216634
Peonidin-3-glucoside	-0.024433426	12.94449435	-0.399741685	0.689759311	0.863321306	-5.71787218
ADP-ribose	0.012858676	13.76262485	0.399531543	0.68991387	0.863321306	-5.71794878
Teleocidin B-1	0.035155483	14.09619814	0.398398161	0.690747692	0.863589492	-5.71836122
Echimidine	-0.026032908	12.86059095	-0.393686056	0.694218405	0.865715412	-5.720063427
5-Sulfosalicylic acid	-0.041369552	13.9050584	-0.392885473	0.69480872	0.865715412	-5.720350621
6-Hydroxy-5-methoxyindole glucuronide	-0.016907339	13.50499266	-0.391866373	0.695560432	0.865715412	-5.72071536
Rubraflavone A	-0.012158363	17.50327075	-	0.697287	0.865715412	-

			0.389525903	956		5.72154944
N-Acetylanonaine	-0.02753338	12.73922276	-0.389514101	0.697296671	0.865715412	-5.721553633
Cytochalasin Ppho	0.021326061	13.66000224	0.388630295	0.697949431	0.865715412	-5.721867291
Oryzarol	0.010598057	12.82799647	0.38854831	0.698009995	0.865715412	-5.721896351
Hericenone B	0.015606359	13.58622654	0.388530332	0.698023276	0.865715412	-5.721902722
octanoate radical	0.01791546	11.96828159	0.388511226	0.698037391	0.865715412	-5.721909493
3,4,5-trihydroxy-6-({2-[6-(2-methylbut-3-en-2-yl)-7-oxo-2H,3H,7H-furo[3,2-g...	-0.013191009	13.92644506	-0.38634414	0.69963898	0.866930433	-5.72267533

			3			3
Hesperidin	0.011015108	13.52617104	0.383380401	0.701831521	0.868874902	-5.723715784
Acetatic acid	-0.015620307	15.54303529	-0.377329526	0.706315 64	0.872630449	-5.725815164
Methyl isothiocyanate	0.029412387	11.10361794	0.377040133	0.706530 359	0.872630449	-5.725914735
Hexonic acid; 1,3-Dimethyluric acid	0.038296704	17.40375095	0.376753539	0.706743 025	0.872630449	-5.726013267
2'',7-Dihydroxy-4''-methoxy-8-prenylflavan 2'',7-diglucoside	0.010465101	13.51786484	0.375653276	0.707559 684	0.872865664	-5.726390848
DG(8:0/13:0/0:0)	-0.011176948	13.38658205	-0.374392885	0.708495 614	0.873081875	-5.726822026

Sakacin A	0.012221518	13.68397869	0.373730611	0.708987577	0.873081875	-5.727048009
Sulfolithocholic acid	-0.030030529	14.10076827	-0.370975587	0.711035427	0.874830878	-5.727983798
3''-O-Methyl-(-)-epicatechin-5-O-sulphate	-0.017129608	13.38489274	-0.364569277	0.715805439	0.879022807	-5.730133076
Carinol	0.011951553	14.13301752	0.364145268	0.716121545	0.879022807	-5.73027401
Ricinine	-0.011308778	13.6127189	-0.363860026	0.716334225	0.879022807	-5.730368727
Austalide B	0.022040132	13.30636872	0.361406677	0.718164388	0.880272175	-5.731180325
3-Oxododecanoic acid	0.013445075	13.38639789	0.360132229	0.719115752	0.880272175	-5.731599765

						4
Glutamate	-0.021174296	16.5209883	-0.359956754	0.719246777	0.880272175	-5.7316574
Testosterone enanthate	-0.008001544	13.23922039	-0.359020074	0.719946324	0.880355418	-5.731964581
Isorhamnetin	0.010505634	16.60281334	0.35774396	0.720899754	0.880579259	-5.732381794
Nitrosobenzene	0.012546256	11.48676224	0.356897101	0.721532713	0.880579259	-5.732657846
d-Tocotrienol	0.012660426	13.50990138	0.355868539	0.722301739	0.880579259	-5.73299225
Diosmetin 7-O-beta-D-glucuronopyranoside	0.010310972	13.98773728	0.355394648	0.722656149	0.880579259	-5.733145997
C16:3	0.019689914	13.99517344	0.35447587	0.723343	0.880646951	-

			8	442		5.733443494
12-O-Tetradecanoylphorbol 13-acetate	-0.009082963	13.38603362	-0.351813787	0.725336108	0.881635425	-5.734301134
2-Polyprenyl-3-methyl-5-hydroxy-6-methoxy-1,4-benzoquinone	-0.020303431	13.86820486	-0.350851164	0.726057126	0.881635425	-5.734609671
LysoPE(0:0/22:6(4Z,7Z,10Z,13Z,16Z,19Z))	-0.030904161	16.01401316	-0.350676418	0.726188804	0.881635425	-5.734665589
Etonogestrel	0.013187769	13.19254336	0.348585838	0.727754851	0.881635425	-5.735332415
2,3-Dimethyl-2-cyclohexen-1-one	-0.011077059	12.32534188	-0.348164599	0.728070694	0.881635425	-5.735466294
Quercetin 4'',7-diglucoside	-0.008938989	13.553944	-0.34775258	0.728379664	0.881635425	-5.735597084

			4			5
Cys	-0.006716453	12.78046226	-0.346697471	0.729171098	0.881635425	-5.735931318
2,5-Diethyl-3,6-dimethylpyrazine	0.042374665	13.91506307	0.346639016	0.729214953	0.881635425	-5.735949805
Epoxyeremopetasinorol	-0.016446433	14.44726064	-0.345102008	0.730368398	0.882264771	-5.736434793
Batrachotoxinin A	0.010362538	13.26788135	0.338192113	0.73556147	0.887237962	-5.738588552
3,17-Androstanediol glucuronide	0.012062076	13.5242714	0.33702898	0.736436819	0.887237962	-5.738946813
C14:5	0.026255584	13.91430984	0.336366265	0.736935718	0.887237962	-5.739150387

Alpha-Tocopherol	-0.012835234	17.27421382	-0.334864754	0.738066485	0.887237962	-5.739610143
3-hydroxy-3-(3,4,5-trimethoxyphenyl)propanoic acid	0.035726603	16.36385238	0.334602869	0.738263765	0.887237962	-5.739690121
Myricatomentoside I	0.008223338	13.11458687	0.334549214	0.738304186	0.887237962	-5.739706499
Anthranilate	0.011273451	13.41372425	0.33158333	0.740539663	0.889157873	-5.74060775
Hercynine	0.017112577	13.1048436	0.329231027	0.742314238	0.889535513	-5.741316851
(7''S,8''S)-4,7''-Epoxy-3,8''-bilign-7-ene-3'',5-dimethoxy-4'',9,9''-triol ...	0.011843454	13.42276348	0.329189652	0.742345464	0.889535513	-5.741329279
2,6-Di-tert-butylbenzoquinone	0.013053825	12.82452377	0.328629125	0.742768535	0.889535513	-5.74149748

						4
5-Heptadecyl-1,3-benzenediol	-0.013553623	13.59059957	-0.324852707	0.745620907	0.892185017	-5.742623266
Nicotinic acid adenine dinucleotide	0.008938984	13.47731214	0.323917642	0.746327717	0.89226487	-5.742900009
Pemirolast	0.008365835	13.48809768	0.322126624	0.747682137	0.893118165	-5.743427857
11-beta-Hydroxyandrosterone-3-glucuronide	0.021368499	14.5811862	0.319255275	0.749855171	0.894926389	-5.744267998
Catheduline E2	0.012229893	13.91757614	0.318430307	0.750479877	0.894926389	-5.74450799
Pseudoargiopinin I	0.012353227	16.21492149	0.317468945	0.751208075	0.895029108	-5.744786877
Androstenol	0.020554384	13.05091519	0.31510123	0.753002	0.895283414	-

			3	485		5.74547015
3-Methyldioxyindole	0.044029756	13.73463362	0.3145474	0.75342241	0.895283414	-5.745629237
2,5-Diamino-6-(5-phospho-D-ribosylamino)pyrimidin-4(3H)-one; 5-[(6-carboxy-...	-0.01777364	15.48434332	-0.314212379	0.753676464	0.895283414	-5.745725335
Cuscohygrine	0.011822196	13.02144659	0.312980514	0.754610848	0.895283414	-5.746077807
Meloxicam	-0.011077294	13.21470159	-0.312024387	0.755336331	0.895283414	-5.746350429
10-Nitrolinoleic acid; Dapiprazole	0.010745954	12.86224324	0.310835228	0.756238935	0.895283414	-5.746688332
Deoxyhexose; Butyl isopropyl disulfide	-0.019248552	16.64325782	-0.310756383	0.756298792	0.895283414	-5.746710691

erythro-3-Hydroxy-Ls-aspartate; Dihydro-4,6-dimethyl-4H-1,3,5-dithiazine	-0.015381413	11.89651002	-0.310413075	0.756559441	0.895283414	-5.746807979
Gibberellin A39	0.007708405	14.08483106	0.306252059	0.759720811	0.898183075	-5.7479786
{[(3E)-4-(1-oxo-1H-isochromen-3-yl)but-3-en-2-yl]oxy}sulfonic acid	-0.018568893	12.97622731	-0.305026687	0.760652572	0.898183075	-5.748320326
C12:1	-0.019337801	14.14576012	-0.304274533	0.761224676	0.898183075	-5.748529406
Hydroxyl frovatriptan	0.056605111	13.64205972	0.303756187	0.761619017	0.898183075	-5.748673192
2-Hydroxy-2,4-pentadienoic acid	0.013418921	16.3989151	0.30295139	0.762231405	0.898183075	-5.748895954
Maslinic acid	0.01635172	14.65078505	0.301510979	0.76332782	0.898249979	-5.74929317

						5
Orotidine	0.021659748	14.18841495	0.301036019	0.763689456	0.898249979	-5.749423739
Torvanol A	-0.016541737	13.84491219	-0.299968854	0.764502188	0.898249979	-5.749716348
3-Methyl-9H-carbazole-9-carboxaldehyde	-0.022343985	12.16894079	-0.299307165	0.765006249	0.898249979	-5.749897257
3,4,5-trihydroxy-6-[(4-hydroxy-7-methoxy-2,2-dimethyl-3,4-dihydro-2H-1-benz...	0.018682459	14.22176478	0.298645981	0.765510025	0.898249979	-5.75007763
4-Methoxycinnamic acid	0.010807515	13.5474782	0.297583916	0.766319454	0.898443498	-5.750366529
Capsidiol	-0.009249217	12.855543	-0.294657342	0.768551203	0.900302838	-5.751157285
Ergotamine	0.009284327	13.29957094	0.29361544	0.769346	0.900477416	-

			6	2		5.751436919
1-Acetoxy-2-hydroxy-16-heptadecen-4-one	-0.012251303	14.17915036	-0.291110791	0.771258324	0.901958141	-5.752105094
AMP	-0.018308054	13.82366663	-0.288905089	0.772943 38	0.902606348	-5.75268878
Alanyl-Methionine; 1-Hydroxypyrene	-0.028282677	13.97570282	-0.288690219	0.773107 589	0.902606348	-5.752745403
2-Deoxystreptidine	0.020154488	14.07220607	0.285985218	0.775175 686	0.90426352	-5.753454632
Isocarbamid	-0.009614964	12.18583929	-0.283826255	0.776827 467	0.905432683	-5.754015907
Bilobetin	-0.007147754	14.279989	-0.28225192	0.778032 601	0.905543522	-5.75442251

			1			4
2,5-Furandicarboxylic acid; Methyl phenyl disulfide	0.013560447	12.6679487	0.281860863	0.778332034	0.905543522	-5.754523163
Cerebronic acid	-0.009241657	13.25703076	-0.280467498	0.779399205	0.905543522	-5.754880649
Methyl propenyl ketone	-0.008681833	12.3641235	-0.279635143	0.780036901	0.905543522	-5.755093356
Alfuzosin	0.007871455	12.76450707	0.279227643	0.780349156	0.905543522	-5.755197262
C16:4	0.015464683	13.42328865	0.278613049	0.780820168	0.905543522	-5.755353687
Indole-5,6-quinone	-0.008970446	13.3500498	-0.276021424	0.782807223	0.907093324	-5.756009512

11''-Carboxy-alpha-chromanol	-0.010682957	14.2623902	-0.274391727	0.784057478	0.907569122	-5.75641878
Madlongiside C	0.01032625	13.49928723	0.273789102	0.784519937	0.907569122	-5.756569504
LysoPE(0:0/18:2(9Z,12Z))	-0.02352153	16.11631333	-0.271219696	0.786492576	0.909096726	-5.757208432
4-(2-Aminophenyl)-2,4-dioxobutanoic acid	-0.027426897	12.65863247	-0.268982161	0.788211 55	0.910328832	-5.75775993
Mercaptopyruvic acid	-0.007726722	13.257552	-0.266251605	0.790310692	0.911997603	-5.758426761
Proparacaine	0.016662682	13.91667616	0.264137915	0.791936665	0.913118041	-5.758938278
Erucic acid	0.013926071	14.74983664	0.26167916	0.793829	0.913801185	-

			4	227		5.759528175
D-Limonene	0.008179644	11.63453338	0.261664916	0.793840198	0.913801185	-5.759531578
PE(14:0/22:5(4Z,7Z,10Z,13Z,16Z))	-0.008438268	14.70941682	-0.260483075	0.794750329	0.914094025	-5.759813144
2-(4-Methyl-5-thiazolyl)ethyl formate	-0.017022663	12.35534045	-0.258559903	0.796231959	0.915043158	-5.760268607
Penicillin G	0.013780802	14.15106444	0.257652537	0.79693126	0.915092402	-5.760482326
Acetaminophen glucuronide	-0.037489322	17.06527008	-0.256300117	0.797973864	0.915535446	-5.760799479
Amlexanox	-0.013544528	13.26769959	-0.25242388	0.800964126	0.917681668	-5.76169924

			8			3
Mezerein	0.012046923	13.86360085	0.252168672	0.801161112	0.917681668	-5.761758004
Diethylene glycol	0.014723827	11.56326376	0.248025488	0.804360767	0.919555486	-5.76270362
Tetrose	0.010031924	16.34762921	0.247917795	0.804443 98	0.919555486	-5.762727991
5''-Carboxy-gamma-chromanol	-0.011992869	13.44830751	-0.24721133	0.804989907	0.919555486	-5.762887599
Cannabisativine	0.006473733	12.55842661	0.246245094	0.805736729	0.919555486	-5.763105158
2-Quinolinecarboxylic acid	-0.008089062	13.24781759	-0.245781301	0.806095268	0.919555486	-5.763209284
13-OxoODE	-0.015269026	14.84761949	-	0.810258	0.922199167	-

			0.240399334	816		5.764403241
Omeprazole	-0.03344929	14.42480103	-0.240387409	0.810268047	0.922199167	-5.764405857
N1,N8-Diacetylspermidine; 3-[[5-Methyl-2-(1-methylethyl)cyclohexyl]oxy]-1,2...	0.00807371	12.73493444	0.240220312	0.810397403	0.922199167	-5.764442502
Fumarate	0.013235734	12.94859268	0.23767689	0.812366998	0.923364763	-5.764997137
Hydroxybutanoic acid	0.018107982	16.97670567	0.237187052	0.812746459	0.923364763	-5.765103277
1-Methylpyrrolinium	0.006622439	11.08639976	0.234620434	0.814735461	0.92405885	-5.765655842
2-ethyl-1,5-dimethyl-3,3-diphenylpyrrolinium (EDDP)	-0.012908886	13.3578887	-0.23384351	0.815337774	0.92405885	-5.76582192

			3			
Methylgingerol	0.011116798	13.7020003	0.233779917	0.815387082	0.92405885	-5.765835491
Glycyrrhizin	-0.015828121	14.23100241	-0.232977962	0.816008927	0.92405885	-5.766006296
Arabinopyranobiose	-0.010393016	14.47670794	-0.230120547	0.818225547	0.925507291	-5.766610119
Annuionone B	0.016941964	12.99491453	0.229617614	0.818615846	0.925507291	-5.766715627
Fusicoccin H	0.012864608	14.60741352	0.226492695	0.821041935	0.927234479	-5.767366018
3-Oxohexadecanoic acid	-0.006253357	15.23696957	-0.22593657	0.821473875	0.927234479	-5.767480831

8-Butanoylneosolaniol	0.007782924	13.5376899	0.223961262	0.823008527	0.927477827	-5.767886357
15-Keto-13,14-dihydroprostaglandin A2	-0.012076736	15.55050643	-0.222272013	0.824321476	0.927477827	-5.768230331
Mascaroside	-0.00605975	13.71442911	-0.222234351	0.824350754	0.927477827	-5.768237971
Hygromycin A	0.011589367	12.79919318	0.222234281	0.824350809	0.927477827	-5.768237985
Arbekacin	-0.017851298	13.77419885	-0.219315106	0.826620889	0.928023664	-5.768826169
1H-Pyrrolo[2,1-c][1,4]thiazine	-0.006499506	11.88968744	-0.218984149	0.826878348	0.928023664	-5.768892363
[(7-hydroxy-1-oxo-1H-isochromen-3-	-0.009881385	13.48950202	-	0.826997	0.928023664	-

yl)methoxy]sulfonic acid			0.218830505	877		5.768923059
N4-Acetylcytidine	-0.00803867	14.72900509	-0.218186593	0.827498862	0.928023664	-5.769051469
Isoleucyl-Tyrosine	-0.040081566	14.77605418	-0.217097229	0.828346585	0.928227604	-5.769267852
Avermectin B2b aglycone	0.009071841	13.45839314	0.20993923	0.83392177	0.932768223	-5.770662734
C4:0 (Butyric acid)	0.006276276	12.97078765	0.20869661	0.834890482	0.932768223	-5.770900122
Sodium salicylate	-0.007134468	12.44890806	-0.208608276	0.834959354	0.932768223	-5.770916944
N-Cyclopropyl-trans-2-cis-6-nonadienamide	-0.015516037	12.01544729	-0.20796978	0.835457215	0.932768223	-5.77103832

						2
2(R)-hydroxydocosanoic acid	-0.012754663	13.73690217	-0.207601678	0.835744269	0.932768223	-5.771108129
3-Methyluric acid	0.0102181	15.37527774	0.205179348	0.837633803	0.934129217	-5.771564419
9-Octadecenal	0.005776614	12.63717405	0.20322318	0.839160397	0.93457366	-5.771928992
Cassitoroside	0.005657085	13.54168195	0.201032955	0.840870373	0.93457366	-5.772333044
Acetone cyanohydrin	0.007692285	12.4906014	0.199436464	0.84211728	0.93457366	-5.772624806
Glutaminylisoleucine	0.006645593	13.78566882	0.199043829	0.842424001	0.93457366	-5.772696205

Oxamic acid	0.011707908	11.24742727	0.197997651	0.843241377	0.93457366	-5.77288576
Clarithromycin	-0.008637371	14.31202636	-0.196716902	0.844242256	0.93457366	-5.773116458
Sulfo-Cys	-0.007521449	12.44684799	-0.196286088	0.844578984	0.93457366	-5.773193723
Indole-3-carboxilic acid-O-sulphate	-0.007003548	12.68860644	-0.195064077	0.845534277	0.93457366	-5.773411965
Propylhydroxypentanoic acid	-0.018929739	13.64292514	-0.194893853	0.845667366	0.93457366	-5.773442257
Doxycycline	-0.014291372	13.53971744	-0.194839763	0.845709657	0.93457366	-5.773451878
Di-2-propenyl sulfide	-0.006167246	13.44690829	-0.19479804	0.845742273	0.93457366	-5.77345929

			8			5
TG(20:4(5Z,8Z,11Z,14Z)/18:1(9Z)/22:5(7Z,10Z,13Z,16Z,19Z))	-0.004919478	13.84692665	-0.194369386	0.846077446	0.93457366	-5.773535424
Aspartate semialdehyde	-0.008221998	13.54325254	-0.192760157	0.847335961	0.935222747	-5.773819722
Simvastatin	0.007760513	13.54741665	0.191166885	0.848582382	0.935231473	-5.774098873
Alpha-CEHC	0.019042168	13.78934956	0.190682358	0.848961506	0.935231473	-5.774183306
2,6-Dimethoxy-4-propylphenol	0.014164576	15.47390407	0.189406615	0.849959891	0.935231473	-5.774404591
2(3H)-Benzothiazolethione	-0.010942675	11.74185276	-0.188847814	0.850397281	0.935231473	-5.774501055

Acetyl-Leu	-0.009601423	13.1830287	-0.188463201	0.850698355	0.935231473	-5.774567276
C22:0	-0.00943515	14.90590384	-0.18314056	0.854867143	0.938385382	-5.775469914
L-2-Aminoethyl seryl phosphate	-0.010033643	13.82828096	-0.183081386	0.854913512	0.938385382	-5.775479803
Lysine	-0.008525716	17.78271898	-0.181649472	0.856035727	0.938877894	-5.775718144
Metyrapol	0.01007385	14.1357914	0.18064252	0.856825067	0.93900483	-5.77588463
Disaccharide	-0.022163624	14.0413677	-0.179530801	0.857696701	0.939221682	-5.776067364
Oxoproline	-0.015276842	18.07346537	-0.17660497	0.859991507	0.940477794	-5.77654289

			1			3
4-Hydroxymethylphenylhydrazine	0.00853713	13.15804021	0.176348012	0.860193104	0.940477794	-5.776584283
Glutamine	-0.010270571	18.71356608	-0.174330793	0.861776029	0.94147005	-5.776907116
GF 109203X	-0.012454283	14.06891742	-0.172688891	0.863064853	0.942139707	-5.777167142
Cilazapril	0.006078666	13.09339981	0.166380562	0.868020014	0.94541011	-5.778143305
Acenocoumarol	-0.00846292	14.92872519	-0.166090165	0.868248247	0.94541011	-5.778187368
N-Docosahexaenoyl GABA	0.014443171	14.01932978	0.165712322	0.868545223	0.94541011	-5.778244583

2-Hydroxy-22-methyltetracosanoic acid	0.005678732	13.71816397	0.165421817	0.868773566	0.94541011	-5.778288485
GTP	0.005174656	14.0880322	0.163404667	0.870359391	0.946397029	-5.778591196
Crotanecine	-0.022594216	12.86337676	-0.162422059	0.871132 08	0.946498924	-5.77873731
Dihydroergotamine	-0.005655346	13.54016264	-0.160613462	0.872554621	0.947306185	-5.779003945
Histidine	0.007197402	18.05892104	0.159246944	0.873629724	0.94773528	-5.779203427
Falcarindiol	0.004464943	13.09098495	0.156677287	0.875652026	0.947948696	-5.779573925
Famotidine	-0.005474343	18.19606348	-	0.875783	0.947948696	-

			0.15651034	44		5.779597787
SM(d18:0/24:1(15Z)(OH))	0.007097573	14.70477785	0.156367587	0.875895813	0.947948696	-5.779618171
4,11,13,15-Tetrahydroridentin B	-0.004646316	13.5384517	-0.155469728	0.876602649	0.947948696	-5.779745952
Androsta-5,16-dieno[17,16-b]quinolin-3beta-ol	-0.013077037	12.60794044	-0.154087619	0.877690904	0.947948696	-5.779941212
Metharbital	-0.008401591	13.08243078	-0.153813745	0.877906576	0.947948696	-5.779979697
5-Methylthiopentanaldoxime	0.006446133	15.3440772	0.152745774	0.878747678	0.948122494	-5.780129117
Decanoic acid (FA10:0)	0.019629504	17.86469142	0.151459085	0.879761217	0.948382462	-5.780307753

						4
Traumatic acid	-0.008485741	14.23662125	-0.150712647	0.880349287	0.948382462	-5.780410693
Glycerol trihexanoate	-0.003615586	13.17905336	-0.146091508	0.883991443	0.951264436	-5.781036663
3-Hydroxymonoethylglycinexylidide	0.009109626	12.30393517	0.14558688	0.884389318	0.951264436	-5.781103839
1-Methoxy-1H-indole-3-acetonitrile	0.008350335	13.68516995	0.14195684	0.887252284	0.952790575	-5.781580219
Pilocarpine	-0.017339128	13.66385664	-0.141026172	0.887986531	0.952790575	-5.781700416
Molybdopterin precursor Z	0.01021284	16.09780447	0.140740777	0.888211711	0.952790575	-5.781737117

Butynol	0.004617725	11.69841869	0.140322006	0.888542143	0.952790575	-5.781790835
N-acetyltryptophan	0.025004828	15.25470022	0.138869464	0.889688426	0.953286446	-5.78197592
Fasciculic acid A	0.00798557	13.53768619	0.137088638	0.891094094	0.954059268	-5.782200208
Succinimide	0.003868192	14.09939438	0.134990076	0.892751004	0.954763279	-5.782460799
Cyanidin 3-glucogalactoside	0.003115797	13.39543867	0.133753501	0.893727557	0.954763279	-5.78261247
3,4,5-trihydroxy-6-[2-hydroxy-1-(1-oxo-1H-isochromen-3-yl)butoxy]oxane-2-ca...	0.008438884	13.09139851	0.132838234	0.894450047	0.954763279	-5.782723833
5,8-Tetradecadienoic acid	0.006292289	14.69234104	0.132786572	0.894491278	0.954763279	-5.782730096

4-Hydroxydebrisoquine	0.004633456	12.59320668	0.129921432	0.896754 86	0.956447035	-5.783073626
{3-[3-(2,4-dihydroxyphenyl)-2-hydroxy-3-[3,5,7-trihydroxy-2-(3-hydroxypheny...	0.003189635	13.83330859	0.128457248	0.897911 956	0.95694898	-5.783246289
Methicillin sodium	-0.009932091	14.37629248	-0.12281898	0.902369 71	0.960594047	-5.783892905
4-Mercaptobutyl glucosinolate	-0.006478044	13.26799592	-0.122388319	0.902710 331	0.960594047	-5.783941102
9,12,13-TriHOME	0.006886914	14.78885429	0.119007254	0.905385 121	0.96270546	-5.784313609
D-erythro-L-galacto-Nonulose	-0.005711378	16.41308791	-0.117788168	0.906349 818	0.962996681	-5.784445362
Cyclohexanone	0.002661932	12.41877531	0.11422530	0.909170	0.964051063	-

			4	005		5.784822645
4-Hydroxy-3-prenylbenzoic acid glucoside	0.013415248	14.83145234	0.114131785	0.909244045	0.964051063	-5.784832392
Tetraphyllin B sulfate	0.003398551	12.86471318	0.11391347	0.909416892	0.964051063	-5.784855115
Benzothiazole	0.012055615	12.88054249	0.109777142	0.912692563	0.966788323	-5.785277413
Sulfurous acid	-0.006576156	14.3749207	-0.1077013	0.914337047	0.967794869	-5.785483461
Cinnamate	0.005424083	15.26049049	0.106810832	0.915042589	0.967806805	-5.785570644
DTDP-alpha-D-glucose(2-)	-0.002001499	13.97371083	-0.10517328	0.916340236	0.96795345	-5.78572908

			9			
Malvidin 3-(6-malonylglucoside) 5-glucoside	0.003153385	13.81488947	0.104651454	0.916753804	0.96795345	-5.785779055
Cidofovir	0.004184484	13.76802856	0.103260717	0.917856 11	0.96795345	-5.785911028
C16:2	0.005932887	15.00740777	0.103131262	0.917958724	0.96795345	-5.785923223
Dihydroclavaminic acid	-0.005544275	13.71088037	-0.101688034	0.919102818	0.968427308	-5.78605814
Tryptophanamide	0.003602303	13.43049858	0.100629498	0.919942062	0.968579482	-5.786155887
1-Palmitoyl-2-(5-hydroxy-8-oxo-6-octenoyl)-sn-glycero-3-phosphatidylcholine	0.004311055	13.32446886	0.098754273	0.921429024	0.969412875	-5.786326536

GDP-alpha-D-mannose(2-)	-0.003322664	13.98199002	-0.088597354	0.929487642	0.976919584	-5.787195066
(2E)-3-[3-(sulfooxy)phenyl]prop-2-enoic acid	0.00339945	13.07126305	0.087995026	0.929965773	0.976919584	-5.787243614
Vitamin A	-0.004081059	14.45209357	-0.086975892	0.930774824	0.977033212	-5.787325003
Capryloylglycine	-0.003848363	12.20075766	-0.082373494	0.93442938	0.978311841	-5.787680746
Cefotiam	-0.003685921	12.98325663	-0.082289667	0.934495956	0.978311841	-5.787687046
Ribitol	-0.008648535	15.17639574	-0.080317147	0.936062686	0.978311841	-5.787833443
Cymorcin diglucoside	-0.002631109	13.46377066	-	0.936301	0.978311841	-

			0.080016514	494		5.787855443
Dehydrocarnitine	0.003307775	12.75013607	0.079692954	0.936558521	0.978311841	-5.787879029
Desmethylnortriptyline	-0.003419422	12.33033177	-0.079314011	0.936859551	0.978311841	-5.787906531
3,4,5-Trimethoxycinnamic acid	0.011609561	16.34340922	0.077527987	0.938278 48	0.978311841	-5.788034387
Isothipendyl	-0.002842309	14.68362584	-0.077040038	0.938666171	0.978311841	-5.788068812
Piperazine citrate	-0.001924728	13.46621216	-0.076939024	0.938746432	0.978311841	-5.788075911
Furmecyclox	-0.006075473	13.23545459	-0.07509163	0.940214 39	0.978311841	-5.78820410

						3
Chondroitin 4-sulfate	0.003284886	13.39265853	0.074891288	0.940373596	0.978311841	-5.788217818
Alpha-Linolenic acid	0.005936729	18.85417128	0.073429108	0.941535623	0.978311841	-5.788316804
Phenol sulfate	-0.006096282	18.16966245	-0.071242878	0.943273 3	0.978311841	-5.788461167
(S)C(S)S-S-Methylcysteine sulfoxide	0.003241273	12.84501293	0.070422252	0.943925627	0.978311841	-5.788514228
4-Methyl-5-(2-phosphoethyl)thiazole	0.001965248	12.33591999	0.069945072	0.944304962	0.978311841	-5.7885448
PGF2a ethanolamide	0.002703195	13.15864037	0.069704368	0.944496314	0.978311841	-5.788560143
Iminoacetate	0.002899761	12.6421177	0.06925596	0.944852	0.978311841	-

			5	79		5.788588583
Methyl-His	-0.003508572	14.70257286	-0.069088402	0.944986004	0.978311841	-5.788599164
4-Hydroxypropofol	0.008081176	13.74148534	0.068659298	0.945327152	0.978311841	-5.788626142
2-Oxo-4-phosphonobutanoate	0.002009072	13.12199848	0.065437008	0.947889268	0.980235637	-5.788823365
Aztreonam	-0.007713716	13.68132451	-0.064327401	0.948771667	0.980420834	-5.788889085
C12:4	-0.003501832	12.97106519	-0.060477616	0.951833643	0.981493155	-5.789108389
25-Acetyl-6,7-didehydrofevicordin F 3-glucoside	0.001534239	13.45094715	0.059652993	0.952489612	0.981493155	-5.789153605

						4
Farnesol	-0.001809049	11.9108065	-0.059604126	0.952528486	0.981493155	-5.789156264
Gomphidic acid	0.002284385	13.9467474	0.059481909	0.95262571	0.981493155	-5.789162907
2,4-Dinitro-1-(3-nitrophenoxy)benzene	0.001823385	12.72826288	0.057737244	0.954013671	0.982197236	-5.789256251
{4-[(E)-2-{3,5-dihydroxy-4-[(1E)-3-methylbut-1-en-1-yl]phenyl}ethenyl]pheny...	0.003106508	13.49172974	0.05671558	0.954826518	0.98230861	-5.789309623
OA-6129 D	0.002244252	13.2612738	0.052147916	0.958461166	0.984665895	-5.789536586
Hydroxyglutarate	-0.002674087	14.94213816	-0.052060703	0.958530573	0.984665895	-5.789540734

3-O-Methylniveusin A	0.001366892	13.89051547	0.05005762	0.960124782	0.98557728	-5.789634099
3-Oxotetradecanoic acid	-0.00200033	14.16890305	-0.048315707	0.961511262	0.986274245	-5.789712313
Ubiquinone-1	0.00153427	13.18418522	0.046059795	0.963307034	0.98738971	-5.789809489
10,11-dihydro-20-trihydroxy-leukotriene B4	-0.001885607	14.01300587	-0.042975773	0.965762308	0.989179029	-5.789934821
1-(beta-D-Glucopyranosyloxy)-3-octanone	0.003501386	13.41981774	0.033974659	0.972930124	0.995788982	-5.790250968
4-Methyl-1-phenyl-2-pentanone	-0.003233994	12.93245426	-0.031401228	0.974979844	0.997043969	-5.79032776
2-amino-4-({1-[(carboxymethyl)-C-	0.001973198	13.35418954	0.03049924	0.975698	0.997043969	-

hydroxycarbonimidoyl]-2-[(1-hydroxy-2,4-di...			9	304		5.790353244
L(-)-Nicotine	0.003505329	13.09609418	0.029111678	0.976803594	0.997043969	-5.790390998
Labetalol	0.001013778	13.84080577	0.02884345	0.97701726	0.997043969	-5.790398094
Pantothenic acid	-0.002261357	15.31991649	-0.027566997	0.978034086	0.997351511	-5.79043096
Delphinidin 3-(3""-p-coumaroylglucoside)	0.000681228	13.11309096	0.026378316	0.978981024	0.997587388	-5.790460229
MG(0:0/15:0/0:0)	-0.000791896	14.93051161	-0.025202052	0.979918 1	0.997812879	-5.790487922
Levetiracetam	0.002852634	12.65383876	0.022261209	0.982261054	0.998398492	-5.79055163

						3
4-Butyl-5-ethylthiazole	-0.000831733	13.56444259	-0.021994673	0.98247341	0.998398492	-5.790557017
CMP	0.000685789	12.79885821	0.019733047	0.984275353	0.998398492	-5.790600092
N-Formyl-norleucyl-leucyl-phenylalanyl-methylester	-0.000470975	13.10975046	-0.018482682	0.985271611	0.998398492	-5.790621903
Diphyllin	-0.001781082	15.01718796	-0.018066115	0.985603526	0.998398492	-5.790628852
3-(O-Geranylgeranyl)-sn-glycerol 1-phosphate	-0.000755566	13.24792861	-0.015577423	0.987586534	0.998398492	-5.790667069
Acrolein	-0.000638439	11.99238457	-0.015554812	0.987604551	0.998398492	-5.790667392

N-Palmitoyl phenylalanine	-0.000578103	12.54902726	-0.015259242	0.987840069	0.998398492	-5.790671547
All-trans-retinoic acid	-0.000414204	13.47385142	-0.012174609	0.990298043	0.998398492	-5.790710173
Propionylcarnitine	0.000429348	13.22173847	0.010832918	0.991367193	0.998398492	-5.790724263
N-a-Acetylcitrulline; 5-Hydroxysebacate	-0.000526814	13.81471336	-0.010546117	0.991595738	0.998398492	-5.790727062
Glycerol triundecanoate	-0.000485912	19.01168112	-0.009504411	0.992425853	0.998398492	-5.790736595
Dihydrothymine	-0.00051988	16.40569572	-0.009486763	0.992439916	0.998398492	-5.790736748
Carpipramine maleate	-0.000281636	14.00032041	-	0.993214	0.998398492	-

			0.008515051	263		5.790744733
8-[3,7-dihydroxy-2-(3-hydroxyphenyl)-3,4-dihydro-2H-1-benzopyran-4-yl]-2-(3...	-0.000148114	13.28489583	-0.008241147	0.993432534	0.998398492	-5.790746827
Glycolate	-0.000288835	14.77807769	-0.007836785	0.993754768	0.998398492	-5.790749795
Xanthoplanine	-0.000714498	16.73731352	-0.007350675	0.994142148	0.998398492	-5.790753165
Hydroxybutynal	-0.00022151	12.76880258	-0.007308333	0.994175 89	0.998398492	-5.790753448
Ampicillin	0.001084549	14.71533317	0.006206397	0.995054026	0.998398492	-5.790760245
Cilazaprilat	-0.00019748	12.88489738	-0.00531537	0.995764086	0.998398492	-5.790764935

			7			1
DHAP(10:0)	0.000524509	13.15257113	0.005241344	0.995823084	0.998398492	-5.790765288
Mandelonitrile rutinoside	-0.000193927	13.51702521	-0.00444539	0.996457388	0.998398492	-5.790768807
(10S)-Juvenile hormone III diol	-0.000205047	15.01514819	-0.003685366	0.997063063	0.998398492	-5.790771628
3-Methylpyrrolo[1,2-a]pyrazine	-0.000104039	12.63352871	-0.002908348	0.997682281	0.998398492	-5.790773967
2-(2-Thienylmethylene)-1,6-dioxaspiro[4.4]non-3-ene	-0.000215066	15.27588565	-0.001095595	0.999126898	0.999126898	-5.790777279

Ο Πίνακας 8 παρουσιάζει τις τιμές μεταβολιτών που αξιολογήθηκαν σε αυτή τη μελέτη μεταξύ σηπτικών ασθενών και μη ταξινομημένων οντοτήτων. Από τους 1394 μεταβολίτες που υποβλήθηκαν σε δοκιμές, μόνο δύο μεταβολίτες εμφάνισαν σημαντικές διαφορές μετά από πολλαπλές δοκιμές.