



**Bağlanmaya-Özgü Siyalik Asit Esterifikasyonu Yaklaşımı
Kullanılarak Süt Whey N-Glikomlarının MALDI-TOF/TOF-MS
ile Kapsamlı Analizleri ve Süt Whey Proteomlarının
Bölgeye-Özgü N- ve O-Glikozilasyon Analizleri**

Program Kodu: 3501

Proje No: 119Z066

Proje Yürütücüsü:
Dr. Öğr. Üyesi Hacı Mehmet KAYILI

Araştırmacı(lar)

Doç. Dr. Mustafa KARA

Doç. Dr. KADİR ŞERAFETTİN TEKGÜNDÜZ

Dr. Öğr. Üyesi MEHMET ATAKAY

Dr. ÜLKÜ GÜLER

Dr. EMRAH YAMAN

Danışman(lar)

Prof. Dr. Bekir Salih

Bursiyer(ler)

Deniz Baran DEMİRHAN

Nazire BARLAS

Ali HAYATU

EYLÜL 2021
ANKARA

ÖNSÖZ

Bu proje, ileri kütle spektrometrik teknikler ve bağlanmaya-özü siyalik asit esterifikasyonu yaklaşımı kullanılarak süt whey *N*-glikomlarının MALDI-TOF/TOF-MS ile kapsamlı analizlerini ve süt whey proteomlarının bölgeye-özü *N*- ve *O*-glikozilasyon analizlerini içermektedir. Glikozilasyon proteinlerin işlevine doğrudan etki eden önemli bir post-translasyonel modifikasyondur. Süt proteinlerinde glikozilasyona uğramış proteinlerin miktarı oldukça yüksektir. Sütte bulunan serbest süt oligosakkaritlerin önemli işlevlerinin olduğu belirlenmiştir. Son zamanlarda glikoproteinlere ait glikan yapılarının işlevini anlamaya yönelik çalışmaların da sayısı artmıştır. Bu işlev çalışmalarının tam olarak anlaşılabilmesi için glikan yapılarının güçlü analitik teknikler kullanılarak karakterize edilmesi gereklidir. Bu proje kapsamında amaçlanan, yaygın olarak kullanılan süt türlerinin glikoproteinlerinde bulunan glikan yapılarının karakterize edilmesidir. Bu sayede literatürde bu konuda arzulanan boşluğun doldurulması hedeflenmektedir. Önemli bir besin kaynağı olarak kullanılan süt türlerinin glikozilasyon açısından detaylı değerlendirmesi bu çalışma ile yapılmıştır. Bu önemli çalışmanın gerçekleşmesinde maddi desteği nedeniyle TÜBİTAK'a çalışma grubumuz adına teşekkür ederiz.

İÇİNDEKİLER

ÖNSÖZ	i
ŞEKİLLER DİZİNİ.....	iii
TABLolar DİZİNİ	iv
ÖZET	v
ABSTRACT	vi
1. GİRİŞ	1
2. LİTERATÜR ÖZETİ.....	3
2.1 Glikozilasyon.....	3
2.2 Glikoproteomik.....	4
2.3 Glikomik.....	5
2.4 Glikanların Etil-Esterifikasyonu.....	6
2.5 Süt Proteinleri ve Önemi	6
3. MATERYAL VE METOT	9
3.1 Süt Whey Proteinlerinin İzolasyonu.....	9
3.2 Glikoproteinlerden <i>N</i> -glikanların Eldesi	9
3.3 <i>N</i> -glikanların Bağlanmaya-Özgü Etil Esterifikasyonu.....	9
3.4 <i>N</i> -glikanların Saflaştırılması	9
3.5 MALDI-(TOF)/(TOF)-MS Analizleri	10
3.6 MALDI-(TOF)/(TOF)-MS Veri Analizleri.....	10
3.7 Glikoproteomik Deneyler İçin Süt Proteinlerinin Ekstraksiyonu.....	10
3.8 Proteinlerin Miktarlanması.....	10
3.9 Proteinlerin Proteolitik Parçalanması.....	11
3.10 Glikopeptitlerin Zenginleştirilmesi.....	11
3.11 Glikopeptitlerin Deglikozilasyonu.....	11
3.12 nLC-ESI-ORBITRAP-MS/MS Analizleri	12
3.13 nLC-ESI-ORBITRAP-MS/MS Veri Analizleri.....	12
4. BULGULAR VE TARTIŞMA	14
4.1 Anne Sütü Whey <i>N</i> -glikomunun Analizi.....	14
4.1.1 Anne Sütü Whey <i>N</i> -glikomunun Göreceli Bollukları	16
4.2 İnek Sütü Whey <i>N</i> -glikomunun Analizi	18
4.2.1 İnek Sütü Whey <i>N</i> -glikomunun Göreceli Bollukları.....	19
4.3 Manda Sütü Whey <i>N</i> -glikomunun Analizi	21
4.3.1 Manda Sütü Whey <i>N</i> -glikomunun Göreceli Bollukları.....	22
4.4 Keçi Sütü Whey <i>N</i> -glikomunun Analizi	24
4.4.1 Keçi Sütü Whey <i>N</i> -glikomunun Göreceli Bollukları.....	25
4.5 Eşek Sütü Whey <i>N</i> -glikomunun Analizi	28

4.5.1 Eşek Sütü Whey N-glikomunun Göreceli Bollukları.....	29
4.6 Glikomik Düzeyde Türler Arasında Kıyaslamalar	25
4.6.1 Nitelik bakımından değerlendirme	25
4.6.2 Göreceli Bolluk Açısından Glikan Profillerinin Kıyaslanması	29
4.7 Glikoproteomik Analizler	31
4.7.1 Anne Sütü Proteinleri Glikozilasyon Bölgelerinin Tespiti	32
4.7.2 Anne Sütü Glikoproteinlerinin Bölgeye-özü Glikozilasyon Analizleri.....	32
4.7.4 İnsan Sütü Laktotransferin Proteininin Bölgeye-özü Glikozilasyon Analizi	34
4.7.5 İnsan Sütü İmmunoglobulin Proteinlerinin Bölgeye-özü Glikozilasyon Analizi	36
4.7.6 Anne Sütü Proteinleri Bölgeye-özü O-Glikozilasyon Bölgelerinin Tespiti.....	37
4.7.7 İnek Sütü Proteinleri Glikozilasyon Bölgelerinin Tespiti.....	39
4.7.8 İnek Sütü Glikoproteinlerinin Bölgeye-özü N-Glikozilasyon Analizleri.....	40
4.7.9 İnek Sütü Proteinleri Bölgeye-özü N-Glikozilasyon Bölgelerinin Miktarlanması...40	
4.7.10 İnek Sütü Proteinleri Bölgeye-özü O-Glikozilasyon Bölgelerinin Tespiti	42
5. SONUÇLAR	43
6. KAYNAKLAR.....	44
7. EKLER	47

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 2. 1. N- ve O-bağı glikozilasyon birimlerinin gösterimi.....	3
Şekil 2. 2. Glikoprotein analiz düzeyleri (Glikopeptit ve Glikan Düzeyi).	5
Şekil 2. 3. Bağlanmaya-özü siyalik asit birimlerinin etil esterifikasyonu yönteminin gösterimi (Reiding vd. 2014).	6
Şekil 4. 1. Anne sütü whey N-glikom MALDI-MS spektrumu.....	15
Şekil 4. 2. Anne sütü serbest süt oligosakkarit MALDI-MS profili.	16
Şekil 4. 3. İnek sütü whey N-glikom MALDI-MS spektrumu.....	19
Şekil 4. 4. Manda sütü whey N-glikom MALDI-MS spektrumu.....	22
Şekil 4. 5. Keçi sütü whey N-glikom MALDI-MS spektrumu.	25
Şekil 4. 6. Eşek sütü whey N-glikom MALDI-MS spektrumu.....	29
Şekil 4. 7. Tespit edilen N-glikan tiplerinin türler arasında derin öğrenme algoritması kullanılarak kıyaslanması	29
Şekil 4. 8. N-glikan gruplarının türler arasındaki değişimleri.	30
Şekil 4. 9. Siyalik asit içeren N-glikan gruplarının türler arasındaki değişimleri.....	31
Şekil 4. 10. Asn497 glikozilasyon bölgesine ait Hex5HexNAc4dHex1 tipinde glikan içeren bir glikopeptitin MS/MS spektrumu.	33
Şekil 4. 11. Asn205 glikozilasyon bölgesine ait Hex4HexNAc4dHex1 tipinde glikan içeren bir glikopeptitin MS/MS spektrumu.	34

Şekil 4. 12. İnsan laktotransferin proteinine ait Asn497 N-glikozilasyon bölgesinde tespit edilen glikopeptitlere ait göreceli bolluklar.	35
Şekil 4. 13. İnsan sütü immunoglobulin proteinlerine ait çeşitli N-glikozilasyon bölgelerinde tespit edilen glikopeptitlere ait göreceli bolluklar.	37
Şekil 4. 14. T1221 glikozilasyon bölgesine ait Hex1HexNAc1 tipinde glikan içeren bir O-glikopeptitin MS/MS spektrumu.	38
Şekil 4. 15. İnsan sütü mannoz resöptör proteininde bulunan T1221 O-glikozilasyon bölgesinde tespit edilen O-glikanların göreceli bollukları.....	39
Şekil 4. 16. Asn252 glikozilasyon bölgesine ait Hex7HexNAc2 tipinde glikan içeren bir glikopeptitin MS/MS spektrumu.	40
Şekil 4. 17. İnek sütü glikoproteinlerine ait çeşitli N-glikozilasyon bölgelerinde tespit edilen glikopeptitlere ait göreceli bolluklar.	41
Şekil 4. 18. T114/T115 glikozilasyon bölgesine ait Hex1HexNAc1 tipinde glikan içeren bir O-glikopeptitin MS/MS spektrumu.	42

TABLÖLER DİZİNİ

Tablo 4. 1. Anne sütü N-glikanlarının ortalama göreceli bollukları.	16
Tablo 4. 2. İnek sütü N-glikanlarının ortalama göreceli bollukları.	20
Tablo 4. 3. Manda sütü N-glikanlarının ortalama göreceli bollukları.	23
Tablo 4. 4. Keçi sütü N-glikanlarının ortalama göreceli bollukları	26
Tablo 4. 5. Eşek sütü N-glikanlarının ortalama göreceli bollukları.	30
Tablo 4. 6. Tespit edilen N-glikanların türlere göre dağılımı.	25

ÖZET

Glikozilasyon, hücre proteomundaki en yaygın ve önemli translasyon sonrası modifikasyonlardan biridir. Glikan yapılarının hücresel aktivitelerdeki işlevini anlamak için yapılarının aydınlatılması çok önemlidir. Süt whey proteinlerinde gözlemlenen post-translasyonel modifikasyonlar, proteinlerde işlevsel değişimlere sebep olmaktadır. Süt *N*-glikanlarının anti-patojenik etkiye sahip olduğu ve whey proteomundaki siyalik asit içeren glikanların yeni doğanların bağışıklık sisteminde aktif rol oynadığı vurgulanmaktadır. Sütteki serbest oligosakkaritlerin türleri ve rolleri hakkında önemli bilgiler olmasına rağmen, glikanların süt glikoproteinleri ile ilişkili biyolojik özellikleri hakkında çok az şey bilinmektedir. Çalışmanın ilk kısmında, whey proteinleri çeşitli süt türlerinden (insan, inek, manda, keçi ve eşek) ekstrakte edildi. Sonrasında *N*-glikanlar, whey glikoproteinlerden enzimatik bir süreç ile salındı ve analizleri öncesi bağlantıya özgü etil-esterifikasyonu işlemine maruz bırakıldı. Etil-esterifikasyona uğramış *N*-glikanların analizleri, MALDI-MS gerçekleştirildi. Tespit edilen *N*-glikan yapılarının göreceli bollukları hesaplandı. Çalışmada, tespit edilen whey *N*-glikan sayısı insan, inek, manda, keçi ve eşek türleri için sırasıyla 67, 75, 71, 99 ve 66 olarak belirlendi. İnek ve manda whey *N*-glikan profillerinin çoğunlukla örtüştüğü tespit edilmiştir. Keçi sütü whey *N*-glikan profili en fazla heterojenliği sahip tür olarak belirlendi. Asetillenmiş *N*-glikanlar sadece eşek sütü *N*-glikan profillerinde (%16,06) belirlendi. İnsan sütü *N*-glikanlarının türler arasında en fazla fukozlanma oranına sahip olduğu tespit edildi (%62,72). *N*-glikozil nöraminik asit içeren *N*-glikan yapıları, insan whey glikoproteinleri hariç tüm türlerde belirlenmiştir. Anne sütü whey *N*-glikanları çoğunlukla alfa2,6-bağlı *N*-asetil nöraminik asit tipi siyalik asit (%65,16) içerirken keçi whey *N*-glikanlarının yüksek miktarda *N*-glikozil nöraminik asit içeren *N*-glikanları (%28,24) sahip olduğu tespit edildi. Çalışmanın ikinci kısmı glikoproteomik analizleri içermektedir. İlk olarak ekstrakte edilmiş whey proteinlerin proteolitik parçalanmaları tripsin enzimi ile sağlandı. Glikopeptitlerin hidrofilik etkileşim prensipli zenginleştirilmesi sonucu bağlanmaya-özgü *N*- ve *O*-glikozilasyon analizleri gerçekleştirildi. Analizler sonucunda insan ve inek sütünde sırasıyla 147 ve 94 adet *N*-glikopeptit belirlendi ve göreceli bollukları hesaplandı. *O*-glikozilasyon analizler sonucunda insan ve inek sütü whey proteinlerine ait yeni *O*-glikozilasyon bölgeleri belirlenmiştir. Ayrıca, insan ve inek sütü whey glikoproteomuna ait potansiyel *O*-glikozilasyon bölgeleri çalışmada gösterilmiştir.

Anahtar Kelimeler:

süt, *N*-glikan, whey protein, glikomik, glikoproteomik, glikozilasyon

ABSTRACT

Glycosylation is one of the most common and important post-translational modifications in the cell proteome. To understand the function of glycan structures in cellular activities, it is essential to elucidate their structures. Post-translational modifications observed in milk whey proteins cause functional changes in proteins. It is emphasized that milk *N*-glycans have an anti-pathogenic effect, and glycans containing sialic acid residues in the whey proteome play an active role in the immune system of newborns. Although there is important information about the types and functions of free oligosaccharides in milk, little is known about the biological properties of glycans associated with milk glycoproteins. In the first part of the study, whey proteins were extracted from various types of milk (human, cow, buffalo, goat, and donkey). *N*-glycans were then released from whey glycoproteins by an enzymatic process and subjected to linkage-specific ethyl-esterification before analysis. Analysis of ethyl-esterified *N*-glycans was performed by MALDI-MS. The relative abundances of the detected *N*-glycan structures were calculated. The number of whey *N*-glycans detected in the study was 67, 75, 71, 99, and 66 for human, cow, buffalo, goat, and donkey species, respectively. It was determined that cow and buffalo whey *N*-glycan profiles mostly overlapped. Goat milk whey *N*-glycan profile was determined as the species with the most heterogeneity. Acetylated *N*-glycans were detected only in donkey milk whey *N*-glycan profiles (16.06%). Human milk *N*-glycans were found to have the highest rate of fucosylation among the species (62.72%). *N*-glycan structures containing *N*-glycosyl neuraminic acid were determined in all species except human whey glycoproteins. Breast milk whey *N*-glycans mostly had alpha2,6-linked *N*-acetyl neuraminic acid type sialic acid (65.16%), while goat whey *N*-glycans included high amounts of *N*-glycosyl neuraminic acid *N*-glycans (28.24%). The second part of the study consists of glycoproteomic analyses. Firstly, proteolytic degradation of extracted whey proteins was achieved with the trypsin enzyme. As a result of the enrichment of glycopeptides with the principle of hydrophilic interaction, site-specific *N*- and *O*-glycosylation analyses were performed. As a result of the results, 147 and 94 *N*-glycopeptides were determined in human and cow milk, respectively, and their relative abundances were calculated. As a result of *O*-glycosylation analysis, new *O*-glycosylation sites of human and cow milk whey proteins were determined. In addition, potential *O*-glycosylation sites of human and cow's milk whey glycoproteome were shown in the study.

Keywords:

milk, *N*-glycan, whey proteins, glycomics, glycoproteomics, glycosylation

1. GİRİŞ

Glikozilasyon canlı proteomunda en sık görülen post-translasyonel modifikasyonlardan biridir ve glikozilasyonun hücresel aktivitelerdeki rolünün anlaşılabilmesi için glikozilasyon bölgelerinin ve her bölgedeki glikan birimlerinin aydınlatılması gereklidir. Proteinlerin birçok işlevi yerine getirebilmesi için bu modifikasyonu taşımasının gerekli olduğu bildirilmektedir. Glikozilasyon proteinlerin 3 boyutlu yapısına doğrudan katkıda bulunmaktadır. Burada glikanları rolü oldukça önemlidir. Ayrıca protein-protein etkileşimlerinin gerçekleşmesinde aktif rol almaktadırlar. Bu gibi önemli işlevlerin anlaşılmasında glikozilasyon bölgelerindeki glikan ve glikozilasyon bölgelerini içeren peptit birimlerinin belirlenmesi çok önemlidir.

Kütle spektrometresi glikozilasyon bölgelerinin analizinde kullanılan en uygun tekniklerden biridir. Hem glikan yapılarının aydınlatılmasında hem de glikozilasyon bölgelerinin doğru bir şekilde tespinde kullanılabilir. Yumuşak iyonlaştırma içeren yeni nesil kütle spektrometreleri sayesinde peptitlerin yapıları bozulmadan analiz edilebilmektedir. Ayrıca, modifikasyona uğramış peptitlerin de yüksek doğrulukta m/z değerleri elde edilebilmektedir. Glikozilasyon bölgelerinin tayininde, peptit ve glikan sekanslarının belirlenmesinde bu peptitlere ait m/z değerlerinin yanı sıra bu moleküllerin spesifik parçalanma ürünlerine ait spektrumların da elde edilmesi gereklidir. Kütle spektrometresinin glikozilasyon analizlerinde birçok avantajı bulunsa da otomatik olarak glikozilasyon bölgelerinin tayini henüz tam anlamıyla başarılabilmiş değildir. Her geçen gün uzman kullanıcı olmaksızın kütle spektrometrik verilerin değerlendirilebileceği yeni yazılımlar geliştirilmeye çalışılmaktadır. Bu sayede glikozilasyon analizlere yönelik verimlilik artmaktadır.

Süt, protein kaynağı olarak günlük hayatta tükettiğimiz birçok besinde kullanılmaktadır. Özellikle bebek mamalarında protein kaynağı olarak çeşitli süt kaynaklarının (inek, keçi) kullanımı yaygındır. Sütte bulunan bileşenlerin birçok önemli işlevi bulunmaktadır. Bunlardan en önemlisi serbest süt oligosakkaritlerin almış olduğu roldür. Serbest süt oligosakkaritlerinin yeni doğanların sindirim sistemine doğrudan katkısının olduğu belirlenmiştir. Özellikle bağırsaklarda yararlı bakteriler için karbon kaynağı olarak kullanılmaktadır. Her ne kadar serbest süt oligosakkaritler üzerine çok fazla çalışma yapılmış olsa da süt proteinlerine bağlı olarak bulunan kompleks oligosakkaritler yani glikanlar üzerine yapılan çalışma sayısı çok sınırlıdır. Süt glikoproteinlerine ait glikanların işlevlerinin anlaşılması üzerine yapılan çalışmalarda insan süt glikoproteinlerine ait glikanlarının sığır süt glikoprotein glikanları ile kıyaslandığında anti-patojenik etkisinin çok daha yüksek olduğu belirlenmiştir. Bu tarz çalışmalardan elde edilen sonuçların daha net anlaşılabilmesi için süt glikoproteinlerine ait glikan yapılarının güçlü analitik tekniklerle analiz edilmesi gerekmektedir.



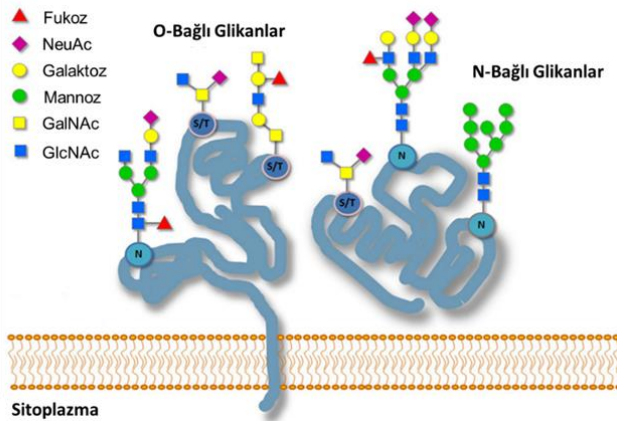
Proje kapsamında yaygın olarak tüketilen süt kaynaklarının glkoproteinlerine ait glikan birimlerinin etil-esterifikasyon yaklaşımı kullanılarak karakterize edilmesi amaçlanmıştır. Ayrıca, anne ve inek süt glikoproteomunun hem glikozilasyon bölgeleri hem de glikan yapılarının detaylı olarak analizlerine odaklanılmıştır.

2. LİTERATÜR ÖZETİ

2.1 Glikozilasyon

Glikozilasyon canlı proteinlerinde görülen en kritik post-translasyonel modifikasyonlardan biridir (Apweiler vd. 1999; Ohtsubo ve Marth 2006). Canlılarda glikozilasyon görülme sıklığı oldukça yoğundur. Toplam canlı proteomunun neredeyse % 50'si glikozilasyon bölgesi içermektedir. Glikozilasyon proteinin işlevini değiştirmektedir ve glikozile proteinler birçok önemli işlevi üstlenmektedirler. Glikozilasyon sürecindeki bozukluklar, çeşitli hastalıkların oluşmasına neden olmaktadır (Rudd vd. 2001; Brownlee 1995; Hakomori 1989). Protein glikozilasyonu, canlıda enzimatik süreçlerle meydana gelmektedir. Oligosakkarit birimleri, anomerik karbonları aracılığıyla serin ve treonin aminoasitlerinin hidroksil gruplarına glikozidik olarak (*O*-bağlı) veya asparajin aminoasidinin amit azotuna *N*-glikozidik bağıyla (*N*-bağlı) bağlanmaktadır. Bağlanmaya bağlı olarak glikozilasyon türleri *O*-bağlı ve *N*-bağlı glikozilasyon olarak adlandırılmaktadır (Şekil 2.1).

Glikanlar, bir glikoproteinin tüm yapısını değiştirebilir ve bu nedenle proteinlerin işlevine doğrudan etki gösterebilir (Varki 1993; Paulson 1989). Bir glikoproteinin hedef reseptörler tarafından belirlenmesi gibi önemli özellikler glikanlar sayesinde gerçekleşmektedir. Glikanların ayrıca hücre adhezyonu ve proteinin yarı-ömürlerine etkilerinin varlığı gösterilmiştir (Drickamer ve Taylor 1993). Bazı glikan türlerinin hücre içi etkileşimlere katıldığı bilinmektedir. Bu duruma örnek olarak selektin olarak adlandırılan biyomoleküller ile glikanlar arasında gerçekleşen etkileşimler verilebilir. Selektin molökülü, hedef patojen ile glikanlar vasıtasıyla etkileşir ve bakteri enfeksiyonuna karşı immün sisteme yardımcı olur. Bu sayede hücre savunması başlamaktadır (Lasky 1995). Bu tarz işlevlerin belirlenebilmesi için glikoproteine ait glikan yapılarının ve glikozilasyon bölgelerinin aydınlatılması gereklidir.



Şekil 2. 1. N- ve O-bağlı glikozilasyon birimlerinin gösterimi.

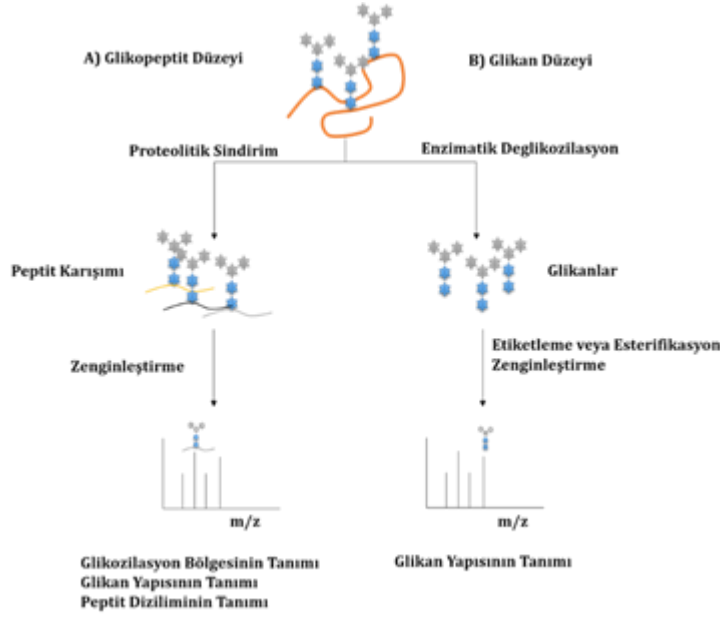
Glikanlar, tek bir glikozilasyon bölgesi içerse dahi bileşen ve yapısal bakımdan farklılık gösterir.

Glikan biyosentezinde herhangi bir kod takip edilmediği için yapıyı ve glikozilasyon alanını belirlemenin çeşitli zorlukları bulunmaktadır. Glikanların sentezi sonucunda yapısal olarak heterojenitenin artması ve izomerlerin oluşması gözlenmektedir.

2.2 Glikoproteomik

Glikoproteomik, proteomik çalışma alanı içerisinde yer alır ve yapısında glikan içeren proteinlerin karakterize edilerek yapılarının ve işlevlerinin incelendiği çalışmaları kapsamaktadır. Protein glikozilasyonu, çeşitli enzimatik değişim süreçlerini içerdiğinden proteinlere bağlanan oligosakkaritler oldukça heterojen bir yapıya sahip olabilmektedir. Glikoproteomik çalışmalarının temel hedefi, glikoproteinlerin glikozilasyon bölgesinin ve her bölgede bulunan glikanlarının yapı heterojenitesinin belirlenmesidir. Glikoproteinlerin biyolojik işlevlerinin tamamıyla anlaşılması açısından bu analizler oldukça önemlidir. Matriks-Yardımlı Lazer Desorpsiyon/İyonlaşmalı Kütle Spektrometrisi (Matrix-Assisted Laser Desorption/Ionization-Mass Spectrometry, MALDI-MS) ve Elektrosprey İyonlaşmalı (Electrospray Ionization-Mass spectrometry, ESI-MS) kütle spektrometrisi yöntemleri, glikoproteomik çalışmalar için en uygun tekniklerdir.

Kütle spektrometrisi temelli glikoproteomik analizlerinde iki düzey bulunmaktadır. Proteinlerin herhangi bir proteaz veya proteazların birlikte kullanımı sonucu proteolitik olarak parçalanması sonucu oluşan glikopeptitlerin analizi glikopeptit seviyesi olarak tanımlanır. Saflaştırılmış proteinlere ait glikozilasyon analizleri glikopeptit düzeyinde gerçekleştirilmektedir. Glikopeptit düzeyinde glikozilasyon bölgelerinin konumu, glikan yapısı ve peptit dizilimi hakkında bilgi edinilir. Glikozilasyon bölgelerinin doğrulanması için glikopeptitlerin deglikozilasyonu işlemi yapılmaktadır. Bu işlemde PNGase F enzimi kullanılmaktadır ve işlem sonucu asparajin amino asiti deamidasyona maruz kalmaktadır. Bu durum yaklaşık 1 Da fark yaratır. Ayrıca bu deglikozilasyon işlemi eğer $H_2^{18}O$ izotoplu suda gerçekleştirilirse deamidasyon sonucu kütle kayması yaklaşık 3 Da olmaktadır. Bu kütle farklılıkları çeşitli arama motorları ve proteomik yazılımlar ile taranıp deamide olmuş peptitler ve dolayısıyla glikozilasyon bölgeleri tespit edilebilmektedir (Wuhrer vd. 2007; Geyer ve Geyer 2006a; Desaire 2013; Zaia 2010; An vd. 2009). Glikan düzeyinde ise proteine veya proteoma ait toplam glikan birimleri hakkında bilgi edinilmektedir. Bu aşama, glikozilasyon bölgelerine ait glikan birimlerinin özgün enzimler kullanılarak ayrılması ve saflaştırılması sonrası ayrıntılı analizini içermektedir (Şekil 2.2).



Şekil 2. 2. Glikoprotein analiz düzeyleri (Glikopeptit ve Glikan Düzeyi).

2.3 Glikomik

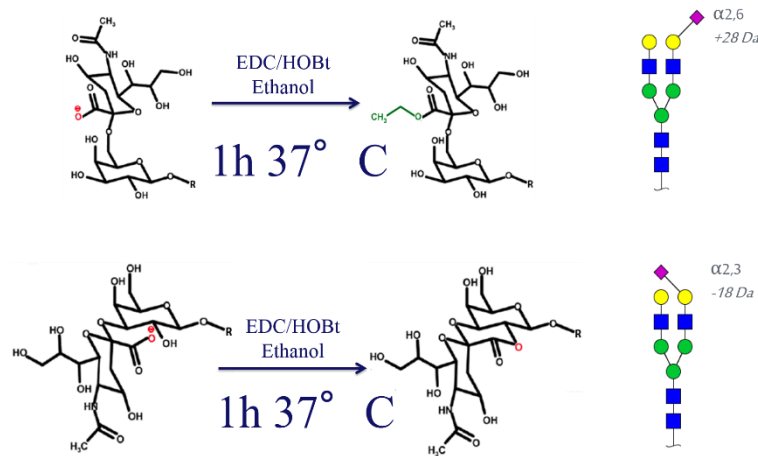
Glikomik glikan düzeyinde gerçekleşen çalışmaları içerir. Hedefi saf ya da kompleks bir örneğe ait glikanların toplu olarak analizidir. İlk olarak, glikanların kütle spektrometrisi ile analizleri öncesinde enzimatik veya kimyasal yollarla glikoproteinlerden uzaklaştırılması gereklidir. Enzimatik süreç ile glikanların uzaklaştırılması kimyasal sürece kıyasla daha avantajlıdır. Glikoprotein denatüre olmaz ve analiz için daha uygun kalır. Bazı özgün enzimler glikanların proteinlerden koparılması için kullanılabilir. Endoglikozidazlar ve ekzoglikozidazlar bu hedef doğrultusunda kullanılmaktadır. Yaygın olarak kullanılan endoglikozidazlardan biri olan PNGase F, *N*-glikanları çekirdek glikan yapısında bulunan GlcNAc ile asparajin amino asidi arasındaki bağı kırar ve *N*-glikanlar enzimatik süreçle uzaklaştırılır. Bu süreçte glikan birimin indirgeyici ucundaki glikozilamin grubu korunur (Geyer ve Geyer 2006b; Mechref ve Novotny 2002; Huhn vd. 2009; Hanisch vd. 2001). *O*-glikanların enzimatik olarak uzaklaştırılması çok daha zordur. Sadece iki adet *O*-glikonaz mevcuttur ve bu enzimlerin substrata özgünlüğü düşüktür. Bu nedenle, *O*-glikozilasyon analizleri çoğunlukla glikopeptit düzeyinde gerçekleştirilir. Diğer yandan kimyasal süreçlerle *O*-glikanlar uzaklaştırılabilir ve analizleri kütle spektrometrik yöntemlerle gerçekleştirilebilir.

Glikanlar çeşitli floresan özellikli maddeler ile indirgeyici uçlarından etiketlenebilmektedir. Reaksiyon genellikle asetik asit içeren di metil sülfoksit çözücüsü içerisinde gerçekleştirilir. Bu yöntemin en büyük avantajı, her glikan başına bir etiket bağlandığı için HPLC-HILIC-FLD (Floresans) ve MALDI-MS ile yapılan analizlerde nicel bilgiler vermektedir. Literatürde tanımlanan çok sayıda florofor glikanların analizlerinde kullanılmaktadır (Anumula 1994). En

yoğun olarak kullanılanlar 2-aminobenzamit (2-AB), 2-amino benzoik asit (2-AA), 2-aminopiridin (2-AP), 2-aminonaftelin trisülfonik asit (ANTS) ve 1-aminopirin-3,6,8-trisülfonik asit (APTS) floroforlarıdır (Ruhaak vd. 2010). Bu yaklaşımın en büyük dezavantajı analizlerde siyalik asitlere yönelik bir izomer ayrımının mümkün olmayışıdır. Ayrıca, siyalik asit birimlerinin MALDI-MS analizlerinde refletron modunda kararlı olmamasından dolayı nicel analizlerde yanlış değerlendirmelere yol açabilmektedir.

2.4 Glikanların Etil-Esterifikasyonu

Bağlanmaya-özümlü siyalik asit birimlerinin etil esterifikasyonu, glikomik çalışmaları kapsamında son zamanlarda geliştirilmiş önemli tekniklerden biridir (Reiding vd. 2014). Reaksiyon sonucunda α 2,6 bağlı siyalik asit içeren *N*-glikanların etilasyonu oluşurken, α 2,3- bağlı siyalik asit içeren *N*-glikanların lakton formunu vermektedir (Şekil 2.3). Burada siyalik asit içeren *N*-glikan izomerlerinin reaksiyon sonucunda değişen kütle farkları (+28 Da ve -18 Da, sırasıyla α 2,6 ve α 2,3 için) ile izomer ayrımı gerçekleştirilebilmektedir. Bu yöntem, hem *N*- hem de *O*-glikan yapılarındaki siyalik asit birimlerine ait izomerlerin tespitinde kullanılmaktadır. Bu yöntem ile siyalik asit birimlerini daha kararlı hale gelmektedir. Bu sayede, MALDI-TOF/TOF-MS analizlerinde kaynak sonrası bozunma (post-source decoy) olarak adlandırılan ve siyalik asit birimlerinin kopması ile sonuçlanan problemi azaltmaktadır.



Şekil 2. 3. Bağlanmaya-özümlü siyalik asit birimlerinin etil esterifikasyonu yönteminin gösterimi (Reiding vd. 2014).

2.5 Süt Proteinleri ve Önemi

Süt, içeriğinde besleyici bileşenleri içeren önemli bir biyolojik matrikstir (van Leeuwen vd. 2012). Süt yeni doğanlara birçok önemli besin maddesini sunar. Ayrıca, yeni doğanların bağışıklık ve sindirim sistemi gelişimine katkıda bulunur (Froehlich vd. 2010). Süt proteinlerinde gözlemlenen post-translasyonel modifikasyonlar süt proteinlerin işlevlerinde

önemli roller üstlenmektedirler. İşlevlerinin daha net anlaşılabilmesi için süt proteomunda gözlemlenen modifikasyonlarının belirlenmesi gereklidir (Yang vd. 2017). Süt proteinleri temelde iki önemli protein grubundan oluşmaktadır. Bunlar kazein ve whey (süt serumu) proteinleridir. Kazein proteinleri, α 1-, α 2-, β - ve κ -kazein olmak üzere dört tipten oluşmaktadır. Whey proteinleri ise β -laktoglobulin, α -laktalbümin, laktoferrin, lizozim, immünoglobulinler ve laktoperoksidaz ve serum albümin gibi globüler proteinlerden oluşmaktadır. Toplam süt proteom içerisinde glikoproteinlerin sayısı oldukça yüksektir (Molinari vd. 2012). Sütte antimikrobiyal proteinler bulunmaktadır. Bunlara immünoglobülinler, laktoferrin, laktoperoksidaz ve lizozim proteinleri örnek verilebilir. Süt proteinlerinin moleküler bileşimleri çözünürlük, pıhtılaşma kabiliyeti, termal denatürasyon ve sütün beslenme özellikleri gibi işlevsel özelliklerini değiştirebilir (Ballard ve Morrow 2013). Süt, enfeksiyona karşı direnci artırabilir ve potansiyel olarak patojen mikroorganizmaların etkisini inhibe edebilir. Sütün antibakteriyal ve antimikrobiyal aktiviteleri, oto-immün hastalıklarında etkili olması ve bağışıklık sistemini uyarması fonksiyonları sütteki whey proteinleri ile ilişkili olduğu bildirilmektedir. Bu yüzden süt whey proteinlerinin glikozilasyon profillerinin belirlenmesi önemlidir (Brumini vd. 2016). Son zamanlarda Wang ve ark. tarafından yapılan çalışmada süt *N*-glikomunda fukozlanma oranının sütün anti-patojenik aktivitesine önemli bir etki yaptığı belirlenmiştir. Aynı zamanda, insan süt *N*-glikomunun anti-patojenik aktivitesinin sığır sütüne oranla daha yüksek olduğu belirlenmiştir (Wang vd. 2017). Yapılan bir çalışmada ise siyalik asit içeren süt whey glikoproteinlerinin yeni doğanlara sağlanan bağışıklık sisteminin bir parçası olarak görülmektedir ve sütün laktasyonu boyunca siyalik asit içeren glikanların ve glikoproteinlerin profilleri α -2,6 ve α -2,3 bağlanmalarına özgü olarak değiştiği belirlenmiştir (Lis-Kuberka vd. 2017). Bu gibi işlevlerin glikozilasyona atfedilmesi glikanların ve glikopeptitlerin ayrıntılı yapısal karakterizasyonlarının yapılmasının ne derece önemli olduğunu göstermektedir.

Süt whey proteinleri üzerine birçok proteomik çalışma yapılmış olsa da post-translasyonel modifikasyonlara hitap eden çok az çalışma bulunmaktadır. Toplam süt proteinleri içerisinde glikoproteinlerin oranı oldukça yüksektir. Memelilerdeki birçok membran proteini de glikoproteindir. Bu glikoproteinlerin birçoğu aynı zamanda sütte de yaygındır. Sütün biyo-düzenleyici özelliklerinde ve sonuçta sütün beslenme kalitesinin belirlenmesinde önemli rol oynamaktadırlar. Serbest oligosakaritlerin sütteki tipleri ve rolleri hakkında önemli miktarda bilgi mevcut olmasına rağmen süt glikoproteinleri ile ilişkili glikanlar, özellikle de biyolojik özellikleri hakkında çok az şey bilinmektedir. Bu nedenle, süt *N*-glikanlarının işlevlerinin tam olarak anlaşılabilmesi için süt whey proteinlerinin glikozilasyon analizlerinin güvenilir tekniklerle yapılması gerekmektedir. Ayrıca yapılan son çalışmalarda siyalik asit içeren süt glikoproteinlerinin (siyaloproteom) siyalik asit bağının tipi ile ilişkilendirildiği ve süt

glikoproteinlerinin $\alpha 2,3$ - ve $\alpha 2,6$ -siyalilasyonunun süt olgunlaşması ile ilişkili olduğuna dair çalışmalar mevcuttur(Lis-Kuberka vd. 2017).

Literatürde yapılan çalışmalarda insan ve hayvan süt *N*-glikan yapılarının karşılaştırıldığı birkaç çalışma bulunmaktadır. Nwosu ve ark. yapmış olduğu araştırmada HPLC-CHIP-QTOF-MS sistemi kullanılarak insan ve sığır sütüne ait whey *N*-glikan profilleri karşılaştırılmıştır(Nwosu vd. 2012). Her ne kadar kullanılan kolonun izomer ayrımı konusunda uygulamaları mevcut olsa da siyalik asit birimlerine ait bir izomer ayrımı çalışmada yapılamamıştır. Bu nedenle $\alpha 2,6$ ve $\alpha 2,3$ bağlı *N*-glikan birimlerinin ayrımı çalışmada söz konusu değildir. Bu bakımdan çalışmanın bu tarafı eksik kalmaktadır. Benzer bir durum gene Dong ve ark. tarafından yapılan çalışmada da görülmektedir(Dong vd. 2016). Bu sonuca göre insan ve hayvan süt whey *N*-glikomuna ait siyalik asitin bağlanma bölgelerine yönelik bir bilgi yoktur. İnsan ve hayvanların süt whey *N*-glikan yapılarının bağlanmaya-özü olarak güvenilir ve hassas teknikler ile analiz edilmesi gerekmektedir. Aynı zamanda *N*-glikan düzeyinde yapılan bu iki çalışmanın en büyük eksikliklerinden biri de bölgeye-özü *N*- ve *O*-glikozilasyon analizlerini içermemesidir. Yani *N*-glikan birimleri tanımlanmış fakat glikozilasyon bölgelerine odaklanılmamıştır.

3. MATERYAL VE METOT

3.1 Süt Whey Proteinlerinin İzolasyonu

Her bir türe ait süt havuzundan 0.5 mL süt alındı ve 0.5 mL su ile seyreltildi. Sonrasında bu örnek 4000 rpm hızında 30 dk. +4 °C'de santrifüj edildi. Üst kısmında kalan yağ tabakası uzaklaştırıldıktan sonra süt örnekleri tekrar 1500 rpm'de +4 °C'de 1 saat santrifüj edildi. Süt örneklerinde 3 tabaka oluşması beklenmektedir. Üst tabaka yağ, orta tabakada whey proteinleri ve serbest oligosakkaritler, alt tabakada ise kazein proteinlerini içermektedir. Orta tabaka dikkatlice başka bir ependorfa aktarıldıktan sonra whey proteinlerinin çöktürülmesi için alınan hacmin iki katı hacimde %90'lık soğuk etanol çözeltisi ilave edildi. -20 °C'de süt örnekleri 20 dk. bekletildikten sonra whey proteinlerinin ayrılması için 15000 rpm'de süt örnekleri santrifüj edildi. Üst kısımda kalan ve serbest oligosakkaritleri içeren çözelti uzaklaştırıldıktan sonra çöken whey proteinleri bir santrifüjlü konsantrator vasıtasıyla kurutuldu ve 50 µL %2 SDS içeren çözeltide yeniden çözüldü.

3.2 Glikoproteinlerden *N*-glikanların Eldesi

50 µL %2 SDS içinde çözülen whey proteinlerinin denatürasyon işlemi 90 °C'de 10 dakika inkübasyonları sonrasında gerçekleştirildi. Sonrasında çözeltiye 50 µL %2 Igepal-CA630 ve 50 µL 5X PBS ilave edildi. Enzimatik deglikozilasyonun gerçekleşmesi için 2 U PNGase F enzimi ilave edilerek 1 gece örnekler 37 °C'de bekletildi.

3.3 *N*-glikanların Bağlanmaya-Özgü Etil Esterifikasyonu

Etiketleme işlemi Reiding ve ark. tarafından geliştirilen yöntem modifiye edilerek yapıldı (Ruhaak vd. 2008). PNGase F enzimine maruz bırakılmış süt whey glikoproteinleri çözeltisinden 2 µL alındıktan sonra bu çözeltiye 10 µL 1-etil-3-(3-dimetilaminopropil)karbodiimid hidroklorür (0.5M etanol içerisinde hazırlanan, EDC) ve 10 µL hidroksi benzotriazol monohidrat (0.5M etanol içerisinde hazırlanan, HOBt) çözeltileri ilave edildi. Sonrasında bu çözelti 60 °C'de 1 saat inkübe edildi. Son çözeltiye 20 µL asetonitril ilave edilip -20 °C'de 10 dakika esterifikasyona maruz kalmış glikanların saflaştırılması öncesi bekletildi.

3.4 *N*-glikanların Saflaştırılması

Saflaştırma amacıyla pamuk içeren ev yapımı pipet ucu kullanıldı (Selman vd. 2011). Pamuk lifleri (3 mm uzunlukta) 100 µL'lik pipet ucuna yerleştirildi. Sonrasında ayrı bir ependorfa etil esterifikasyona maruz kalmış örnek yükleme çözeltisi alındı. Önceden hazırlanan pamuk içeren pipet ucu sırasıyla önce 100 µL deiyonize su ve 100 µL % 85 asetonitril ile yıkandı. Sonrasında hazırlanan yükleme çözeltisi pamuk içeren pipet ucundan en az 20 kez geçirildi.

Bu aşamadan sonra tuz ve diğer solvent artıklarının giderilmesi için pipet ucu 3 kez % 85/14/1, v/v/v, asetonitril/su/trifloro asetik asit çözeltisi ile ve 3 kez % 85 asetonitril ile yıkandı. Elüsyon 10 µL su ile gerçekleştirildi.

3.5 MALDI-(TOF)/(TOF)-MS Analizleri

Elüsyon çözeltisinin 5 µL'si MTP 384 Anchor Plate'e damlatılarak kurutuldu. Bu aşamadan sonra hacimce 1/1 oranında asetonitril/1 mM NaOH içerisinde hazırlanmış 5 mg Super DHB matriksi (w:w, 9:1, 2-5 dihidroksi benzoik asit:2-hidroksi-5-methoksi benzoik asit) çözeltisinden 1 µL alınarak bu spotun üzerine ilave edildi. Kristalleşme oluşuncaya kadar bekletildikten sonra MALDI kütle spektrometrisi ile analizler, Bruker rapifleX™ MALDI Tissue typer™ (Almanya, Bremen) cihazı ile gerçekleştirildi. Analizler pozitif iyonlaşmada refletron modunda en az 10000 laser atışı toplanarak gerçekleştirildi. Her analiz öncesi Bruker rapifleX™ MALDI Tissue typer™ kütle spektrometrisi bir peptit karışımı ile kütle kalibrasyonu gerçekleştirildi. 25 kV hızlandırma voltajı uygulanarak 1000-4000 kütle aralığında kütle spektrumlar elde edilmiştir. Tespit edilen *N*-glikanlarının yapı doğrulamalarını gerçekleştirmek amacıyla LIFT modunda MS/MS spektrumları elde edilmiştir.

3.6 MALDI-(TOF)/(TOF)-MS Veri Analizleri

Tespit edilen her bir *N*-glikan kütlelerinin alan bilgisine bağlı olarak her bir tür için whey glikomunda tespit edilen *N*-glikanların göreceli bollukları hesaplanmıştır. Bu amaçla tespit edilen *N*-glikanlarının alanlarının spektrumlardan izolasyonu için python dilinde yazılmış bir yazılım olan MassyTools programı kullanılmıştır (Jansen et al., 2015). Spektrumlar program için uygun formata dönüştürüldükten sonra (.xy) yazılıma *N*-glikan bilgileri, kütle kalibrasyon bilgileri ve ekstraksiyon kriterleri tanıtılmıştır. Bu bilgiler tablolarda belirtilmektedir. Yazılım otomatik olarak *N*-glikan piklerin altında kalan alanları dikkate alarak her bir *N*-glikanın göreceli bolluğunu hesaplamıştır. Sonrasında veriler Graphpad Prism yazılımı kullanarak görselleştirilmiştir.

3.7 Glikoproteomik Deneyler İçin Süt Proteinlerinin Ekstraksiyonu

Süt proteinleri kloroform/merthanol ekstraksiyon yöntemi kullanarak ekstrakte edildi. Anne ve sığır sütünden 100 µL alınarak sırasıyla 100 µL kloroform, 300 µL su ve 400 µL metanol ile karıştırıldı. Sonrasında örnekler 14000 rcf hızında 5 dk. santrifüj edildi. Protein peleti üzerindeki süpernatant uzaklaştırıldı ve örnekler 400 µL metanol ilave edildi. Örnekler tekrar 14000 rcf'te 10 dakika santrifüj edildi. Dipte oluşan çökelti bir vakum konsantratör ile 5 dakika kurutuldu.

3.8 Proteinlerin Miktarlanması

Kloroform/metanol yöntemi ile ekstrakte edilen proteinler 100 µL 8M üre ile çözüldü. Örnekler iyice vortekslendikten sonra 20 kat seyreltildi ve BCA assay protokolüne uygun olarak BCA reaktifi ile karıştırıldı. Örnekler 37 °C'de 30 dk. inkübe edildi. Sonrasında spektrofotometrik yöntem ile örneklerin absorbansları belirlendi ve konsantrasyonları yazılım vasıtasıyla hesaplandı.

3.9 Proteinlerin Proteolitik Parçalanması

İlk olarak 600 µg süt proteini anne ve inek sütünden alınarak 8M üre ile eşit konsantrasyonlara getirildi. Sonrasında di-sülfid bağlarının indirgenmesi için son konsantrasyonu 10 mM DTT olacak şekilde 100 mM DTT'den örnekler ilave edildi ve tüm örnekler 37 °C'de bir saat inkübe edildi. Alkilasyon işlemi, 200 mM IAA stok çözeltisi kullanılarak örneklerin son konsantrasyonu 20 mM IAA olacak şekilde gerçekleştirildi. Bu işlem için örnekler, karanlıkta ve oda sıcaklığında 20 dakika bekletildi. Sonrasında son konsantrasyonu 5 mM DTT olacak şekilde 100 mM DTT'den tüm örnekler ilave edildi ve örnekler oda sıcaklığında 10 dakika inkübe edildi. Üre konsantrasyonu 25 mM amonyum bikarbonat (ABC) ile 1 M'ye seyreltildikten sonra örnekler 1:30 (w:w, enzim:protein) oranında tripsin enzimi ilave edildi. Sonrasında örnekler 16 saat 37 °C'de inkübe edildi.

3.10 Glikopeptitlerin Zenginleştirilmesi

Zenginleştirme işlemi öncesi örneklerden tuz giderimi işlemi yapıldı. Bu işlem 100 mg C18 sorbenti içeren katı faz ekstraksiyon işlemi ile yaygın olarak kullanılan tuz giderimi yöntemi takip edilerek gerçekleştirildi. Örnekler hızlı vakum konsantratör ile kurutulduktan sonra hidrofilik etikleşim prensibine (HILIC) dayalı zenginleştirme için uygun tamponda (250 µL, ACN/Su/TFA, 85/14/1) yeniden çözüldü. HILIC sorbenti olarak pamuk içeren bir pipet ucu hazırlandı. Bu işlem için 1 mL kapasiteli pipet ucu kullanılmıştır. Pamuk ince bir iğne yardımı ile pipet ucunun dip kısmına yerleştirildi. Sonrasında pipet ucu işlem öncesinde 3 kez 0.25 mL su ve 3 kez 85/14/1 ACN/Su/TFA ile yıkandı. Örnekler pipet ucuna 15 kez çekip bırakıldıktan sonra son kez çekilip 5 dk. inkübe edildi. Sonrasında pamuk içeren pipet uçları sırasıyla 5 kez 85/14/1 ACN/Su/TFA ve 5 kez 85/15, ACN/Su ile yıkandı. Glikopeptitlerin elüsyonu 0.25 mL 29/70/1, ACN/Su/TFA ile örnekler en az 10 kez çek bırak yapılarak gerçekleştirildi. Örnekler iki eşit hacme bölündükten sonra hızlı vakum konsantratör ile kurutuldu. 1. fraksiyon doğrudan glikopeptit analizlerinde 2. fraksiyon ise glikopeptitlerin deglikozilasyonu sonrasında deamidasyona uğramış peptitlerin kütle spektrometrik analizlerinde kullanıldı.

3.11 Glikopeptitlerin Deglikozilasyonu

Zenginleştirme işlem sonucunda elde edilen 2. fraksiyon 0.5 U PNGase F enzimi içeren 100 µL 25 mM ABC içinde çözüldü ve 37 °C'de bir gece inkübe edilerek deglikozilasyon işlemi gerçekleştirildi. Sonrasında örnekler hızlı vakum konsantrasyonunda kurutulduktan sonra %0,1 formik asit içerecek şekilde hazırlandı ve kütle spektrometrik analizleri nLC-ESI-ORBITRAP-MS/MS sistemi ile gerçekleştirildi.

3.12 nLC-ESI-ORBITRAP-MS/MS Analizleri

Örnekler, Ultimate 3000 RSLCnano sıvı kromatografisi sistemine (Dionex/Thermo Scientific) entegre Q-Exactive Plus (ORBITRAP) kütle spektrometresi (Thermo Scientific) ile analiz edildi. Kromatografik ayırma sisteminde Acclaim PepMap 100 tuzak kolonunun (100 µm × 2 cm, parçacık boyutu 5 µm, Dionex/Thermo Scientific) ve C18 EASY nano ayırma kolonu (75 µm × 50 cm, parçacık boyutu 2 µm, Dionex/Thermo Scientific) kullanılmıştır. Hareketli faz olarak A) (%0,1 Formik Asit çözeltisi) ve B) (%0,1'lik formik asit çözeltisi içeren %80 ACN) çözücülerini gradient elüsyon olarak kullanıldı. Gradient elüsyonda B çözücüsünün %3'ten %40'a lineer olarak 120 dakikada ulaşması şeklinde programlandı. nLC-Q-Exactive Plus analizlerinde tam kütle spektrumları 350-2000 *m/z* arasında alındı ve Top 5 maksimum başlangıç iyonunun seçimi ile gerçekleştirildi. AGC hedefi full MS modunda ve 70000 kütle ayırıcılığında 1*10⁶, MS/MS modunda ise 2*10⁵ olarak ayarlandı. Glikopeptit analizlerinde basamaklı parçalama yöntemi kullanılarak MS/MS spektrumları toplandı. sHCD değerleri sırasıyla 10, 20 ve 30 olarak ayarlandı. Ayrıca, sprey voltajı 2.4 kV, kapiler sıcaklığı 250 °C ayarlanarak analizler gerçekleştirildi.

3.13 nLC-ESI-ORBITRAP-MS/MS Veri Analizleri

Glikopeptitlerin zenginleştirilmesi sonrasında kütle spektrometrik analizler sonrasında elde edilen veriler MSFragger yazılımı kullanarak işlenmiştir (Polasky vd. 2020). Burada yazılımın glikopeptit analizlerinde kullandığı akış şeması (glyco-*N*-LFQ) takip edilmiştir. Bu akış şemasında glikopeptitlerin tespitinin yanı sıra etiketsiz miktarlamasını da yapılabilmektedir. Protein veri tabanı olarak daha önce çalışmalardan elde edilen verilere göre anne ve inek sütüne ait proteinleri içeren veri tabanları kullanılmıştır. MSFragger arama motorunda peptit ve fragment kütle toleransları 20 ppm olarak yazılıma tanıtılmıştır. Enzim olarak tripsin enzimi seçilmiştir. MS1 düzeyinde miktarlama için MaxLFQ yöntemi seçilmiştir. Kütle toleransı 10 pmm, alıkonma zamanı olarak 0.4 dk. olarak ayarlanmıştır. Veriler Microsoft Excel ile açılıp düzenlenmiştir. *N*-glikopeptitlerine ait MS/MS spektrumlarının görselleştirilmesi için PDV yazılımı kullanılmıştır (Li vd. 2019).

O-glikozilasyon analizlerinde Byonic (Protein Metrics, USA) yazılımı kullanılmıştır. Burada insan proteomunda yaygın olarak gözlemlenen O-glikanlar listeye dahil edilmiştir. Tripsin

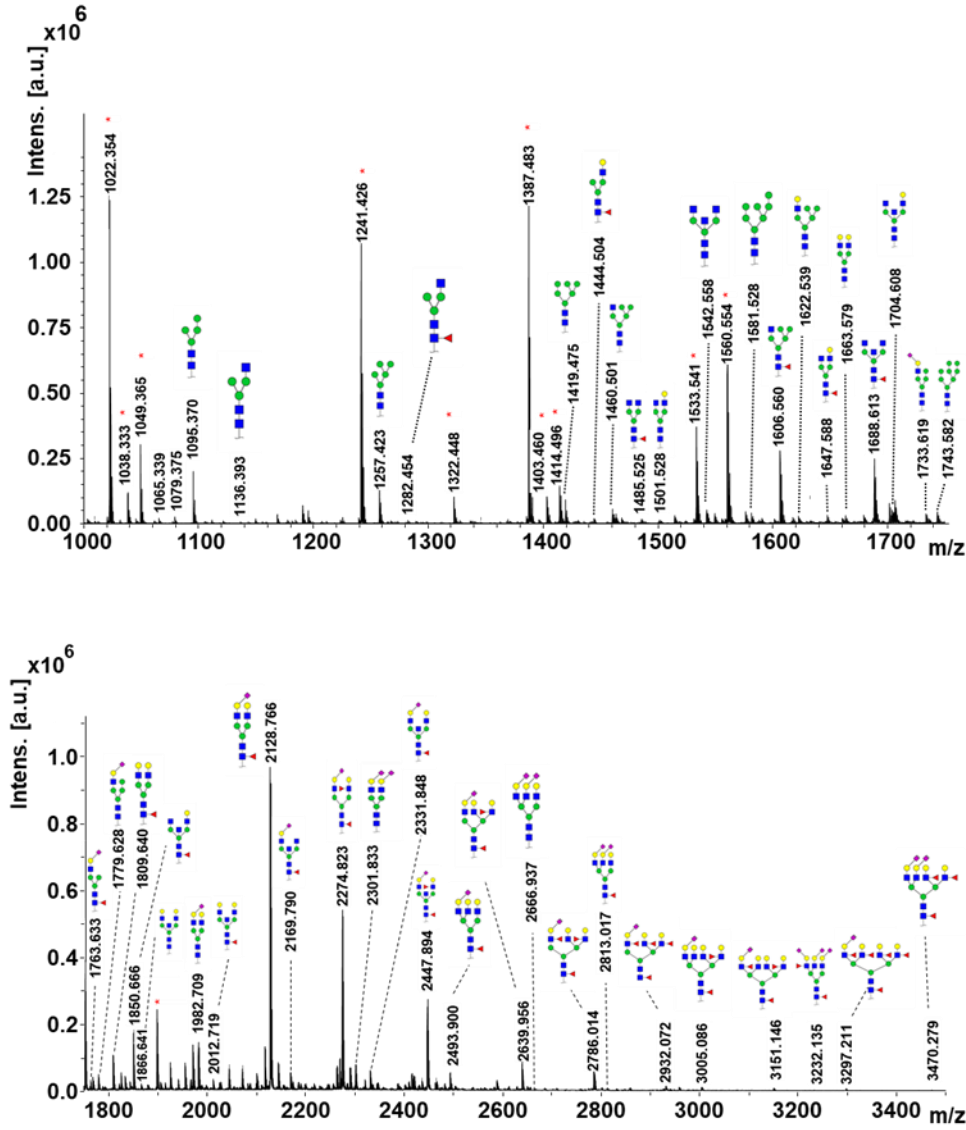
enzim olarak seçilmiştir. MS1 kütle toleransı olarak 10 ppm, MS2 kütle toleransı olarak 0.05 Da alınmıştır. Glikopeptitlere ait oksonyum iyonların filtrelemesi için temel oksonyum iyon pikleri yazılıma tanıtılmıştır. Elde edilen sonuçlar manuel olarak kontrol edildikten sonra potansiyel O-glikopeptitler listelenmiştir.

4. BULGULAR VE TARTIŞMA

4.1 Anne Sütü Whey *N*-glikomunun Analizi

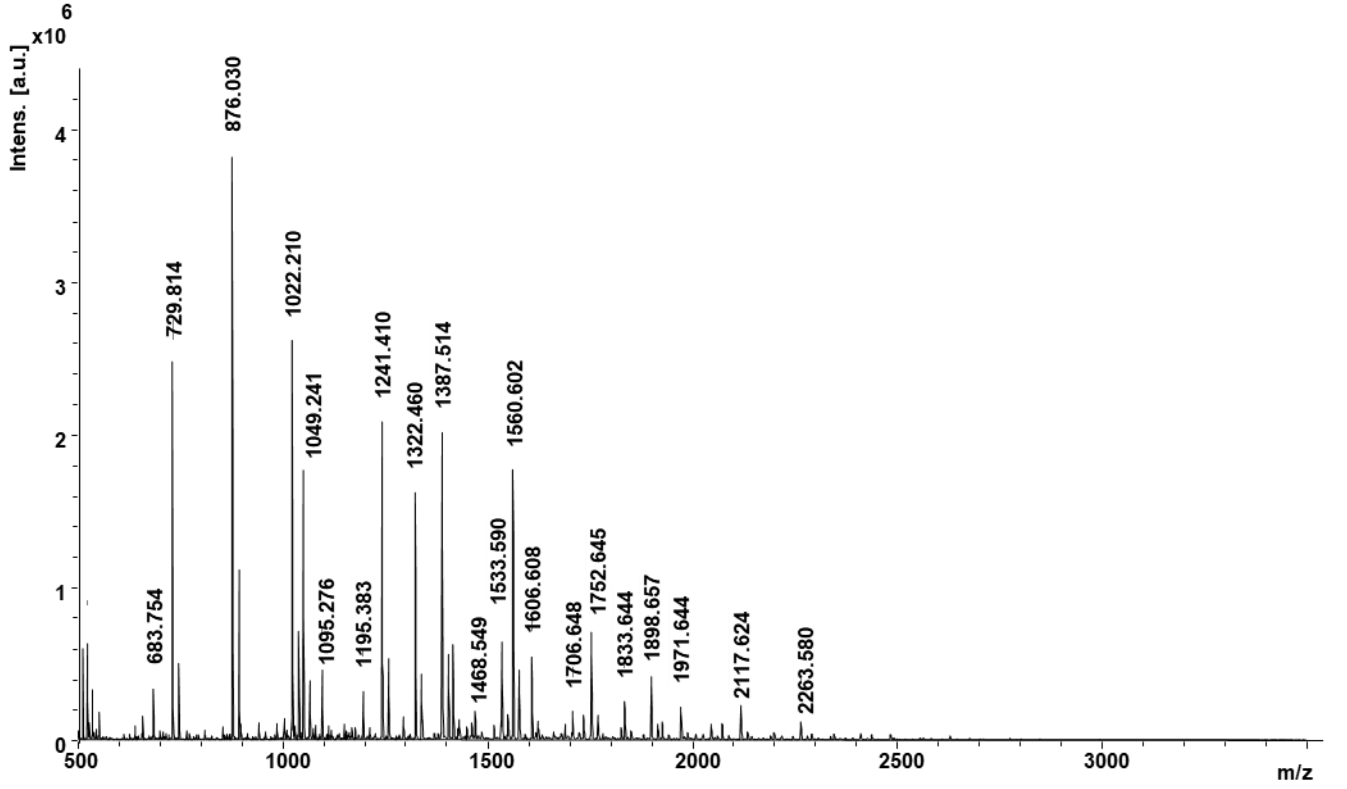
Anne sütü *N*-glikanlarının analizi deneysel kısımda belirtildiği gibi gerçekleştirildi. Yapılan çalışmalarda anne sütü için şekil 4.1 de gösterilen spektrum elde edilmiştir. Tespit edilen pikler değerlendirildiğinde *N*-glikan çekirdek yapısına uygun olmayan piklerin varlığı belirlendi. *N*-glikanlar için Hex3HexNAc2 (Hex: hekzos; HexNAc: *N*-asetil hekzos amin) genel çekirdek yapısıdır. Glikanlar bu yapıdan dallanarak farklı tiplerde oluşmaktadır. Bu durum insan sütü serbest oligosakkaritlerinin yeterince whey proteinlerinden ayırlamadığını göstermiştir. Nitekim anne sütü serbest oligosakkarit yapılarının süt içindeki konsantrasyonu 12-14 g/L olduğu belirtilmektedir (Coppa vd. 1999). Bu süt tipleri içerisinde en yüksek miktara sahip serbest süt oligosakkarit profilidir. Bu durumun giderilmesi amacıyla whey proteinleri %90 etanol içeren çözelti ile en az 5 kez yıkandı ve yeniden analiz edildi. Yapılan analizlerde serbest süt oligosakkaritlerin proteinlerden ayrılması sağlanamamıştır. Ayrıca, proteinler %2 SDS ile çözüldükten sonra 30 kDa cut-off (proteinlerin molekül ağırlarına göre ayırabilecek membranlar içeren tüplerdir) içerisine konuldu ve 2 kez %2 SDS ile proteinler yıkandı. Sonrasında proteinler cut-off lardan ekstrakte edilip analizleri belirlenen yöntemle gerçekleştirildi. Bu durumda da

serbest süt oligosakkaritlerin uzaklaşmaması sağlanamamıştır. Bu durum whey proteinleri ile serbest süt oligosakkaritleri arasında kuvvetli etkileşimin olduğunu bize göstermektedir.



Şekil 4. 1. Anne sütü whey N-glikom MALDI-MS spektrumu.*: Serbest süt oligosakkarit pikleridir. mavi kare: N-Asetil glukoz amin; sarı kare: N-asetil galaktoz amin; yeşil daire: mannoz; sarı daire: galaktoz; sağa yatık elmas: a2,6bağlı N-asetil nöraminik asit; sola yatık elmas: a2,3 bağli N-asetil nöraminik asit

Anne sütü serbest süt oligosakkarit piklerini tam olarak tespit etmek amacıyla whey proteinlerinin ekstraksiyonu sırasında üst fazda kalan kısım (süpernatant) kurutuldu ve 10 µL suda tekrar çözülmüştür. Deglikozilasyon aşaması yapılmaksızın bu örnekten 2 µL alınarak etil esterifikasyon işlemi yapılmıştır. Saflaştırma sonucunda elde edilen çözelti MALDI-MS ile analiz edilmiştir. Şekil 4.2.'de bu analiz sonucunda elde edilen bir spektrum görülmektedir. Burada tespit edilen piklerden whey N-glikomunda bulununlar kütle pikleri kıyaslanarak girişim yapan serbest süt oligosakkarit profiline ait pikler net olarak belirlenmiştir.



Şekil 4. 2. Anne sütü serbest süt oligosakkarit MALDI-MS profili.

Çalışmada tespit edilen pikler teker teker değerlendirilerek tablolaştırılmıştır. Anne sütüne ait belirlenen pikler tablo Tablo Ek'1 de görülmektedir. Aynı zamanda yapı doğrulamaları için LIFT(MS/MS) spektrumları elde edilmiştir. Spektrumlardan elde edilen parçalanma ürünleri glycoworkbench programına aktarılarak MS1 düzeyinde belirlenen potansiyel yapının teorik parçalanma ürünleri ile kıyaslanmıştır ve tabloda MS/MS piklerine ait eşleşmiş kütleler gösterilmiştir. Sonuç olarak anne sütü whey *N*-glikomuna ait 67 *N*-glikan tipi belirlenmiştir. Bu glikanların 14 tanesine ait MS/MS spektrumu yapı doğrulamaları için elde edilmiştir.

4.1.1 Anne Sütü Whey *N*-glikomunun Göreceli Bollukları

Tablo Ek1'de belirlenen her bir *N*-glikan yapısının spektrumda belirlenen alanı MassyTools yazılımına tanıtılarak ekstrakte edilmiştir. Ekstraksiyon sonrasında her bir *N*-glikanın göreceli bolluğu belirlenmiştir. Tablo 2.1'de 3 tekerrürlü işlemde elde edilmiş anne sütü *N*-glikanlarının göreceli bollukları verilmiştir.

Tablo 4. 1. Anne sütü *N*-glikanlarının ortalama göreceli bollukları. Tabloda 3 tekrara ait standart sapma (Std. Dev) ve yüzde göreceli standart sapma (% RSD) değerleri verilmektedir.

	<i>N</i> -glycan	Avg. Abn. %	Rel. Std. Dev.	RSD%
1*	H4N2	1.33	0.32	24.26

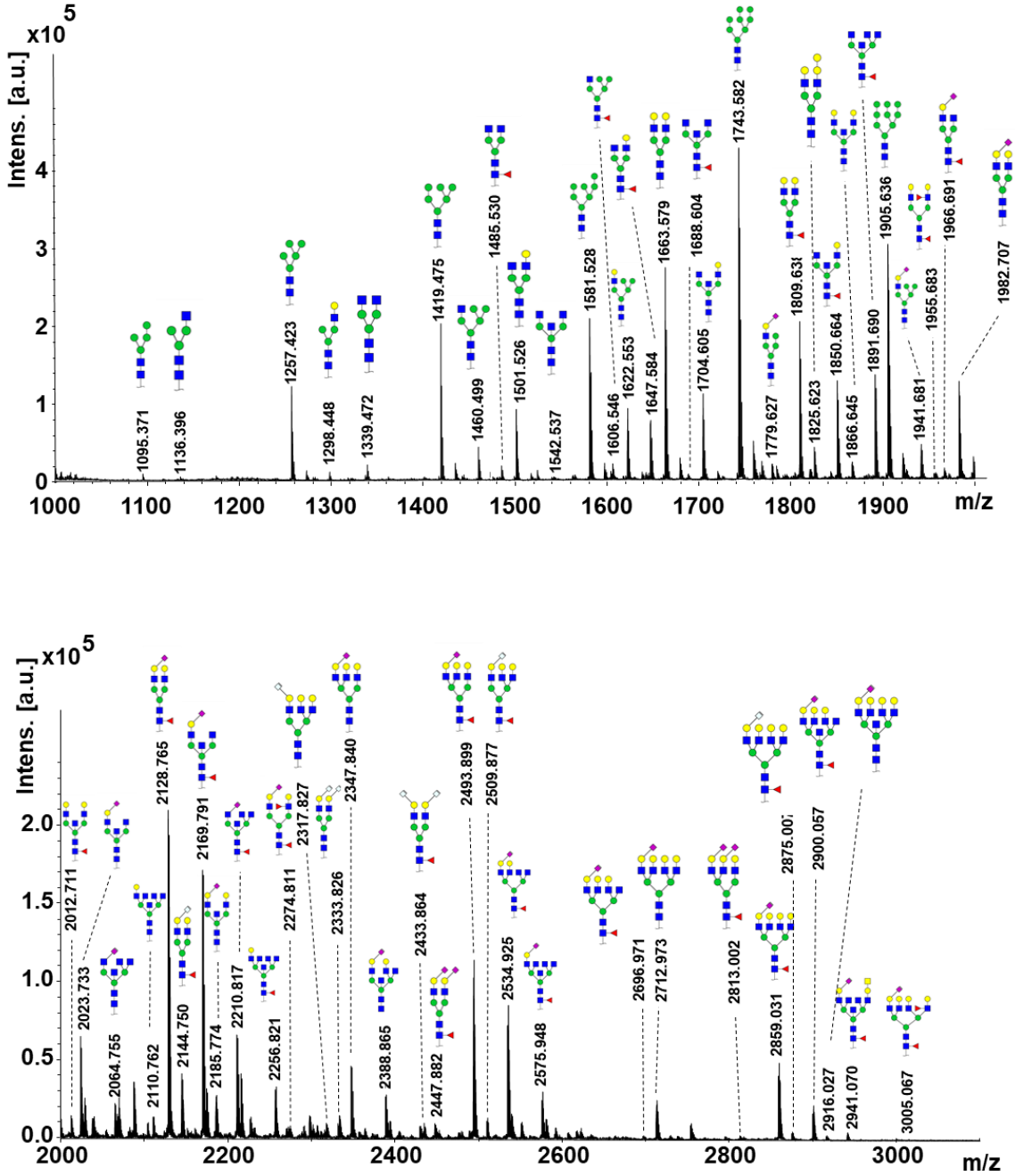
2*	H3N3	0.54	0.17	32.12
3*	H5N2	1.13	0.08	6.92
4	H3N3F1	0.51	0.11	20.82
5	H6N2	1.29	0.24	18.34
6	H4N3F1	0.80	0.14	17.26
7*	H5N3	1.16	0.14	11.80
8	H3N4F1	0.82	0.13	16.29
9	H4N4	0.78	0.16	20.48
10	H3N5	1.28	0.18	14.41
11	H7N2	1.08	0.21	19.85
12*	H5N3F1	3.33	0.53	16.03
13*	H4N3E1	1.06	0.22	21.02
14*	H6N3	0.88	0.12	13.28
15*	H4N4F1	0.92	0.11	12.39
16	H5N4	0.90	0.11	12.26
17	H3N5F1	2.89	0.07	2.50
18	H4N5	1.66	0.07	4.31
19*	H5N3L1	1.10	0.14	12.79
20	H8N2	1.15	0.19	16.96
21	H4N3F1E1	1.05	0.12	11.15
22*	H5N3E1	1.25	0.12	9.90
23	H5N4F1	1.72	0.04	2.15
24	H4N4E1	0.99	0.09	9.06
25*	H6N4	1.33	0.10	7.18
26*	H4N5F1	2.60	0.05	1.88
27	H5N5	0.97	0.05	5.66
28	H9N2	1.26	0.14	11.02
29*	H6N3E1	1.12	0.07	6.38
30	H4N4F1E1	1.23	0.04	3.33
31	H5N4E1	2.25	0.26	11.78
32	H5N5F1	1.20	0.06	5.40
33	H4N5E1	1.08	0.04	3.86
34	H5N4F1E1	11.77	2.52	21.44
35	H4N5F1E1	1.56	0.09	5.97
36	H5N5E1	1.42	0.32	22.63
37	H5N4E1L1	1.37	0.03	1.93
38	H5N4F2E1	7.83	1.81	23.12
39	H5N4E2	1.95	0.27	13.74
40	H5N5F1E1	1.91	0.18	9.28
41	H6N5E1	1.23	0.06	4.68
42	H5N4F1E1L1	1.23	0.05	4.05
43	H4N7E1	1.23	0.05	4.32
44	H5N4F1E2	4.34	1.20	27.62
45	H6N5F1E1	1.56	0.13	8.25
46	H5N5E2	1.20	0.22	18.20
47	H6N5L2	0.93	0.11	12.11
48	H6N5F2E1	1.97	0.33	16.66
49	H5N5F1E2	0.97	0.07	7.46
50	H6N5E2	0.86	0.12	13.48
51	H6N5F3E1	1.71	0.24	14.13
52*	H7N5F2E1	0.85	0.10	12.15
53	H6N5F1E2	0.83	0.12	14.20

54*	H8N6F2	0.79	0.15	18.55
55	H6N5F4E1	0.90	0.12	12.89
56	H6N5E2L1	0.77	0.14	18.00
57	H6N5E3	0.73	0.16	21.49
58	H7N6F2E1	0.81	0.13	15.48
59	H6N5F3E1L1	0.70	0.17	23.62
60	H6N5F1E2L1	0.70	0.15	21.43
61	H6N5F3E2	0.69	0.15	22.20
62	H6N5F1E3	0.69	0.17	24.29
63	H7N6F3E1	0.77	0.13	16.34
64	H6N5F2E2L1	0.67	0.16	24.21
65	H7N6F4E1	0.85	0.20	23.04
66	H8N7F2E1	0.79	0.21	26.80
67	H7N6F3E2	0.78	0.21	26.97

Elde edilen sonuçlara göre anne sütü whey *N*-glikomunda en bol miktarda bulunan *N*-glikan tipinin iki antenli ve α 2,6 bağlı *N*-asetil nöraminik asit içeren tipte olduğu belirlendi (H5N4F1E1, 11.77 %). Bu yapıya bir fukoz daha eklenmiş glikan tipi (H5N4F2E1, 7.83%), ikinci en bol bulunan glikan tipi olarak belirlendi. MALDI-MS analizlerinde *N*-glikan yapıları ile aynı *m/z*'ye sahip serbest süt oligosakkarit yapılarının girişimlerinin tablo incelendiğinde düşük olduğu, göreceli bolluklarının örtüşen türlerde düşük olmasından kaynaklı olarak söylenebilir.

4.2 İnek Sütü Whey *N*-glikomunun Analizi

Yapılan çalışmalarda inek sütüne ait 75 adet *N*-glikan yapısı tespit edilmiştir (Şekil 4.3). Anne sütü ile kıyaslandığında inek sütünde bulunan serbest süt oligosakkarit miktarının düşük olması nedeniyle sadece glikoproteinlere ait *N*-glikan yapıları spektrumda gözlenmiştir. Tespit edilen *N*-glikanların kütle bilgilerini içeren liste Tablo Ek2'de sunulmuştur. Yapılan MALDI-MS analizlerinde 19 adet *N*-glikan yapısının MS/MS düzeyinde doğrulaması yapılmıştır. Tablo Ek2'de belirlenen *N*-glikanlara ait teorik parçalanma ürünleri ile örtüşen MS/MS pikleri verilmektedir.



Şekil 4. 3. İnek sütü whey N-glikom MALDI-MS spektrumu. mavi kare: N-Asetil glukoz amin; sarı kare: N-asetil galaktoz amin; yeşil daire: mannoz; sarı daire: galaktoz; sağa yatık elmas: α 2,6bağlı N-asetil nöraminik asit; sola yatık elmas: α 2,3 bağli N-asetil nöraminik asit.

4.2.1 İnek Sütü Whey N-glikomunun Göreceli Bollukları

Tespit edilen her bir N-glikan yapısının göreceli bollukları, yöntem kısmında anlatıldığı gibi gerçekleştirildi. Tablo 2.2.'de tespit edilen her bir N-glikanın göreceli bollukları verilmektedir. Analizler sonucunda inek sütü whey N-glikomunda en bol miktarda yüksek mannoz tipli glikanların olduğu belirlendi (H8N2, %4.55; H9N2, %3.47). Bu N-glikanları karmaşık tipte olan ve α 2,6 bağli N-asetil nöraminik asit içeren iki antenli glikan izlemektedir (H5N4F1E1, %3.37).

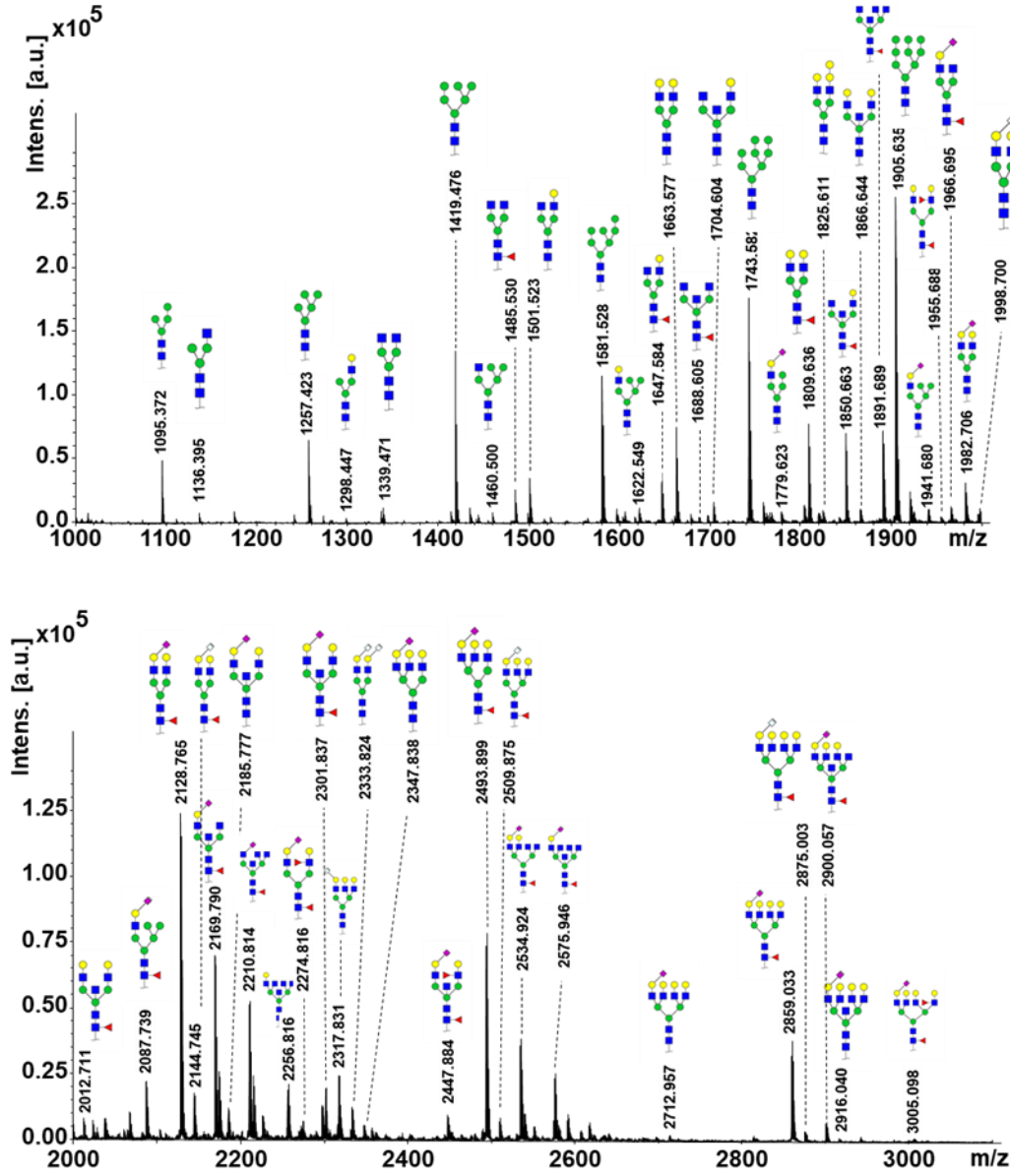
Tablo 4. 2. İnek sütü *N*-glikanlarının ortalama göreceli bollukları. Tabloda 3 tekrara ait standart sapma (Std. Dev) ve yüzde göreceli standart sapma (% RSD) değerleri verilmektedir.

		Avg. Rel. Abn. %	Std. Dev.	RSD%
1	H4N2	0.53	0.17	32.10
2	H3N3	0.58	0.19	33.27
3	H5N2	1.05	0.03	2.40
4	H3N3F1	0.55	0.17	30.99
5	H4N3	0.59	0.17	28.37
6	H3N4	0.86	0.22	25.59
7	H6N2	1.86	0.18	9.79
8	H4N3F1	0.84	0.20	24.19
9	H5N3	0.98	0.14	14.51
10	H3N4F1	0.85	0.17	19.89
11	H4N4	1.23	0.01	0.90
12	H3N5	0.82	0.19	23.05
13	H7N2	2.07	0.30	14.68
14	H5N3F1	1.06	0.12	11.41
15	H6N3	1.39	0.06	4.57
16	H4N4F1	1.31	0.04	2.83
17	H5N4	2.53	0.63	24.97
18	H3N5F1	0.87	0.15	17.60
19	H4N5	1.57	0.10	6.36
20	H8N2	4.55	1.23	26.94
21	H6N3F1	1.09	0.11	9.73
22	H5N3E1	1.01	0.13	12.57
23	H5N4F1	2.33	0.54	23.28
24	H4N4E1	1.03	0.11	10.77
25	H6N4	1.20	0.03	2.66
26	H4N5F1	1.97	0.20	10.36
27	H5N5	1.05	0.09	8.11
28	H3N6F1	2.20	0.21	9.76
29	H9N2	3.47	0.98	28.32
30	H6N3E1	1.23	0.01	1.07
31	H5N4F2	0.93	0.10	11.26
32	H4N4F1E1	1.09	0.11	10.04
33	H5N4E1	2.08	0.26	12.41
34	H5N4Ge1	1.11	0.07	5.88
35	H5N5F1	0.98	0.08	7.88
36	H4N5E1	1.60	0.07	4.62
37	H4N6F1	0.91	0.13	14.88
38	H3N6E1	1.15	0.07	5.98
39	H5N4F1G1	0.84	0.14	16.40
40	H4N7	1.00	0.11	10.57
41	H5N4F1E1	3.37	0.51	15.17
42	H5N4F1Ge1	1.27	0.13	10.26
43	H4N5F1E1	3.17	0.37	11.58
44	H5N5E1	1.21	0.13	10.51
45	H3N6F1E1	1.82	0.14	7.42
46	H4N7F1	1.46	0.01	0.86

47	H5N4F2E1	1.10	0.15	13.76
48	H5N4Ge1Gl1	1.10	0.12	10.56
49	H5N4E2	1.09	0.12	11.04
50	H6N5Gl1	1.09	0.11	10.39
51	H5N5F1E1	1.19	0.09	7.44
52	H5N4Ge2	1.14	0.10	8.55
53	H6N5E1	1.59	0.06	4.06
54	H3N6F2E1	1.03	0.15	14.26
55	H4N6F1E1	1.01	0.15	14.64
56	H5N6E1	1.36	0.05	3.36
57	H5N4F1E1L1	1.00	0.16	15.73
58	H4N7E1	1.05	0.13	12.44
59	H5N4F1Ge1Gl1	1.04	0.10	9.69
60	H5N4F1E2	1.09	0.12	11.14
61	H5N6F1L1	1.04	0.14	13.79
62	H6N5F1E1	2.52	0.34	13.54
63	H6N5F1Ge1	1.04	0.11	10.19
64	H5N6F1E1	2.19	0.21	9.42
65	H4N7F1E1	1.36	0.03	1.97
66	H5N8F1	0.96	0.13	13.14
67	H6N6F1E1	0.84	0.15	18.26
68	H7N6E1	1.12	0.04	3.92
69	H6N5F1E2	0.81	0.17	21.17
70	H7N6F1E1	1.40	0.06	4.23
71	H7N6F1Ge1	0.82	0.15	18.10
72	H6N7F1E1	1.04	0.09	8.92
73	H7N7E1	0.79	0.17	21.55
74	H5N8F1E1	0.80	0.17	21.00
75	H7N6F2E1	0.72	0.19	25.89

4.3 Manda Sütü Whey *N*-glikomunun Analizi

Manda sütüne ait 71 adet *N*-glikan yapısı tespit edilmiştir (Şekil 2.3). Tespit edilen *N*-glikanların kütle bilgilerini içeren liste Tablo Ek3'de sunulmuştur. Yapılan MALDI-MS analizlerinde 15 adet *N*-glikan yapısının MS/MS düzeyinde doğrulaması yapılmıştır. Tablo Ek3'de belirlenen *N*-glikanlara ait teorik parçalanma ürünleri ile örtüşen MS/MS pikleri verilmektedir.



Şekil 4. 4. Manda sütü whey *N*-glikom MALDI-MS spektrumu. mavi kare: *N*-Asetil glukoz amin; sarı kare: *N*-asetil galaktoz amin; yeşil daire: mannoz; sarı daire: galaktoz; sağa yatık elmas: α 2,6bağlı *N*-asetil nöraminikasıit; sola yatık elmas: α 2,3 bağli *N*-asetil nöraminikasıit.

4.3.1 Manda Sütü Whey *N*-glikomunun Göreceli Bollukları

Tablo 4.3.'de tespit edilen her bir *N*-glikanın göreceli bollukları verilmektedir. Analizler sonucunda manda sütü whey *N*-glikomunda en bol miktarda inek sütünde olduğu gibi yüksek mannoz tipli glikanların olduğu belirlendi (H9N2, %6.20; H8N2, %3,87). Bu *N*-glikanları karmaşık tipte olan ve α 2,6 bağli *N*-asetil nöraminik asit içeren iki antenli glikan izlemektedir (H5N4F1E1, %3.54). Manda sütü *N*-glikan tipleri ve göreceli bollukları inek sütü whey *N*-glikomu ile kıyaslandığında çoğunlukla örtüşmektedir.

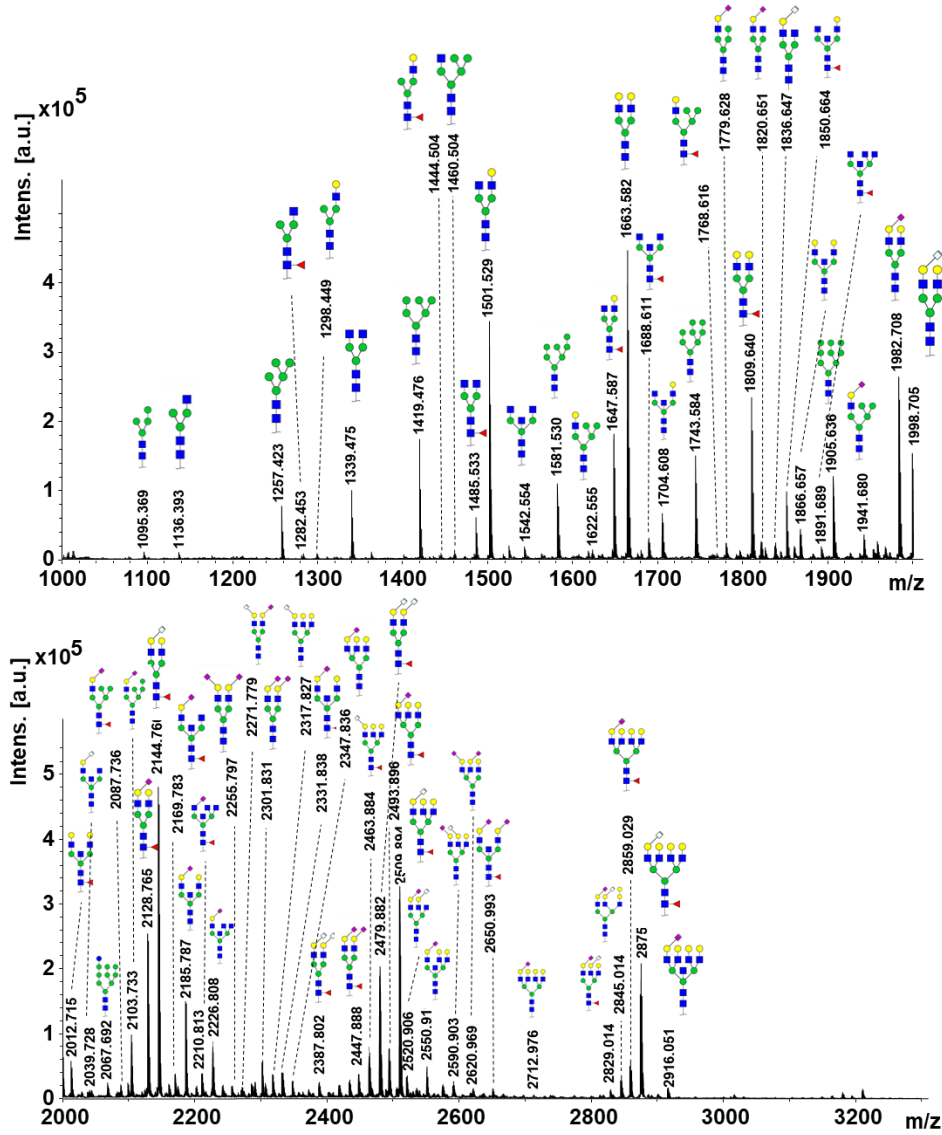
Tablo 4. 3. Manda sütü *N*-glikanlarının ortalama göreceli bollukları. Tabloda 3 tekrara ait standart sapma (Std. Dev) ve yüzde göreceli standart sapma (% RSD) değerleri verilmektedir.

		Avg. Rel. Abn.	Std. Dev.	RSD%
1	H4N2	0.84	0.05	6.52
2	H3N3	0.64	0.10	15.49
3	H5N2	1.15	0.07	6.50
4	H4N3	0.59	0.09	14.53
5	H3N4	0.89	0.10	11.21
6	H6N2	2.18	0.05	2.17
7	H4N3F1	0.88	0.13	14.33
8	H5N3	0.85	0.11	12.92
9	H3N4F1	0.99	0.04	3.90
10	H4N4	1.12	0.04	3.49
11	H7N2	2.43	0.07	2.79
12	H5N3F1	1.04	0.11	10.57
13	H6N3	1.02	0.11	10.49
14	H4N4F1	1.23	0.01	1.18
15	H5N4	1.63	0.19	11.79
16	H3N5F1	0.87	0.08	8.87
17	H4N5	1.02	0.05	5.02
18	H8N2	3.87	0.05	1.37
19	H6N3F1	1.11	0.11	10.17
20	H5N3E1	1.01	0.09	8.48
21	H5N4F1	2.15	0.10	4.64
22	H4N4E1	1.09	0.06	5.68
23	H6N4	1.04	0.06	5.59
24	H4N5F1	2.08	0.12	5.70
25	H5N5	1.04	0.03	2.68
26	H3N6F1	2.17	0.21	9.81
27	H9N2	6.20	0.15	2.47
28	H6N3E1	1.08	0.05	4.19
29	H5N4F2	0.99	0.08	7.68
30	H4N4F1E1	1.21	0.03	2.38
31	H5N4E1	1.45	0.04	2.52
32	H5N4Ge1	1.07	0.04	4.03
33	H5N5F1	1.03	0.04	4.09
34	H4N5E1	1.00	0.05	5.19
35	H3N6E1	1.03	0.05	4.77
36	H6N3F1E1	1.32	0.02	1.81
37	H5N4F1E1	3.54	0.41	11.67
38	H5N4F1Ge1	1.16	0.07	6.06
39	H4N5F1E1	2.46	0.28	11.19
40	H6N5F1	1.58	0.05	3.45

41	H5N5E1	1.11	0.03	2.70
42	H3N6F1E1	2.10	0.29	13.75
43	H5N6F1	1.51	0.07	4.54
44	H4N6E1	1.07	0.03	2.67
45	H4N7F1	1.67	0.06	3.61
46	H5N4F2E1	1.24	0.04	3.29
47	H5N4E2	1.39	0.12	8.29
48	H6N5G1	1.50	0.16	10.51
49	H5N5F1E1	1.26	0.06	4.43
50	H5N4Ge2	1.23	0.06	5.26
51	H6N5E1	1.16	0.04	3.34
52	H3N6F2E1	1.11	0.04	3.83
53	H4N6F1E1	1.09	0.06	5.66
54	H5N4F1E1L1	1.05	0.07	6.40
55	H5N4F1E2	1.22	0.03	2.30
56	H5N6F1L1	1.12	0.04	3.61
57	H6N5F1E1	3.40	0.27	7.83
58	H6N5F1Ge1	1.11	0.01	1.10
59	H5N6F1E1	2.13	0.14	6.64
60	H6N6E1	1.06	0.03	2.76
61	H4N7F1E1	1.67	0.11	6.41
62	H3N8F1E1	1.09	0.02	2.02
63	H5N8F1	0.96	0.05	5.60
64	H7N6E1	0.87	0.06	6.88
65	H6N5F1E2	0.83	0.07	8.87
66	H7N6F1E1	1.84	0.17	9.07
67	H7N6F1Ge1	0.85	0.04	4.65
68	H6N7F1E1	0.97	0.05	4.83
69	H7N7E1	0.79	0.07	8.42
70	H5N8F1E1	0.79	0.07	8.54
71	H7N6F2E1	0.76	0.07	8.78

4.4 Keçi Sütü Whey *N*-glikomunun Analizi

Keçi sütüne ait 99 adet *N*-glikan yapısı tespit edilmiştir (Şekil 4.4). Tespit edilen *N*-glikanların kütle bilgilerini içeren liste Tablo Ek4'de sunulmuştur. Yapılan MALDI-MS analizlerinde 29 adet *N*-glikan yapısının MS/MS düzeyinde doğrulaması yapılmıştır. Tablo Ek4'de belirlenen *N*-glikanlara ait teorik parçalanma ürünleri ile örtüşen MS/MS pikleri verilmektedir. Glikan tipi ve çeşitliliği açısından en fazla çeşitlilik keçi sütünde belirlenmiştir.



Şekil 4. 5. Keçi sütü whey N-glikom MALDI-MS spektrumu. mavi kare: *N*-Asetil glukoz amin; sarı kare: *N*-asetil galaktoz amin; yeşil daire: mannoz; sarı daire: galaktoz; sağa yatık elmas: a2,6bağlı *N*-asetil nöraminik asit; sola yatık elmas: a2,3 bağli *N*-asetil nöraminik asit.

4.4.1 Keçi Sütü Whey *N*-glikomunun Göreceli Bollukları

Tablo 4.4.'de tespit edilen her bir *N*-glikanın göreceli bollukları verilmektedir. Analizler sonucunda en bol miktardan bulunan *N*-glikan tipleri α 2,6 bağli *N*-glikozil nöramönik asit içeren ve sırasıyla iki ve üç antenli karmaşık tipte *N*-glikanların yüksek oranda bulunduğu belirlenmiştir (H5N4F1Ge1, %4,87; H6N5F1Ge1, %4,08). Bu *N*-glikan tiplerini iki adet α 2,6 bağli *N*-glikozil nöramönik asit içeren H5N4Ge2 (%2,74) tipi izlemektedir.

Tablo 4. 4. Keçi sütü *N*-glikanlarının ortalama göreceli bollukları. Tabloda 3 tekrara ait standart sapma (Std. Dev) ve yüzde göreceli standart sapma (% RSD) değerleri verilmektedir.

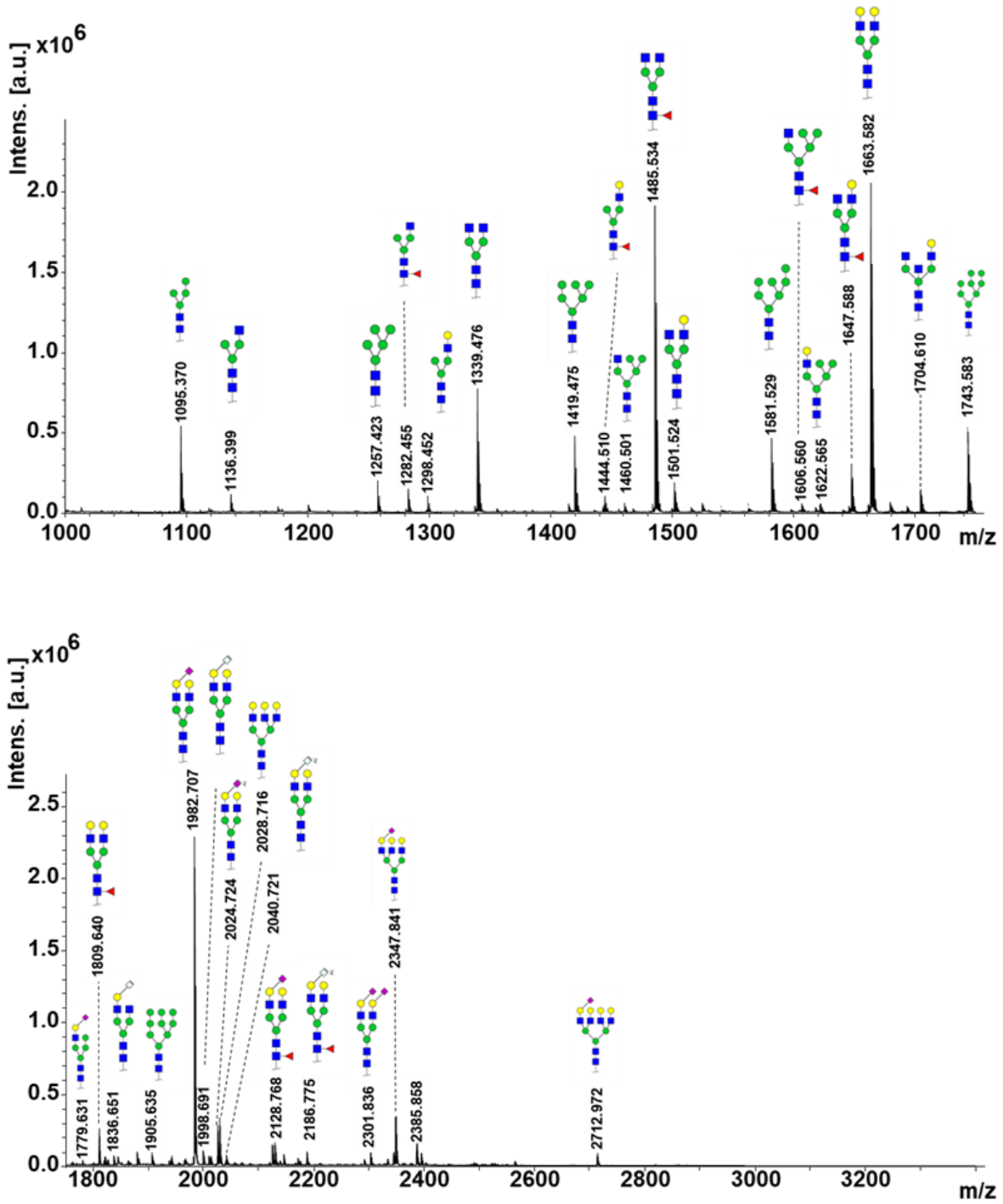
		Avg. Rel. Abn.	Std. Dev.	RSD%
1	H4N2	0.32	0.10	31.36
2	H3N3	0.38	0.11	29.51
3	H5N2	0.53	0.05	10.12
4	H3N3F1	0.33	0.10	30.59
5	H4N3	0.34	0.09	27.91
6	H3N4	0.75	0.04	5.95
7	H6N2	1.09	0.14	12.94
8	H4N3F1	0.47	0.10	22.09
9	H5N3	0.44	0.09	19.95
10	H3N4F1	0.65	0.06	9.51
11	H4N4	1.71	0.23	13.17
12	H3N5	0.53	0.09	17.32
13	H7N2	0.92	0.11	12.03
14	H4N3E1	0.54	0.11	20.77
15	H6N3	0.50	0.09	17.26
16	H4N4F1	1.27	0.10	8.17
17	H5N4	2.52	0.50	19.91
18	H3N5F1	0.59	0.05	8.86
19	H4N5	0.76	0.03	4.37
20	H8N2	1.17	0.19	15.83
21	H6N3F1	0.52	0.07	13.86
22	H5N3E1	0.63	0.09	14.74
23	H5N4F1	1.77	0.25	14.10
24	H4N4E1	0.74	0.05	6.55
25	H6N4	0.62	0.09	14.79
26	H4N4Ge1	0.67	0.05	7.58
27	H4N5F1	1.07	0.07	6.14
28	H5N5	0.78	0.04	5.57
29	H3N6F1	0.63	0.04	6.77
30	H9N2	1.20	0.20	16.98
31	H6N3E1	0.77	0.05	6.00
32	H5N4GI1	0.64	0.05	7.99
33	H4N4F1E1	0.70	0.07	9.36
34	H5N4E1	2.35	0.29	12.13
35	H5N4Ge1	1.64	0.13	8.15
36	H5N5F1	0.95	0.04	3.93
37	H4N5Ge1	0.65	0.06	9.32
38	H10N2	0.68	0.03	4.73
39	H5N4F1L1	0.66	0.06	8.92
40	H6N3F1E1	0.70	0.04	5.70
41	H5N4F1GI1	0.73	0.04	5.63

42	H7N3E1	1.27	0.09	6.92
43	H5N4F1E1	2.70	0.37	13.59
44	H5N4F1Ge1	4.87	0.69	14.17
45	H6N4Ge1	0.89	0.14	16.07
46	H4N5F1E1	1.00	0.04	3.95
47	H5N5E1	1.95	0.15	7.47
48	H5N5Ge1	0.80	0.06	7.26
49	H3N6F1E1	1.04	0.07	6.99
50	H3N6F1Ge1	1.43	0.08	5.76
51	H5N4GI2	0.81	0.06	7.26
52	H4N4F1E1GI1	0.95	0.07	7.50
53	H5N4E1GI1	0.97	0.11	10.80
54	H4N4F1E2	1.18	0.20	17.16
55	H6N4F1E1	0.93	0.06	6.04
56	H5N4E2	1.35	0.08	5.94
57	H6N4F1Ge1	0.92	0.06	6.80
58	H6N5GI1	1.10	0.06	5.06
59	H5N5F1E1	1.26	0.05	4.03
60	H5N4Ge2	1.02	0.06	5.43
61	H6N5E1	0.95	0.06	6.59
62	H3N6F2E1	0.83	0.07	8.47
63	H5N4F1L1GI1	0.86	0.08	9.53
64	H5N4F1GI2	0.95	0.05	5.23
65	H5N4F1E1L1	0.80	0.09	10.95
66	H5N4F1E1GI1	0.95	0.09	9.46
67	H5N4F1Ge1GI1	0.97	0.06	6.34
68	H5N4F1E2	1.13	0.08	7.10
69	H6N5F1GI1	1.45	0.08	5.60
70	H5N4Ge2	2.74	0.35	12.92
71	H4N5F1E2	0.92	0.09	10.07
72	H6N5F1E1	1.60	0.08	5.04
73	H5N5E2	0.98	0.06	5.82
74	H6N5F1Ge1	4.08	0.79	19.45
75	H5N5E1Ge1	1.06	0.06	5.50
76	H5N6F1E1	0.90	0.06	6.37
77	H6N6E1	1.16	0.01	1.17
78	H5N4E2L1	0.95	0.08	8.16
79	H6N5L1GI1	1.06	0.07	6.27
80	H6N5E1L1	0.91	0.19	20.29
81	H5N5F1E2	0.84	0.14	16.61
82	H5N5F1E1Ge1	0.68	0.10	14.69
83	H6N5E1Ge1	0.61	0.09	15.01
84	H6N6F1E1	0.61	0.09	14.16
85	H7N6E1	0.61	0.09	15.50
86	H6N5F1E2	0.58	0.07	12.85

87	H8N5F1E1	0.55	0.07	13.62
88	H6N5F1E1Ge1	0.66	0.06	8.43
89	H7N5E1Ge1	0.85	0.01	0.87
90	H7N6F1E1	1.11	0.05	4.79
91	H7N6F1Ge1	2.39	0.43	17.85
92	H6N7F1E1	0.61	0.06	10.04
93	H7N7E1	0.65	0.06	8.77
94	H6N5F1E2Ge1	0.44	0.08	17.85
95	H6N5F1E1Ge2	0.44	0.07	16.52
96	H7N5E1Ge2	0.47	0.07	14.00
97	H7N6F1E1Ge1	0.44	0.08	17.26
98	H7N6F1Ge2	0.50	0.06	12.62
99	H7N7E1Ge1	0.40	0.08	19.36

4.5 Eşek Sütü Whey *N*-glikomunun Analizi

Eşek sütüne ait 66 adet *N*-glikan yapısı tespit edilmiştir (Şekil 4.5). Tespit edilen *N*-glikanların kütle bilgilerini içeren liste Tablo Ek5’de sunulmuştur. Yapılan MALDI-MS analizlerinde 28 adet *N*-glikan yapısının MS/MS düzeyinde doğrulaması yapılmıştır. Tablo Ek5’de belirlenen *N*-glikanlara ait teorik parçalanma ürünleri ile örtüşen MS/MS pikleri verilmektedir.



Şekil 4. 6. Eşek sütü whey N-glikom MALDI-MS spektrumu. mavi kare: N-Asetil glukoz amin; sarı kare: N-asetil galaktoz amin; yeşil daire: mannoz; sarı daire: galaktoz; sağa yatık elmas: a2,6bağlı N-asetil nöraminik asit; sola yatık elmas: a2,3 bağli N-asetil nöraminik asit.

4.5.1 Eşek Sütü Whey N-glikomunun Göreceli Bollukları

Tablo 4.5.'de tespit edilen her bir N-glikanın göreceli bollukları verilmektedir. Analizler sonucunda en bol bulunan glikan tipinin α 2,6 bağli N-asetil nöraminik asit içeren iki antenli glikan olduğu belirlendi (H5N4E1, %7,66). Bu N-glikan tipini sırasıyla iki antenli bir glikan

(H5N4, %5,91) ve α 2,6 bağılı *N*-glikozil nöramonik asit içeren iki antenli bir glikan yapısı (H5N4F1Ge1) izlemektedir.

Tablo 4. 5. Eşek sütü *N*-glikanlarının ortalama göreceli bollukları. Tabloda 3 tekrara ait standart sapma (Std. Dev) ve yüzde göreceli standart sapma (% RSD) değerleri verilmektedir.

		Avg. Rel. Abn.	Std. Dev.	RSD%
1	H4N2	1.19	0.84	70.74
2	H3N3	0.67	0.27	39.94
3	H5N2	0.78	0.13	17.02
4	H3N3F1	0.71	0.27	38.65
5	H4N3	0.60	0.21	35.57
6	H3N4	1.58	0.42	26.63
7	H6N2	1.56	0.17	10.94
8	H4N3F1	0.86	0.27	30.88
9	H5N3	0.77	0.28	35.96
10	H3N4F1	3.41	2.42	70.86
11	H4N4	1.70	0.80	47.34
12	H7N2	1.67	0.45	26.90
13	H5N3F1	0.86	0.24	27.79
14	H4N3E1	0.81	0.23	27.83
15	H6N3	0.81	0.21	26.16
16	H4N4F1	1.81	0.29	15.88
17	H5N4	5.91	2.27	38.33
18	H4N5	1.20	0.11	9.13
19	H8N2	2.16	0.59	27.48
20	H6N3F1	0.87	0.21	24.65
21	H5N3E1	0.91	0.18	19.42
22	H5N4F1	2.05	0.70	34.04
23	H4N4E1	1.05	0.14	12.97
24	H6N4	0.91	0.16	17.65
25	H4N4Ge1	1.01	0.21	20.89
26	H4N5F1	1.22	0.34	27.77
27	H4N4E1Ac1	0.95	0.19	20.23
28	H9N2	1.51	0.32	21.35
29	H5N4L1	0.94	0.16	17.32
30	H5N4F2	0.95	0.12	12.70
31	H4N4F1E1	1.05	0.13	12.27
32	H5N4E1	7.66	2.93	38.29
33	H5N4Ge1	1.65	0.65	39.55
34	H4N4F1E1Ac1	1.08	0.23	21.64
35	H5N5F1	1.27	0.09	6.72
36	H5N4E1Ac1	1.62	0.58	36.04
37	H6N5	1.43	0.51	35.87

38	H5N4Ge1Ac1	1.19	0.37	31.18
39	H10N2	0.98	0.13	13.07
40	H5N4F1E1	2.60	1.45	55.72
41	H5N4F1Ge1	3.63	3.37	92.73
42	H5N4F1E1Ac1	1.21	0.09	7.08
43	H5N4F1Ge1Ac1	1.71	0.48	28.05
44	H3N6F1E1	1.13	0.25	21.74
45	H6N4F1E1	1.25	0.12	9.65
46	H5N4E2	1.63	0.24	14.70
47	H6N5G1	1.26	0.25	19.57
48	H6N4F1E1Ac1	1.41	0.21	14.63
49	H5N4E2Ac1	1.67	0.51	30.66
50	H6N5E1	2.00	0.56	28.13
51	H6N5G1Ac1	1.11	0.21	18.63
52	H5N4E2Ac2	1.86	0.56	30.07
53	H7N6	1.21	0.29	23.71
54	H5N4F1E1L1	1.14	0.24	20.95
55	H5N4F1E2	1.23	0.30	24.57
56	H7N5G1	2.27	1.73	76.37
57	H5N6F1L1	1.18	0.25	20.83
58	H6N5F1E1	1.53	0.68	44.37
59	H5N4F1Ge2Ac1	1.17	0.20	17.20
60	H5N4F1Ge2Ac2	1.07	0.22	20.57
61	H6N5E2	0.91	0.19	20.91
62	H7N6E1	1.12	0.35	31.32
63	H8N5F1E1	0.86	0.22	25.50
64	H7N6F1E1	1.28	0.52	40.41
65	H8N6E1	2.36	2.05	86.86
66	H10N6F1E1	0.84	0.29	34.74

4.6 Glikomik Düzeyde Türler Arasında Kıyaslamalar

4.6.1 Nitelik bakımından değerlendirme

İlk olarak tespit edilen *N*-glikanlar tiplerine göre türler arasında değerlendirildi. Toplam 152 adet farklı *N*-glikan tipi, 5 farklı türün whey *N*-glikomlarından belirlendi (Tablo 4.6). Tespit edilen *N*-glikan havuzu içerisinde türlere özgü olarak sırasıyla insan için 20, sığır için 4, manda için 4, keçi için 31 ve eşek için 18 glikan tipi bulunmuştur (Tablo Ek6). Ayrıca türler arasında örtüşen *N*-glikan tiplerinin listesi, Tablo Ek7’de verilmektedir. Anne sütü ile inek sütü kıyaslandığında 43 adet *N*-glikan tipi örtüşmektedir. Manda ile anne sütü arasında toplam 40 adet *N*-glikan tipi ortak olarak belirlenmiştir. Keçi ile anne sütü arasında ortak 41 *N*-glikan tipi belirlenmiştir. Anne, inek ve manda sütleri arasında 40 adet *N*-glikan tipinin ortak olduğu bulunmuştur. Yoğun olarak tüketilen inek, manda ve keçi sütlerinde tespit edilen ortak *N*-glikan sayısı 53’tür. Tablo 2.6’da tespit edilen *N*-glikan tiplerinin türler arasındaki durumu verilmektedir.

Tablo 4. 6. Tespit edilen *N*-glikanların türlere göre dağılımı.

			Türler				
			İnsan	Sığır	Manda	Keçi	Eşek
	Glikan Bileşimi	Teorik Kütle (Da)					
1	H4N2	1095.370	x	x	x	x	x
2	H3N3	1136.386	x	x	x	x	x
3	H5N2	1257.423	x	x	x	x	x
4	H3N3F1	1282.447	x	x		x	x
5	H4N3	1298.448		x	x	x	x
6	H3N4	1339.472		x	x	x	x
7	H6N2	1419.475	x	x	x	x	x
8	H4N3F1	1444.504	x	x	x	x	x
9	H5N3	1460.500	x	x	x	x	x
10	H3N4F1	1485.525	x	x	x	x	x
11	H4N4	1501.527	x	x	x	x	x
12	H3N5	1542.558	x	x		x	
13	H7N2	1581.530	x	x	x	x	x
14	H5N3F1	1606.560	x	x	x		x
15	H4N3E1	1617.577	x			x	x
16	H6N3	1622.539	x	x	x	x	x
17	H4N4F1	1647.588	x	x	x	x	x
18	H5N4	1663.579	x	x	x	x	x
19	H3N5F1	1688.613	x	x	x	x	
20	H4N5	1704.595	x	x	x	x	x
21	H5N3L1	1733.619	x				

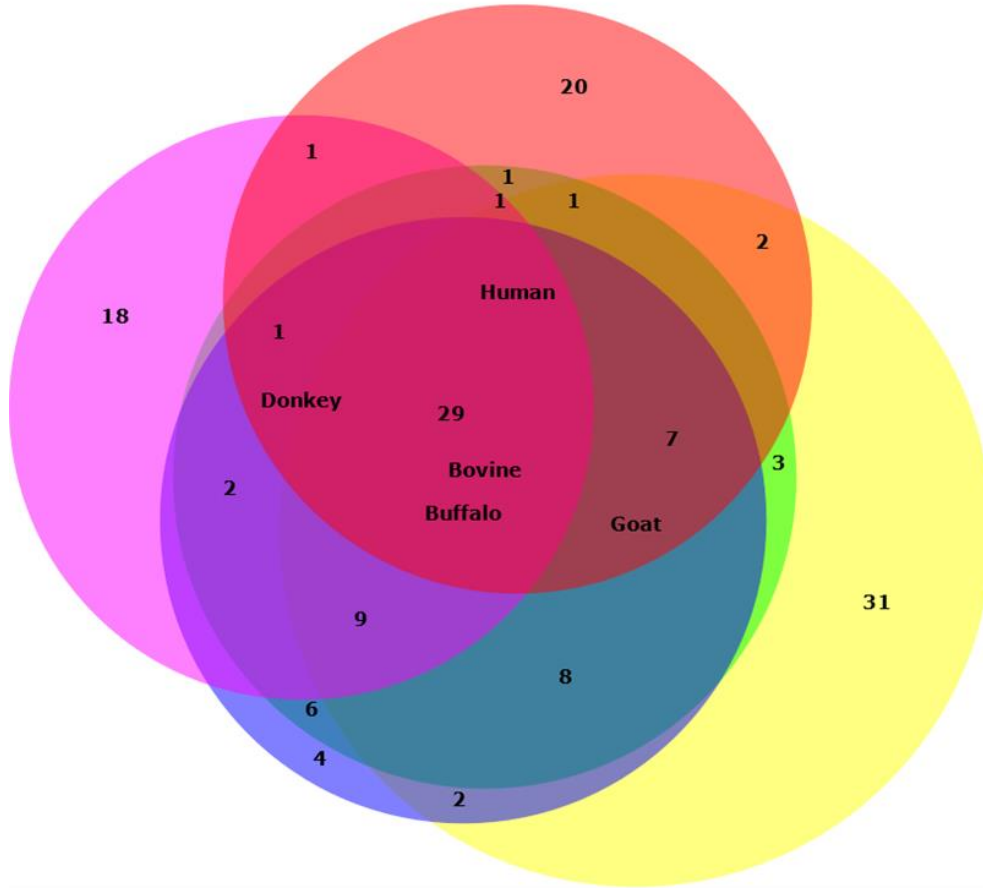
22	H8N2	1743.582	x	x	x	x	x
23	H4N3F1E1	1763.633	x				
24	H6N3F1	1768.605		x	x	x	x
25	H5N3E1	1779.628	x	x	x	x	x
26	H5N4F1	1809.640	x	x	x	x	x
27	H4N4E1	1820.658	x	x	x	x	x
28	H6N4	1825.634	x	x	x	x	x
29	H4N4Ge1	1836.650				x	x
30	H4N5F1	1850.666	x	x	x	x	x
31	H4N4E1Ac1	1862.660					x
32	H5N5	1866.641	x	x	x	x	
33	H3N6F1	1891.69		x	x	x	
34	H9N2	1905.636	x	x	x	x	x
35	H5N4L1	1936.671					x
36	H6N3E1	1941.681	x	x	x	x	
37	H5N4Gl1	1952.657				x	
38	H5N4F2	1955.683		x	x		x
39	H4N4F1E1	1966.710	x	x	x	x	x
40	H5N4E1	1982.709	x	x	x	x	x
41	H5N4Ge1	1998.696		x	x	x	x
42	H4N4F1E1Ac1	2008.709					x
43	H5N5F1	2012.719	x	x	x	x	x
44	H4N5E1	2023.742	x	x	x		
45	H5N4E1Ac1	2024.724					x
46	H6N5	2028.716					x
47	H4N5Ge1	2039.728				x	
48	H5N4Ge1Ac1	2040.721					x
49	H4N6F1	2053.73		x			
50	H3N6E1	2064.755		x	x		
51	H10N2	2067.692				x	x
52	H5N4F1L1	2082.726				x	
53	H6N3F1E1	2087.739			x	x	
54	H5N4F1Gl1	2098.733		x		x	
55	H7N3E1	2103.733				x	
56	H4N7	2110.762		x			
57	H5N4F1E1	2128.766	x	x	x	x	x
58	H5N4F1Ge1	2144.75		x	x	x	x
59	H6N4Ge1	2160.743				x	
60	H4N5F1E1	2169.790	x	x	x	x	
61	H5N4F1E1Ac1	2170.78					x
62	H6N5F1	2174.769			x		
63	H5N5E1	2185.79	x	x	x	x	
64	H5N4F1Ge1Ac1	2186.775					x
65	H5N5Ge1	2201.778				x	
66	H3N6F1E1	2210.817		x	x	x	x

67	H5N6F1	2215.795			x		
68	H4N6E1	2226.800			x	x	
69	H5N4G12	2241.749				x	
70	H5N4E1L1	2255.819	x			x	
71	H4N7F1	2256.821		x	x		
72	H5N4E1G11	2271.787				x	
73	H5N4F2E1	2274.823	x	x	x		
74	H4N4F1E2	2285.857				x	
75	H5N4Ge1G11	2287.803		x			
76	H5N4F2Ge1	2290.816				x	x
77	H5N4E2	2301.833	x	x	x	x	x
78	H6N4F1Ge1	2306.813				x	
79	H6N5G11	2317.823		x	x	x	x
80	H5N5F1E1	2331.848	x	x	x	x	
81	H6N4F1E1Ac1	2332.829					x
82	H5N4Ge2	2333.826		x	x	x	
83	H5N4E2Ac1	2343.844					x
84	H6N5E1	2347.841	x	x	x	x	x
85	H3N6F2E1	2356.864		x	x	x	
86	H6N5G11Ac1	2359.827					x
87	H5N4F1L1G11	2371.811				x	
88	H4N6F1E1	2372.847		x	x		
89	H5N4E2Ac2	2385.858					x
90	H5N4F1G12	2387.802				x	
91	H5N6E1	2388.865		x			
92	H7N6	2393.846					x
93	H5N4F1E1L1	2401.861	x	x	x	x	x
94	H5N4F1E1G11	2417.842				x	
95	H4N7E1	2429.932	x	x			
96	H5N4F1Ge1G11	2433.864		x		x	
97	H5N4F1E2	2447.894	x	x	x	x	x
98	H6N5F1G11	2463.884				x	
99	H5N4F1Ge2	2479.882				x	x
100	H4N5F1E2	2488.904		x	x	x	x
101	H6N5F1E1	2493.900	x	x	x	x	x
102	H5N5E2	2504.952	x			x	
103	H6N5F1Ge1	2509.877		x	x	x	
104	H5N5E1Ge1	2520.906				x	
105	H5N4F1Ge2Ac1	2521.889					x
106	H5N6F1E1	2534.925		x	x	x	
107	H6N6E1	2550.912			x	x	
108	H5N4F1Ge2Ac2	2563.900					x
109	H5N4E2L1	2574.974	x			x	
110	H4N7F1E1	2575.948		x	x		
111	H6N5L1G11	2590.903				x	

112	H3N8F1E1	2616.986			x		
113	H6N5E1L1	2620.969				x	
114	H5N8F1	2621.936		x	x		
115	H6N5F2E1	2639.957	x				
116	H5N5F1E2	2650.971	x			x	
117	H6N5E2	2666.937	x			x	x
118	H6N5E1Ge1	2682.959				x	
119	H6N6F1E1	2696.971		x		x	
120	H7N6E1	2712.973		x	x	x	x
121	H6N5F3E1	2786.014	x				
122	H7N5F2E1	2801.995	x				
123	H6N5F1E2	2813.017	x	x	x	x	
124	H8N5F1E1	2817.999				x	x
125	H6N5F1E1Ge1	2829.014				x	
126	H7N5E1Ge1	2845.014				x	
127	H8N6F2	2848.014	x				
128	H7N6F1E1	2859.031		x	x	x	x
129	H7N6F1Ge1	2875.007		x	x	x	x
130	H6N7F1E1	2900.057		x	x	x	
131	H7N7E1	2916.027		x	x	x	
132	H6N5F4E1	2932.072	x				
133	H6N5E2L1	2940.072	x				
134	H5N8F1E1	2941.07		x	x		
135	H6N5E3	2986.084	x				
136	H7N6F2E1	3005.086	x	x	x		
137	H6N5F3E1L1	3059.087	x				
138	H6N5F1E2L1	3086.092	x				
139	H6N5F3E2	3105.123	x				
140	H6N5F1E3	3132.140	x				
141	H6N5F1E2Ge1	3148.123				x	
142	H7N6F3E1	3151.146	x				
143	H6N5F1E1Ge2	3164.136				x	
144	H7N5E1Ge2	3180.145				x	
145	H7N6F1E1Ge1	3194.152				x	
146	H7N6F1Ge2	3210.147				x	
147	H6N5F2E2L1	3232.135	x				
148	H7N7E1Ge1	3251.242				x	
149	H7N6F4E1	3297.211	x				
150	H10N6F1E1	3345.196					x
151	H8N7F2E1	3370.233	x				
152	H7N6F3E2	3470.279	x				

Şekil 4.7’de gösterilen venn şemasında türler arasında ortaklaşa tespit edilen *N*-glikanların sayısal ağırlıklarına göre oluşturulmuş bir şekil görülmektedir. Burada “derin öğrenme” kullanılarak tespit edilen glikan sayısı ile bağlantılı olarak türlerin arasındaki yakınlık glikan

düzeyinde incelenmiştir. Analiz sonucunda sığır ve manda sütlerinin birbirine en yakın glikan profillinde olduğu söylenebilir. Keçi sütünün glikan düzeyinde incelediğinde insan ve diğer sütler orana daha çok sayıda farklı tip glikan içerdiği çalışmada bulunmuştur (31 adet). Bu durumun keçi glikan profilinin diğer süt profillerinden uzaklaştırmakta olduğunu söyleyebiliriz.

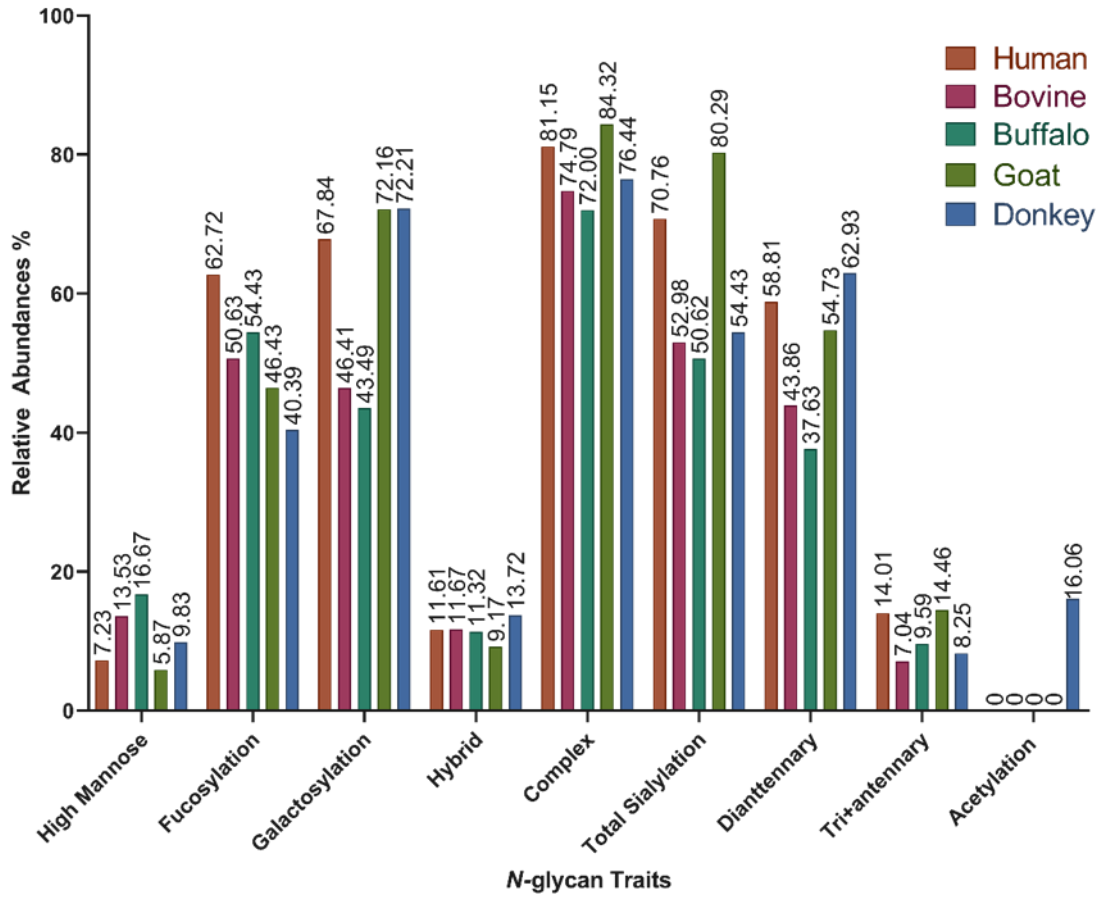


Şekil 4. 7. Tespit edilen *N*-glikan tiplerinin türler arasında derin öğrenme algoritması kullanılarak kıyaslanması (Hulsen vd. 2008). **Kırmızı: İnsan, Yeşil: Sığır, Mor: Manda, Sarı: Keçi, Fuşya: Eşek.**

4.6.2 Göreceli Bolluk Açısından Glikan Profillerinin Kıyaslanması

MALDI-MS ile süt whey *N*-glikanlarının analizleri sonrasında her bir tespit edilen *N*-glikanın alanı MassyTools yazılımı ile ekstrakte edilip total alan normalizasyonu yapılarak her bir *N*-glikanın göreceli bolluğu hesaplandı. Sonrasında glikanlar yapılarına göre çeşitli özelliklerine göre sınıflandırıldı. Tablo Ek8'de sınıflandırmaya ait bilgileri içeren bir tablo verilmiştir. Burada tüm türlere ait *N*-glikanları içeren bir formülasyon kullanılmıştır.

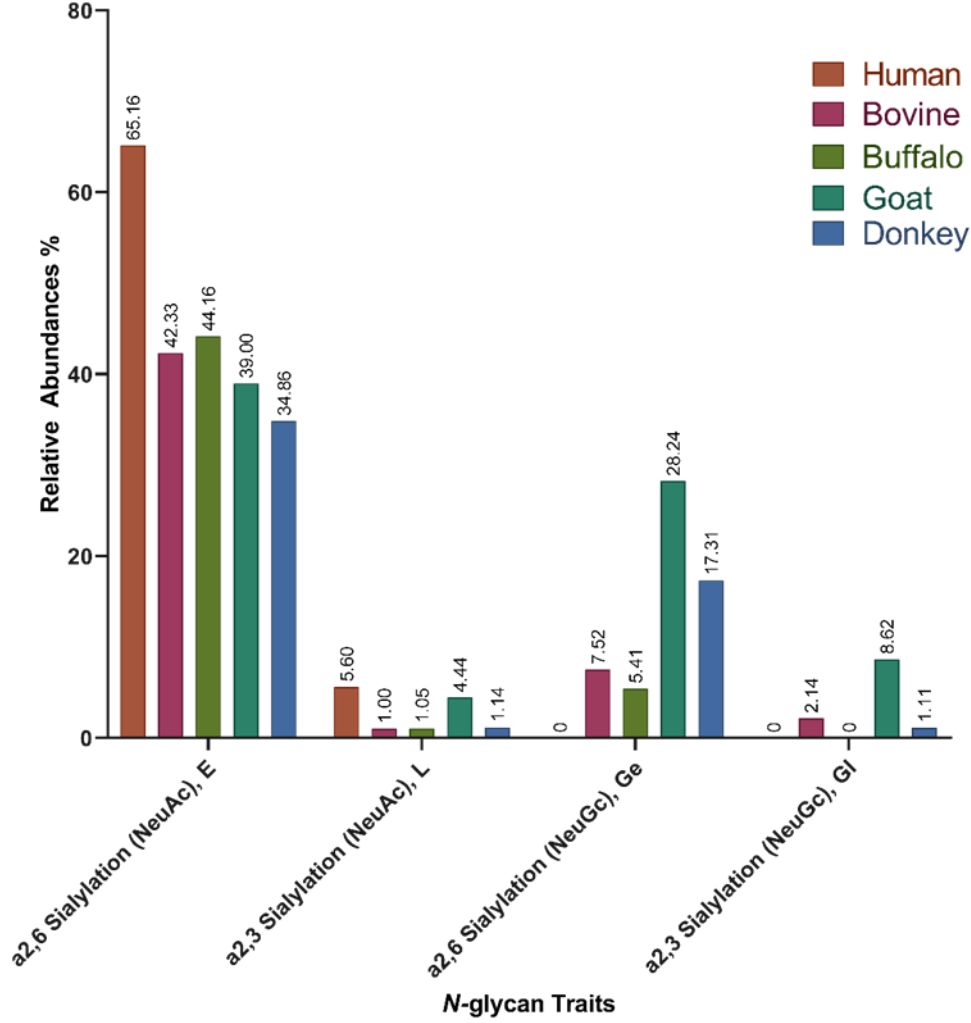
Tablo Ek9’da tespit edilen *N*-glikan gruplarının göreceli bollukları verilmektedir. Ayrıca şekil 4.8’de *N*-glikan grupları arasında tür bazındaki değişimler gösterilmiştir. Glikan grupları değerlendirildiğinde tüm türlerin süt whey *N*-glikom profilinde en bol bulunan glikan grubunun karmaşık tipte olduğu belirlenmiştir. Yüksek mannoz bakımından inek ve manda *N*-glikan profillerinin göreceli miktarları birbirine yakın olduğu tespit edildi. Fukozlanma oranı en yüksek sütün insan süt glikan profillerinde olduğu belirlenmiştir. Asetillenmiş *N*-glikan tipleri sadece eşek sütünde belirlenmiştir (%16.06). Siyalik asitçe en zengin glikan tiplerini içeren süt tipi keçi sütü olarak bulunmuştur. Anne sütünün de siyalik asit bakımından zengin olduğu belirlenmiştir (%81,15).



Şekil 4. 8. *N*-glikan gruplarının türler arasındaki değişimleri.

Şekil 4.9’da siyalik asit türlerine bağlı olarak bir karşılaştırmaya ait grafik sunulmuştur. Uygulanan metodolojide alfa2,6 ve alfa2,3 bağlı siyalik asit içeren türler MALDI-MS analizlerinde birbirinden ayrılmaktadır. Anne süt profillerinde insan genomunda *N*-glikozil nöramonik asit sentezinden sorumlu gen bulunmamaktadır. Anne sütünde bu profili içeren glikan tipi belirlenememiş olması bu gerçeği yeniden ortaya koymaktadır. Yapılan analizler sonucunda alfa2,6 bağlı glikan tipi en bol olarak insan süt profilinde bulunmuştur. Laktonlanmış glikanlar (alfa2,3 bağlı *N*-asetil nöramonik asit) en bol olarak anne sütünde bulunmuştur. *N*-

glikozil nöramonik asit bakımından en zengin profilin keçi sütü olduğu belirlenmiştir (%28,24). Gene laktonlanmış (alfa2,3 bağlı) *N*-glikozil nöramonik asit bakımından en zengin profilin keçi sütü olduğu belirlenmiştir (%8,62).



Şekil 4. 9. Sialik asit içeren *N*-glikan gruplarının türler arasındaki değişimleri.

4.7 Glikoproteomik Analizler

Anne ve inek süt proteinlerinin glikozilasyon bölgelerinin karakterizasyonu için ilk olarak süttten whey ve kazein proteinlerinin ekstraksiyonu kloroform/metanol yöntemli ile gerçekleştirildi. Protein miktarları BCA assay ile belirlendikten sonra proteolitik parçalama işlemi, klasik bir aşağıdan-yukarıya proteomik yaklaşım kullanılarak gerçekleştirildi. Glikopeptitlerin kütle spektrometrik analizlerinde verimli tespiti için HILIC temelli bir zenginleştirme yapıldı. Bu sayede tespit edilen glikozilasyon bölgesinin sayısı artırıldı. Deneysel işlemler 3 deneysel tekrar ile gerçekleştirildi. Ayrıca zenginleştirme sonrasında glikozilasyon bölgelerinin net tespiti için PNGase F enzimi ile deamidasyon işlemi gerçekleştirildi. Bu çalışmada uygulanan yaklaşımlar ile glikozilasyon bölgelerinin tespiti ve her bölgedeki glikan bileşim hakkında bilgi

sahibi olunabilmektedir. Analizler güçlü kütle çözünürlüğüne sahip nLC-QExactive Plus cihazı ile gerçekleştirildi.

4.7.1 Anne Sütü Proteinleri Glikozilasyon Bölgelerinin Tespiti

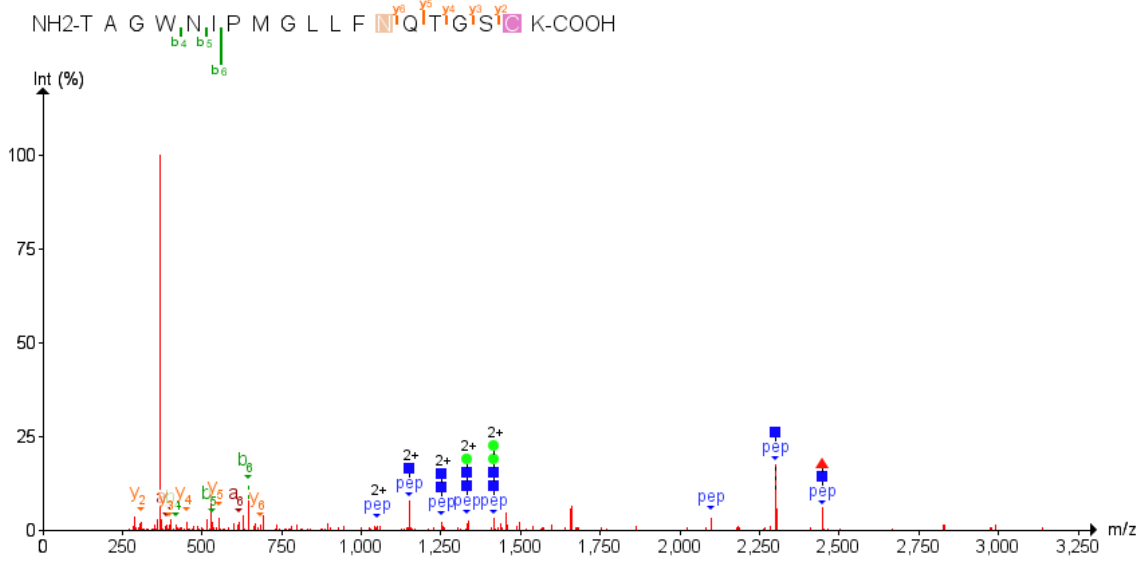
Glikopeptitlerin HILIC temelli zenginleştirilmesi sonrası elüsyonlar iki eşit hacme bölündü. Birinci örnekler doğrudan analiz için kullanılırken ikinci örnekler PNGase F işlemine maruz bırakıldı. İkinci örneklerin deamidasyonu sonucu elde edilen spektrumlar ilk olarak MaxQuant yazılımı ile değerlendirildi. Burada glikozilasyon bölgelerinde gözlemlenen deamidasyon modifikasyonu analizlerde izlendi. Sonrasında elde edilen tabloda glikozilasyon bölgesi içerecek şekilde sekansa sahip peptitler filtrelendi. Anne sütünde 139 adet N-glikozilasyon bölgesi tespit edildi. Tablo Ek 10'da bu analiz sonucunda elde edilen glikozilasyon bölgeleri ve belirlenen proteinler listelenmiştir.

4.7.2 Anne Sütü Glikoproteinlerinin Bölgeye-özü Glikozilasyon Analizleri

Glikopeptitlerin zenginleştirilmeleri sonucu doğrudan analizleri analizi nLC-QExactive Plus kütle spektrometresi ile gerçekleştirildi. Burada herhangi bir deamidasyon işleminin olmayışı glikozilasyon bölgelerinde glikan birimlerinin korunmasını sağlamaktadır. Yani, doğrudan glikopeptitlerin analizi bu tarz bir yaklaşımla belirlenebilmektedir. Burada dikkat edilmesi gerek husus kütle spektrometrik analizlerde seçilen yöntemin hem glikanlara ait hem de glikozilasyon bölgesini içeren peptite ait parçalanma sinyallerini elde edebilme kabiliyetine sahip olmasıdır. Bu tarz analizlerde elde edilen veriler manuel olarak değerlendirilebileceği gibi son zamanlarda çeşitli yazılımlar ile de analizler gerçekleştirilebilmektedir. Doğal olarak yazılımlar analiz süresini kısaltmaktadır. Bu çalışmada da iki adet yazılım MSFragger Glyco ve Byonic (Protein Metrics) çalışmada veri analizlerinin değerlendirilmesinde kullanılmıştır. İlk olarak MSFragger yazılımı ile tespit edilen N-glikopeptitler belirlenmiştir. Analizler sonucunda, 147 adet N-glikopeptit belirlenmiştir. Her bir glikopeptitin peptit sekansı ve glikan çeşitliliği tespit edilmiştir. Tablo Ek11'de bu sonuçlara ait liste görülmektedir. Burada toplamda 22 adet insan sütü glikoproteine ait 33 adet N-glikozilasyon bölgesi, glikan çeşitliliğini içerecek şekilde aydınlatılmıştır. Ayrıca her bir glikopeptitin intensite değerleri MSFragger yazılım kullanılarak elde edilmiştir. Bu intensite değerleri glikozilasyon bölgelerinin göreceli bolluk hesaplamalarında kullanılmıştır.

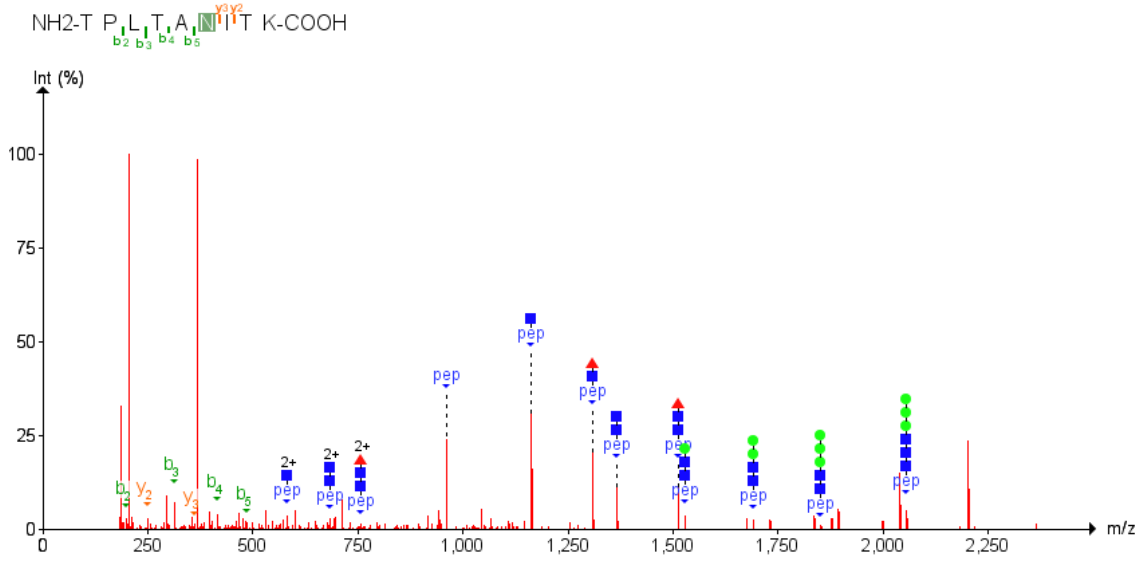
Tespit edilen glikopeptitlerin görselleştirilmesinde PDV yazılımı kullanılmıştır. Burada MSFragger yazılımı kullanılarak elde edilen veriler PDV yazılımına aktarılmış ve glikopeptitlerin otomatik olarak sekanslaması, MSFragger Glyco yazılımından elde edilen veriler kullanılarak yapılmıştır. Şekil 4.10'da laktotransferin proteinine ait Asn497 bölgesine ait Hex5HexNAc4dHex1 glikan içeriğine sahip glikopeptitin bölgeye-özü glikozilasyon

analizinden elde edilen sonuç görülmektedir. Burada peptit sekansı, triptik bir peptit olan “TAGWNIPMGLLFNQ^{Y6}TG^{Y5}SG^{Y4}SK^{Y2}” peptitini doğrulamaktadır. Peptide ait b- ve y- iyonları tespit edilmiştir. Ayrıca peptit+glikan parçalanma ürünleri de spektrumda belirlenmiştir. Bu tarz bir yaklaşımla glikopeptitin hem peptit bölgesi hem de glikan bölgesi doğrulanmaktadır.



Şekil 4. 10. Asn497 glikozilasyon bölgesine ait Hex5HexNAc4dHex1 tipinde glikan içeren bir glikopeptitin MS/MS spektrumu.

Benzer şekilde sekansı “TPLTANITK” olan immunoglobulin A (alfa-2) proteinine ait Asn205 bölgesini içeren ve Hex4HexNAc4dHex1 glikanına sahip glikopeptitin aydınlatılmış MS/MS spektrumu Şekil 4.11’de görülmektedir. Burada da hem peptite hem de peptit+glikan yapısına ait parçalanma ürünleri spektrumda belirlenmiştir. Ayrıca oksonyum iyonlarına ait sinyaller de spektrumda görülmektedir. Bu sinyaller glikopeptitlere özgü spesifik parçalanma ürünleridir. PDV yazılımında bu sinyaller spektrumlarda görselleştirilmemektedir fakat şekil 4.10 ve 4.11’de oksonyum iyonları HexNAc (204,08 m/z) ve HexHexNAc (366,13 m/z) spektrumlarında tespit edilmiştir. Çalışmada bu yaklaşım kullanılarak her tespit edilen glikozilasyon bölgesine ait peptit sekansları ve içerdikleri glikan yapıları aydınlatılmıştır. Burada yazılım tarafından *in-silico* yani bilgisayar tarafından hesaplanan glikopeptit parçalanma ürünleri, deneysel sonuçlar ile kıyaslayarak puanlama yapılmaktadır. Bu sayede her bir glikopeptite ait skorlar elde edilmektedir. Bu şekilde tespit edilen glikopeptitler Tablo Ek11’de listelenmiştir.



Şekil 4. 11. Asn205 glikozilasyon bölgesine ait Hex4HexNAc4dHex1 tipinde glikan içeren bir glikopeptitin MS/MS spektrumu.

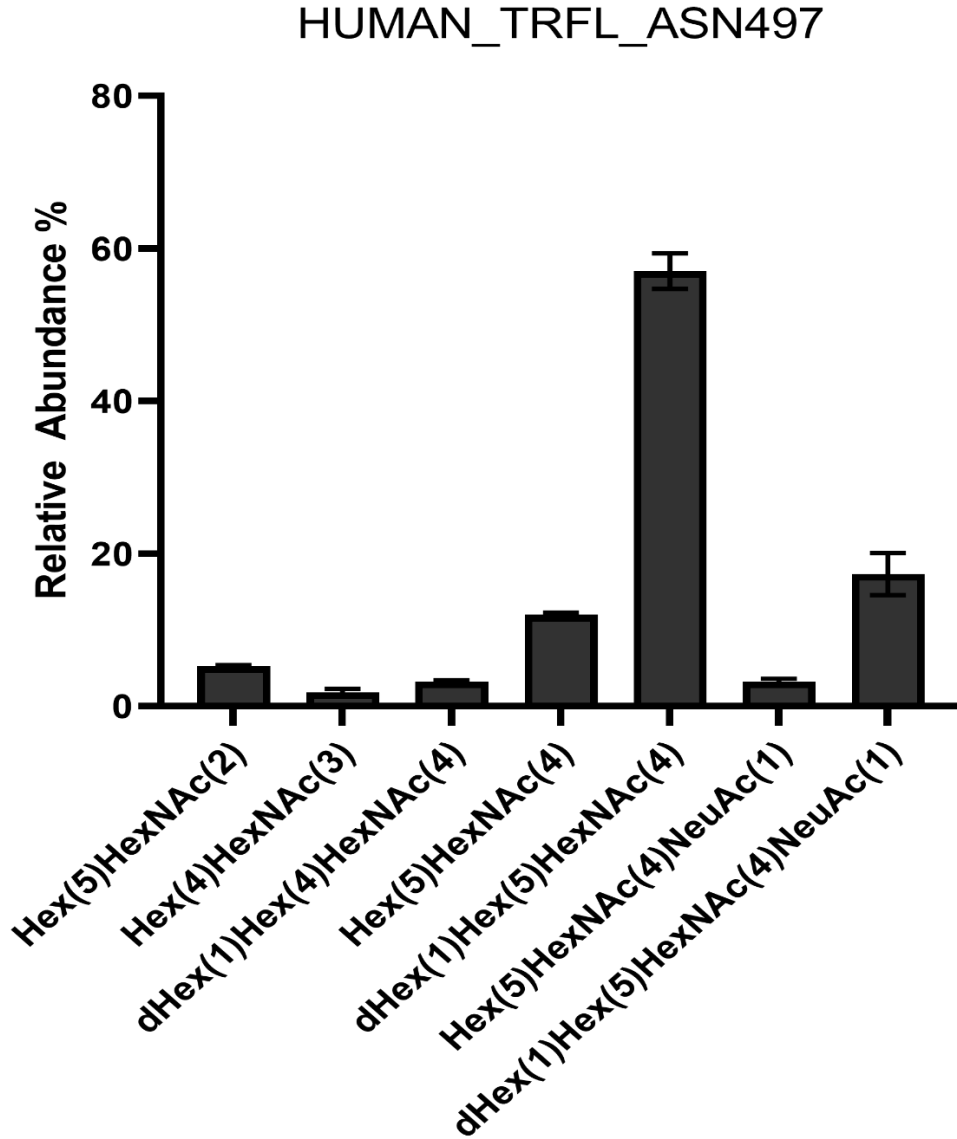
4.7.3 Anne Sütü Proteinleri Bölgeye-özü N-Glikozilasyon Bölgelerinin Miktarlanması

Bölgeye-özü glikozilasyon analizleri sonucunda her tespit edilen glikoproteinine ait glikozilasyon bölgelerinin göreceli bollukları, toplan alan normalizasyon yaklaşımı kullanılarak hesaplanmıştır. Burada MSFragger Glyco yazılımı kullanılarak elde edilen intensite değerleri kullanılmıştır. Burada en az iki tekrar ile tespit edilmiş glikopeptitin intensite değerleri dikkate alınarak göreceli bolluk hesaplaması yapılmıştır. Glikoproteinler ayrı olarak sınıflandırılmış ve tespit edilen glikozilasyon bölgesini içeren (aynı peptit üzerinde bulunan) glikan çeşitliliğinin göreceli bolluğu belirlenmiştir. Tablo Ek12’de bu analizler sonucunda belirlenen glikozilasyon bölgelerine ait göreceli bolluk hesaplama kriterini sağlayan glikopeptitlerin glikozilasyon bölgesi bazında tespit edilen göreceli bollukları verilmiştir. Dört adet insan sütü whey glikoproteininin bu yaklaşımla 7 adet N-glikozilasyon bölgesi miktarlanabilmiştir. İnsan süt glikoproteomuna ait bazı önemli glikoproteinlerin bölgeye-özü glikozilasyon analizleri sonucu elde edilmiş göreceli bolluk açısından elde edilen veriler aşağıda paylaşılmıştır.

4.7.4 İnsan Sütü Laktotransferin Proteininin Bölgeye-özü Glikozilasyon Analizi

Laktotransferin anne sütü ve mukoza salgıları gibi sıvılarda bulunan başlıca demir bağlayıcı ve çok işlevli proteindir. Hücre dışı katyon konsantrasyonuna bağlı olarak antimikrobiyal aktiviteye sahiptir(Velliyagounder vd. 2003). Literatür incelendiğinde laktotransferin proteininin 3 adet N-glikozilasyon bölgesi içerdiği bilinmektedir. Çalışmada 3 N-glikozilasyon bölgesi de belirlenmiştir. Bunlar Asn156, Asn497 ve Asn642’dir. Glikan heterojenitesi bakımından en

yüksek sayıda farklı tipte glikan içeren bölge Asn497 olarak belirlenmiştir. Bu bölge yüksek mannoz, kompleks ve hibrit tipte glikan içermektedir. Asn156 ve Asn642 glikozilasyon bölgelerinde ise sırasıyla 6 ve 3 adet glikopeptit belirlenmiştir. Bu aşamadan sonra tespit edilen glikozilasyon bölgelerinin en az 2 deneysel tekrarda intensitesi elde edilmiş ve veriler dikkate alınarak göreceli bolluk hesaplaması yapılmıştır. Şekil 4.12’de Asn497 glikozilasyon bölgesine ait göreceli bollukları gösteren bir şekil görülmektedir.



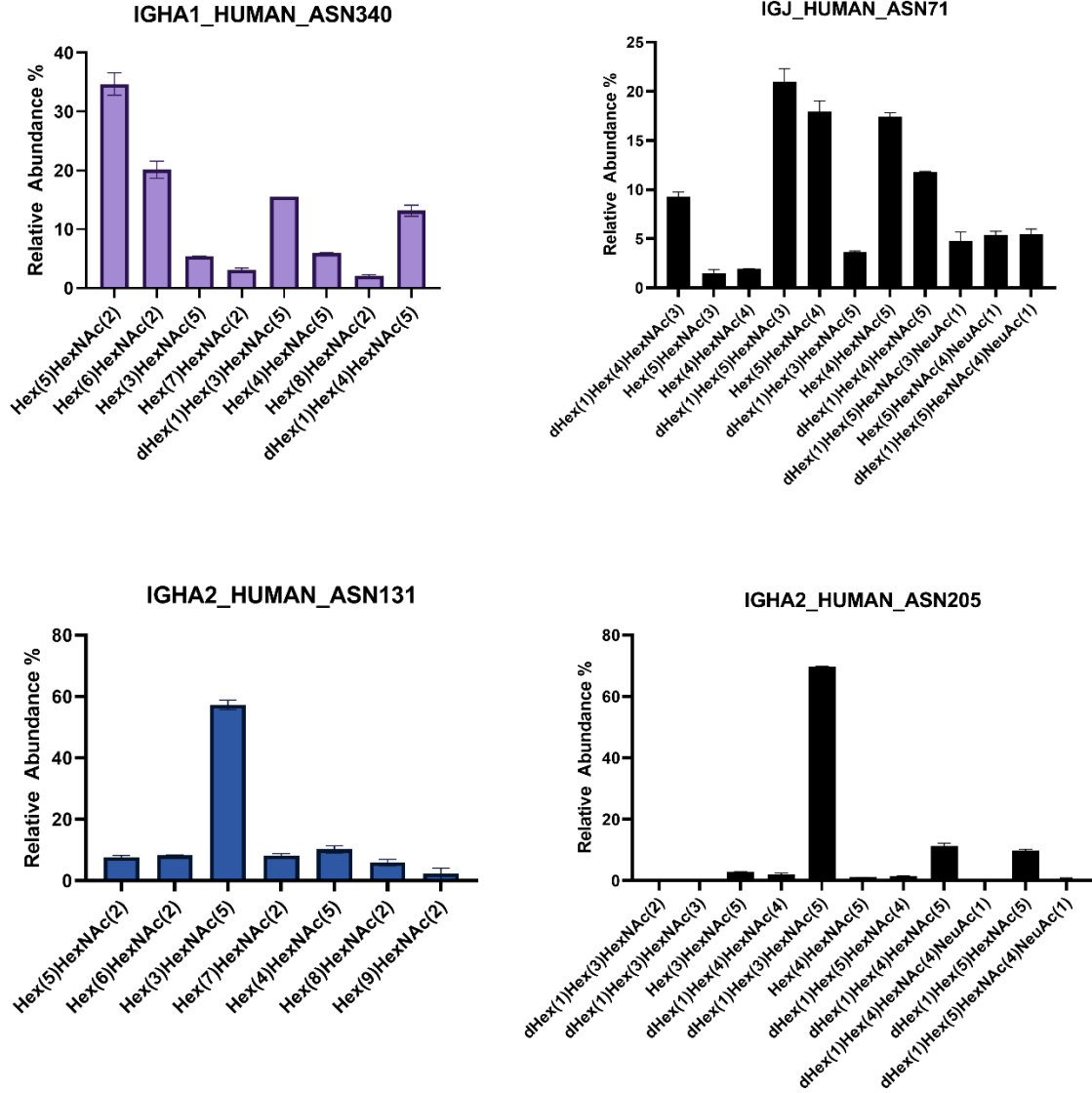
Şekil 4. 12. İnsan laktotransferin proteinine ait Asn497 N-glikozilasyon bölgesinde tespit edilen glikopeptitlere ait göreceli bolluklar.

Yapılan analizler sonucunda, Asn497 ve Asn156 bölgelerinde en bol bulunan *N*-glikopeptitler dHex(1)Hex(5)HexNAc(4) *N*-glikanını içeren peptit olarak bulunmuştur. Asn642 bölgesinde ise dHex(2)Hex(5)HexNAc(4) glikanını içeren glikopeptitin miktarı yüksek bulunmuştur fakat bu

bölgede diğer glikopeptitlere ait intensite değerlerinin yazılım tarafından tam ekstrakte edilememiş olmasının bu sonucu doğrulduğu düşünülmektedir. Burada da diğer bölgelerdekine benzer şekilde dHex(1)Hex(5)HexNAc(4) glikan tipinin daha bol miktarda bulunduğu düşünülmektedir. Tablo Ek12’de bu analizler sonucunda miktarlanabilmiş laktotransferin proteininin glikopeptitlerine ait göreceli bolluk değerleri verilmiştir.

4.7.5 İnsan Sütü İmmunoglobulin Proteinlerinin Bölgeye-özü Glikozilasyon Analizi

İnsan sütünde en bol bulunan immünoglobulin, süt antikorlarının %90’ından fazlasını temsil eden IgA’dır. Bununla birlikte, immünoglobulinler G ve M (IgM) de mevcuttur, ancak IgA’dan çok daha düşük konsantrasyonlarda bulunmaktadır(Zimecki ve Artym 2005). Çalışmada IgA, IgG, IgJ ve IgM glikoproteinleri tespit edilmiştir. IgA1 ve A2 varyantlarına ait 4 N-glikozilasyon bölgesi, IgJ glikoproteini için 1 ve IgG2 için 1 N-glikozilasyon bölgesi tespit edilmiştir. IgM içinse 2 N-glikozilasyon bölgesi belirlenmiştir. Şekil 4.13’de çeşitli immunoglobulin proteinlerine ait göreceli bolluk sonuçları gösterilmektedir. Örneğin IgA1 proteinine ait Asn340 glikozilasyon bölgesinde en bol bulunan N-glikopeptit tipi olarak Hex(5)HexNAc(2) belirlenmiştir. Ayrıca bu bölgenin yüksek mannoz, hibrit ve kompleks tipli glikanlardan oluştuğu tespit edilmiştir. Benzer şekilde, tek glikozilasyon bölgesine sahip IgJ glikoproteininin Asn71 glikozilasyon bölgesi için en bol bulunan glikan dHex(1)Hex(5)HexNAc(3) olarak (hibrit tipte) belirlenmiştir. Diğer yandan IgA2 varyantına ait Asn131 ve Asn205 glikozilasyon bölgeleri için en bol bulunan glikopeptitin sırasıyla Hex(3)HexNAc(5) ve dHex(1)Hex(5)HexNAc(3) glikan tipleri içerdiği belirlenmiştir (Şekil 4.13).



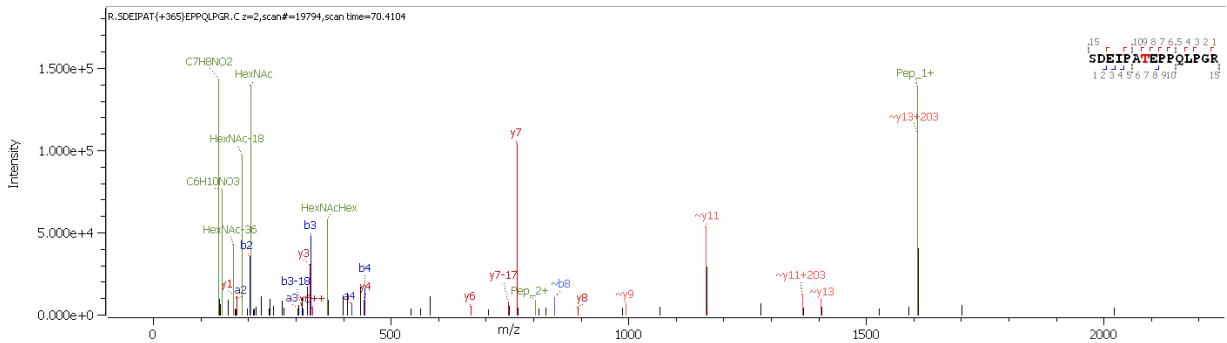
Şekil 4. 13. İnsan sütü immunoglobulin proteinlerine ait çeşitli N-glikozilasyon bölgelerinde tespit edilen glikopeptitlere ait göreceli bolluklar.

4.7.6 Anne Sütü Proteinleri Bölgeye-özü O-Glikozilasyon Bölgelerinin Tespiti

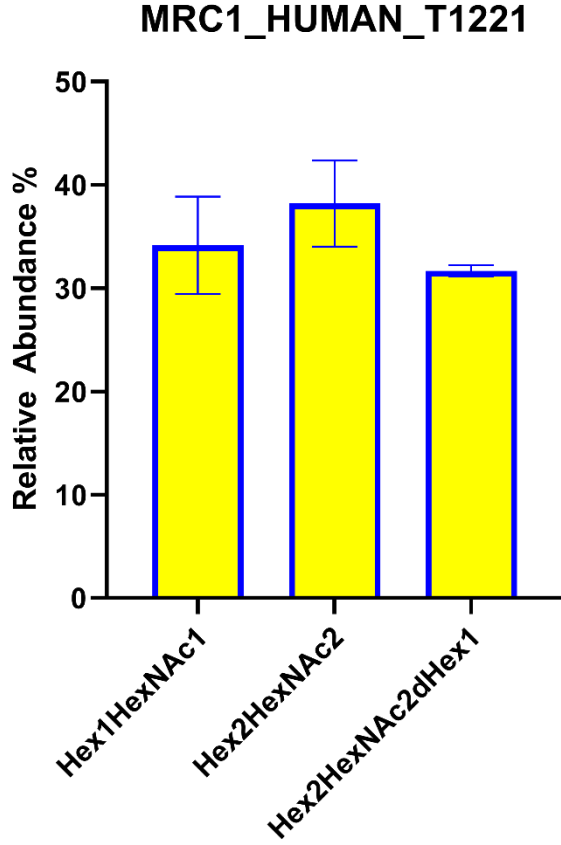
Bölgeye-özü *N*-glikozilasyon analizlerine ilave *O*-glikozilasyon analizleri de proje kapsamında gerçekleştirilmiştir. Bu analizler *N*-glikozilasyon analizlerine kıyasla daha zorlayıcı veri analizlerini içermektedir. Bunun nedeni *N*-glikozilasyonda modifikasyonun oluşabilmesi için belirli bir sekansa ihtiyaç varken (*N*-*X*-*S*/*T*, *X*: prolin hariç herhangi bir amino asit), *O*-glikozilasyonda böyle bir duruma gerek olmayışıdır. *O*-glikozilasyon *S* ve *T* amino asitleri üzerinde gerçekleşmektedir. Burada elde edilen peptitlerin içeriğinde birden fazla *S* ve *T* amino asitinin olması bölge analizlerini çok daha zor hale getirmektedir. Bu tarz analizlerde diğer ikili

MS/MS yöntemi olan ETD tekniğinin kullanılması gerekmektedir(Darula ve Medzihradzsky 2018).

Çalışma kapsamında O-glikopeptitlerin tespit edilebilmesi için elde edilen veriler Byonic (Protein Metrics, USA) yazılımında işlenmiştir. Yazılımın tespit ettiği O-glikopeptitler yazılım tarafından belirlenen skorlara göre sınıflandırılmış ve ayrıca manuel olarak kontrol edilmiştir. En yüksek skor alan ve O-glikozilasyon bölgesi içeren bir O-glikopeptit, Şekil 4.14'te görülmektedir. Bu mannoz resöptör proteinine ait O-glikopeptitin peptiti “SDEIPAT₁₂₂₁EPPQLPGR” olarak bulunmuştur. Peptide ait b- ve y- iyonları spektrumda görülmektedir. Bu peptit 2 adet potansiyel O-glikozilasyon bölgesi içermektedir. Çalışmada basamaklı HCD ile MS/MS spektrumları elde edildiğinden dolayı b- ve y- iyonlarına HexNAc ilaveli iyonların tespiti ile O-glikozilasyon bölgelerinin tespiti yapılabilmektedir. Spektrum detaylı incelendiğinde oksonyum iyonları (HexNAc ve HexHexNAc) yüksek intensitede tespit edilmiştir. Glikozilasyon bölgesinin T1221 no'lu amino asitte olduğunu gösteren bir y11+203 iyonu spektrumda net olarak görülmektedir. Bu iyonun varlığı O-glikozilasyon bölgesinin T1221 no'lu amino asitte olduğunu doğrulamaktadır. Gene spektrum incelendiğinde peptit kütlesi net olarak görülmektedir ve MS/MS yapılan iyonun kütlesi değerlendirildiğinde bu O-glikopeptitin Hex1HexNAc1 çekirdek 1 tipinde O-glikan içerdiği belirlenmiştir.



daha önce bu O-glikozilasyon bölgesinin tanımlanmadığı görülmüştür. Bu çalışma ile ilk kez bu bölge tanımlanmıştır.



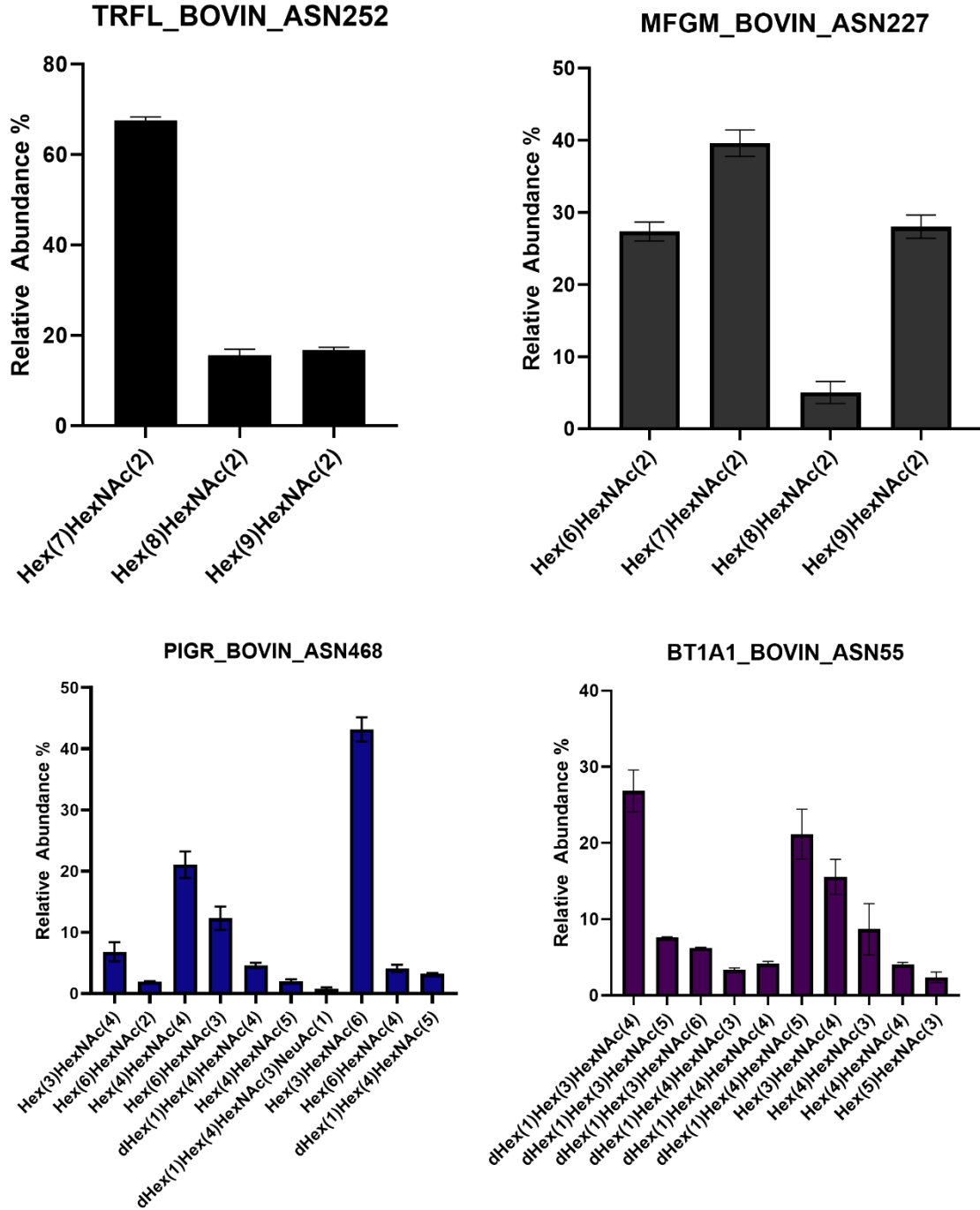
Şekil 4. 15. İnsan sütü mannoz resöptör proteininde bulunan T1221 O-glikozilasyon bölgesinde tespit edilen O-glikanların göreceli bollukları.

Bu O-glikozilasyon bölgesinin haricinde N-glikanları uzaklaştırılmış whey proteinlerinin kütle spektrometrik analizlerinden elde edilen veriler Byonic yazılımı ile incelenmiştir. Burada potansiyel O-glikopeptitler belirlenmiştir. Yazılımın tespit ettiği verilerin ayrıca, diğer ikili MS yöntemleri ile değerlendirilmesi ve O-glikozilasyon bölgelerinin doğrulanması gereklidir. Tablo Ek13'te anne sütü glikoproteomunda tespit edilen O-glikopeptitlerin listesi verilmektedir. 20 adet potansiyel O-glikopeptit bu analizler sonucunda belirlenmiştir.

4.7.7 İnek Sütü Proteinleri Glikozilasyon Bölgelerinin Tespiti

Anne sütünde uygulanan yaklaşım inek sütü için de uygulandı ve inek sütüne ait glikozilasyon bölgeleri MaxQuant yazılımı kullanılarak tespit edildi. Burada glikozilasyon bölgelerinde gözlemlenen deamidasyon modifikasyonu analizlerde izlendi. Sonrasında elde edilen tabloda glikozilasyon bölgesi içerecek şekilde sekansa sahip peptitler filtrelendi. Anne sütünde 37 adet N-glikozilasyon bölgesi tespit edildi. Tablo Ek 14'de bu analiz sonucunda elde edilen glikozilasyon bölgeleri ve belirlenen proteinler listelenmiştir.

(TRFL_BOVIN) proteini Asn252 *N*-glikozilasyon bölgesinde sadece yüksek mannoz içeren glikanların varlığı tespit edilmiştir. Burada en bol bulunan glikan tipi olarak da Hex(7)HexNAc(2) glikan içeren glikopeptit olarak belirlenmiştir.

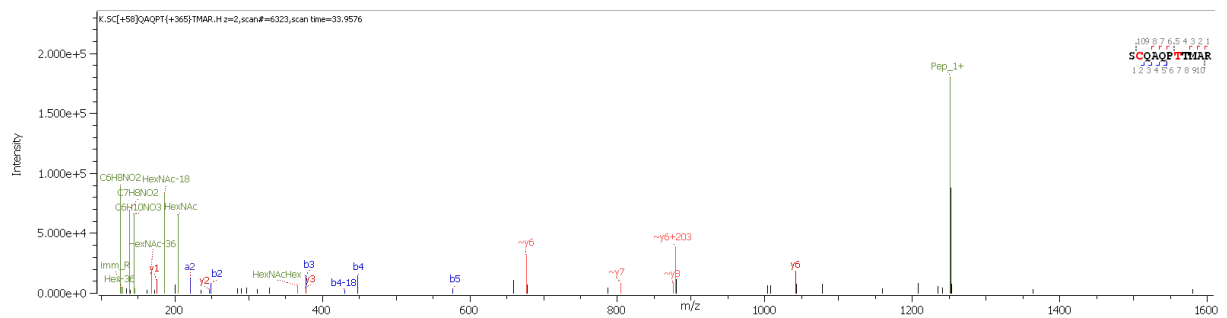


Şekil 4. 17. İnek sütü glikoproteinlerine ait çeşitli *N*-glikozilasyon bölgelerinde tespit edilen glikopeptitlere ait göreceli bolluklar.

Laktadherin proteinini (MFGM_bovin) Asn227 no'lu glikozilasyon bölgesinin yüksek mannoz içeren tipte glikan içerdiği ve en bol bulunan glikopeptit tipinin Hex(7)HexNAc2 tipinde olduğu belirlenmiştir. Benzer şekilde polimerik immunoglobulin reseptör proteini (PIGR_BOVIN) Asn468 N-glikozilasyon bölgesi miktarlanmış ve en bol bulunan glikan tipi Hex(3)HexNAc(6) olarak bulunmuştur. Bölgenin kompleks ve hibrit tipte glikan içerdiği belirlenmiştir. Son olarak, Butirofilin A1 proteini (BT1A1_BOVIN) Asn55 N-glikozilasyon bölgesi miktarlanmış ve en bol bulunan glikan tipi olarak dHex(1)Hex(3)HexNAc(4) bulunmuştur. Bu bölgenin de kompleks ve hibrit tipte glikanlar içerdiği belirlenmiştir. Bu yaklaşım kullanarak inek sütü glikoproteomuna ait 12 adet N-glikozilasyon bölgesi göreceli olarak miktarlanabilmiştir. Tablo Ek16'da bu bölgelere ait göreceli bolluklar verilmektedir.

4.7.10 İnek Sütü Proteinleri Bölgeye-özü O-Glikozilasyon Bölgelerinin Tespiti

Anne sütündeki O-glikozilasyon analizleri için uygulanan yaklaşım takip edilerek inek sütü O-glikozilasyon bölgelerinin analizleri gerçekleştirildi. Burada da çeşitli potansiyel O-glikozilasyon bölgeleri tespit edilmiştir. Şekil 4.18'de sığır kappa-kazein proteininden elde edilen O-glikopeptitin MS/MS spektrumu görülmektedir. Analiz sonucunda O-glikopeptitin peptit sekansı "SCQAQPTTMAR" sekansı olarak belirlenmiştir. Sekansın doğrulanması peptite ait b- ve y-iyonları net olarak spektrumda belirlenmiştir. Peptit incelendiğinde 3 adet potansiyel O-glikozilasyon bölgesi görülmektedir. Spektrum detaylı incelendiğinde y6+203 (y6+HexNAc) sinyali belirlenmiştir. Bu sinyal O-glikozilasyon bölgesinin peptitin başlangıcında bulunan "S" amino asiti üzerinde olmadığını göstermektedir. Spektrumdan hangi Tirozin amino asitinin O-glikozilasyona maruz kaldığı net olarak belirlenememiştir. Bu analizden çıkan durum kappa-kazein proteininin T114 veya T115 no'lu amino asitlerinden birinin O-glikazilasyon bölgesi içerdiğidir ki bu durum proteininin UNIPROT sayfası incelendiğinde daha önce raporlanmamıştır.



Yapılan veri analiz değerlendirmeleri sonucu potansiyel *O*-glikopeptitler listelenmiştir. Tablo Ek17’de bu liste verilmiştir. Burada en yüksek skora sahip *O*-glikopeptitler verilmektedir. İlginç bir şekilde alfa-s2 kazein proteinlerinin de *O*-glikozilasyon bölgesi içerdiğine dair ilk veriler elde edilmiştir. Yapılan spektrum değerlendirmesinde *O*-glikozilasyona uğramış peptit ve bu peptitin *O*-glikozilasyon bölgesi içerecek şekilde bir glikan taşıdığı tespit edilmiştir. Bu veri üzerinden giderek kazein proteinlerinin glikozilasyon açısından detaylı irdelenmesi gerekmektedir.

5. SONUÇLAR

Projenin ilk kısmında çeşitli süt örneklerinden elde edilen whey glikoproteomlarının ileri bir glikomik yaklaşım kullanılarak analiz edilmiştir ve her bir türün whey glikoproteinlerinin sahip olduğu *N*-glikan yapıları belirlenmiştir. Her bir tespit edilen *N*-glikanın göreceli bolluğu hesaplanmış ve glikan özelliklerine göre sınıflandırılan tipler, türler arasında kıyaslanmıştır. Analizler sonucunda inek ve manda whey *N*-glikan profillerinin çoğunlukla örtüştüğü tespit edilmiştir. İnsan sütü *N*-glikanlarının türler arasında en fazla fukozlanma oranına sahip olduğu belirlenmiştir. *N*-glikozil nöraminik asit içeren *N*-glikan yapıları, insan whey glikoproteinleri hariç tüm türlerde belirlenmiştir. Anne sütü whey *N*-glikanlarının çoğunlukla alfa2,6-bağlı *N*-asetil nöraminik asit tipi siyalik asit (%65,16) içerdiği belirlenmiştir. En yüksek yüksek miktarda *N*-glikozil nöraminik asit içeren *N*-glikanlara (%28,24) sahip tür olarak keçi sütü tespit edildi.

Glikoproteomik analizler ile insan ve inek sütü whey glikoproteinlerinin bağlanmaya-özümlenebilir *N*- ve *O*-glikozilasyon analizleri gerçekleştirildi. Belirlenen *N*-glikopeptitlerin göreceli bollukları hesaplanarak projede raporlanmıştır. Literatürde daha önce bilinmeye yeni *O*-glikozilasyon bölgeleri çalışmada gösterilmiştir. Ayrıca, insan ve inek sütü whey glikoproteomuna ait potansiyel *O*-glikozilasyon bölgeleri çalışmada gösterilmiştir.

6. KAYNAKLAR

- An, H. J., Froehlich, J. W. ve Lebrilla, C. B. 2009. "Determination of glycosylation sites and site-specific heterogeneity in glycoproteins", *Current Opinion in Chemical Biology* 13(4), 421-426. doi: 10.1016/j.cbpa.2009.07.022.
- Anumula, K. R. 1994. "Quantitative determination of monosaccharides in glycoproteins by high-performance liquid chromatography with highly sensitive fluorescence detection", *Anal Biochem* 220(2), 275-83. doi: 10.1006/abio.1994.1338.
- Apweiler, R., Hermjakob, H. ve Sharon, N. 1999. "On the frequency of protein glycosylation, as deduced from analysis of the SWISS-PROT database", *Biochimica Et Biophysica Acta-General Subjects* 1473(1), 4-8. doi: 10.1016/s0304-4165(99)00165-8.
- Ballard, O. ve Morrow, A. L. 2013. "Human Milk Composition Nutrients and Bioactive Factors", *Pediatric Clinics of North America* 60(1), 49-+. doi: 10.1016/j.pcl.2012.10.002.
- Brownlee, M. 1995. "Advanced Protein Glycosylation In Diabetes And Aging", *Annual Review of Medicine* 46, 223-234.
- Brumini, D., Criscione, A., Bordonaro, S., Vegarud, G. E. ve Marletta, D. 2016. "Whey proteins and their antimicrobial properties in donkey milk: a brief review", *Dairy Science & Technology* 96(1), 1-14. doi: 10.1007/s13594-015-0246-1.
- Coppa, G. V., Pierani, P., Zampini, L., Carloni, I., Carlucci, A. ve Gabrielli, O. 1999. "Oligosaccharides in human milk during different phases of lactation", *Acta Paediatr Suppl* 88(430), 89-94. doi: 10.1111/j.1651-2227.1999.tb01307.x.
- Darula, Z. ve Medzihradsky, K. F. 2018. "Analysis of Mammalian O-Glycopeptides—We Have Made a Good Start, but There is a Long Way to Go*", *Molecular & Cellular Proteomics* 17(1), 2-17.
- Desaire, H. 2013. "Glycopeptide Analysis, Recent Developments and Applications", *Molecular & Cellular Proteomics* 12(4), 893-901. doi: 10.1074/mcp.R112.026567.
- Dong, X., Zhou, S. Y. ve Mechref, Y. 2016. "LC-MS/MS analysis of permethylated free oligosaccharides and N-glycans derived from human, bovine, and goat milk samples", *Electrophoresis* 37(11), 1532-1548. doi: 10.1002/elps.201500561.
- Drickamer, K. ve Taylor, M. E. 1993. "Biology of animal lectins", *Annual Review of Cell Biology* 9, 237-264. doi: 10.1146/annurev.cb.09.110193.001321.
- Froehlich, J. W., Dodds, E. D., Barboza, M., McJimpsey, E. L., Seipert, R. R., Francis, J., An, H. J., Freeman, S., German, J. B. ve Lebrilla, C. B. 2010. "Glycoprotein Expression in Human Milk during Lactation", *Journal of Agricultural and Food Chemistry* 58(10), 6440-6448. doi: 10.1021/jf100112x.
- Geyer, H. ve Geyer, R. 2006a. "Strategies for analysis of glycoprotein glycosylation", *Biochimica Et Biophysica Acta-Proteins and Proteomics* 1764(12), 1853-1869. doi: 10.1016/j.bbapap.2006.10.007.
- Geyer, H. ve Geyer, R. 2006b. "Strategies for analysis of glycoprotein glycosylation", *Biochim Biophys Acta* 1764(12), 1853-69. doi: 10.1016/j.bbapap.2006.10.007.
- Hakomori, S. I. 1989. "Aberrant Glycosylation In Tumors And Tumor-Associated Carbohydrate Antigens", *Advances in Cancer Research* 52, 257-331. doi: 10.1016/s0065-230x(08)60215-8.
- Hanisch, F. G., Jovanovic, M. ve Peter-Katalinic, J. 2001. "Glycoprotein identification and localization of O-glycosylation sites by mass spectrometric analysis of deglycosylated/alkylaminylated peptide fragments", *Anal Biochem* 290(1), 47-59. doi: 10.1006/abio.2000.4955.
- Huhn, C., Selman, M. H., Ruhaak, L. R., Deelder, A. M. ve Wührer, M. 2009. "IgG glycosylation analysis", *Proteomics* 9(4), 882-913. doi: 10.1002/pmic.200800715.
- Hulsen, T., de Vlieg, J. ve Alkema, W. 2008. "BioVenn – a web application for the comparison and visualization of biological lists using area-proportional Venn diagrams", *BMC Genomics* 9(1), 488. doi: 10.1186/1471-2164-9-488.

- Lasky, L. A. 1995. "Selectin-carbohydrate interactions and the initiation of the inflammatory response", *Annual Review of Biochemistry* 64, 113-139.
- Li, K., Vaudel, M., Zhang, B., Ren, Y. ve Wen, B. 2019. "PDV: an integrative proteomics data viewer", *Bioinformatics* 35(7), 1249-1251. doi: 10.1093/bioinformatics/bty770.
- Lis-Kuberka, J., Berghausen-Mazur, M. ve Orczyk-Pawiłowicz, M. 2017. "Alpha 2,3- and alpha 2,6-sialylation of human skim milk glycoproteins during milk maturation", *Journal of Applied Biomedicine* 15(3), 196-203.
- Mechref, Y. ve Novotny, M. V. 2002. "Structural investigations of glycoconjugates at high sensitivity", *Chem Rev* 102(2), 321-69.
- Molinari, C. E., Casadio, Y. S., Hartmann, B. T., Livk, A., Bringans, S., Arthur, P. G. ve Hartmann, P. E. 2012. "Proteome Mapping of Human Skim Milk Proteins in Term and Preterm Milk", *Journal of Proteome Research* 11(3), 1696-1714. doi: 10.1021/pr2008797.
- Nwosu, C. C., Aldredge, D. L., Lee, H., Lerno, L. A., Zivkovic, A. M., German, J. B. ve Lebrilla, C. B. 2012. "Comparison of the Human and Bovine Milk N-Glycome via High-Performance Microfluidic Chip Liquid Chromatography and Tandem Mass Spectrometry", *Journal of Proteome Research* 11(5), 2912-2924. doi: 10.1021/pr300008u.
- Ohtsubo, K. ve Marth, J. D. 2006. "Glycosylation in cellular mechanisms of health and disease", *Cell* 126(5), 855-867. doi: 10.1016/j.cell.2006.08.019.
- Paulson, J. C. 1989. "Glycoproteins - what are the sugar chains for?", *Trends in Biochemical Sciences* 14(7), 272-276. doi: 10.1016/0968-0004(89)90062-5.
- Polasky, D. A., Yu, F., Teo, G. C. ve Nesvizhskii, A. I. 2020. "Fast and comprehensive N- and O-glycoproteomics analysis with MSFragger-Glyco", *Nature Methods* 17(11), 1125-1132. doi: 10.1038/s41592-020-0967-9.
- Reiding, K. R., Blank, D., Kuijper, D. M., Deelder, A. M. ve Wührer, M. 2014. "High-Throughput Profiling of Protein N-Glycosylation by MALDI-TOF-MS Employing Linkage-Specific Sialic Acid Esterification", *Analytical Chemistry* 86(12), 5784-5793. doi: 10.1021/ac500335t.
- Rudd, P. M., Elliott, T., Cresswell, P., Wilson, I. A. ve Dwek, R. A. 2001. "Glycosylation and the immune system", *Science* 291(5512), 2370-2376. doi: 10.1126/science.291.5512.2370.
- Ruhaak, L. R., Huhn, C., Waterreus, W. J., de Boer, A. R., Neususs, C., Hokke, C. H., Deelder, A. M. ve Wührer, M. 2008. "Hydrophilic interaction chromatography-based high-throughput sample preparation method for N-glycan analysis from total human plasma glycoproteins", *Analytical Chemistry* 80(15), 6119-6126. doi: 10.1021/ac800630x.
- Ruhaak, L. R., Zauner, G., Huhn, C., Bruggink, C., Deelder, A. M. ve Wührer, M. 2010. "Glycan labeling strategies and their use in identification and quantification", *Anal Bioanal Chem* 397(8), 3457-81. doi: 10.1007/s00216-010-3532-z.
- Selman, M. H. J., Hemayatkar, M., Deelder, A. M. ve Wührer, M. 2011. "Cotton HILIC SPE Microtips for Microscale Purification and Enrichment of Glycans and Glycopeptides", *Analytical Chemistry* 83(7), 2492-2499. doi: 10.1021/ac1027116.
- van Leeuwen, S. S., Schoemaker, R. J. W., Timmer, C. J. A. M., Kamerling, J. P. ve Dijkhuizen, L. 2012. "N- and O-Glycosylation of a Commercial Bovine Whey Protein Product", *Journal of Agricultural and Food Chemistry* 60(51), 12553-12564. doi: 10.1021/jf304000b.
- Varki, A. 1993. "Biological roles of oligosaccharides: all of the theories are correct", *Glycobiology* 3(2), 97-130.
- Velliyagounder, K., Kaplan, J. B., Furgang, D., Legarda, D., Diamond, G., Parkin, R. E. ve Fine, D. H. 2003. "One of two human lactoferrin variants exhibits increased antibacterial and transcriptional activation activities and is associated with localized juvenile periodontitis", *Infect Immun* 71(11), 6141-7. doi: 10.1128/iai.71.11.6141-6147.2003.
- Wang, W. L., Wang, W., Du, Y. M., Wu, H., Yu, X. B., Ye, K. P., Li, C. B., Jung, Y. S., Qian, Y. J., Voglmeir, J. ve Liu, L. 2017. "Comparison of anti-pathogenic activities of the human

- and bovine milk N-glycome: Fucosylation is a key factor", *Food Chemistry* 235, 167-174. doi: 10.1016/j.foodchem.2017.05.026.
- Wuhrer, M., Catalina, M. I., Deelder, A. M. ve Hokke, C. H. 2007. "Glycoproteomics based on tandem mass spectrometry of glycopeptides", *Journal of Chromatography B-Analytical Technologies in the Biomedical and Life Sciences* 849(1-2), 115-128. doi: 10.1016/j.jchromb.2006.09.041.
- Yang, Y. X., Zheng, N., Zhao, X. W., Zhang, Y. D., Han, R. W., Zhao, S. G., Yang, J. H., Li, S. L., Guo, T. J., Zang, C. J. ve Wang, J. Q. 2017. "N-glycosylation proteomic characterization and cross-species comparison of milk whey proteins from dairy animals", *Proteomics* 17(9). doi: UNSP 1600434
10.1002/pmic.201600434.
- Zaia, J. 2010. "Mass Spectrometry and Glycomics", *Omics-a Journal of Integrative Biology* 14(4), 401-418. doi: 10.1089/omi.2009.0146.
- Zimecki, M. ve Artym, J. 2005. "[Therapeutic properties of proteins and peptides from colostrum and milk]", *Postepy Hig Med Dosw (Online)* 59, 309-23.

7. EKLER

Tablo Ek1. Anne sütü whey glikoproteinlerinden tespit edilen *N*-glikanların listesi. MS/MS'i gerçekleştirilen glikanlara ait sadece B ve Y iyonlarının eşleşmeleri tabloya ilave edilmiştir. *. Serbest süt oligosakkarit profili ile aynı m/z 'ye sahip potansiyel *N*-glikanlar.Koyu işaretliler iç kalibrasyon piklerini temsil etmektedir.

	Detected		Calculated			
	m/z	composition	mass (Da)	error (Da)	error (ppm)	MS/MS Peaks
1*	1095.370	H4N2	1095.370	-0.0002	-0.1606	
2*	1136.393	H3N3	1136.396	0.0034	2.9683	
3*	1257.423	H5N2	1257.423	-0.0004	-0.2803	388.183: Y-Hex1HexNAc1-B,Hex1HexNAc1-B, 406.23: YY-Hex1HexNAc1,Y-Hex1HexNAc1, 550.21: Y-Hex2HexNAc1-B,Hex2HexNAc1-B, 568.214: YY-Hex2HexNAc1,Y-Hex2HexNAc1, 753.305: Y-Hex2HexNAc2-B,Hex2HexNAc2-B, 892.276: YY-Hex4HexNAc1,Y-Hex4HexNAc1, 915.355: Y-Hex3HexNAc2-B,Hex3HexNAc2-B, 933.384: YY-Hex3HexNAc2,Y-Hex3HexNAc2, 1077.409: Y-Hex4HexNAc2-B,Hex4HexNAc2-B, 1095.403: YY-Hex4HexNAc2,Y-Hex4HexNAc2, 1257.452: YY-Hex5HexNAc2,Y-Hex5HexNAc2
4	1282.451	H3N3F1	1282.454	0.0033	2.5592	
5	1419.476	H6N2	1419.475	-0.0005	-0.3727	
6	1444.504	H4N3F1	1444.507	0.0031	2.1498	
7*	1460.501	H5N3	1460.502	0.0010	0.6984	202.163: YY-Hex1,Y-Hex1, 406.236: YY-Hex1HexNAc1,Y-Hex1HexNAc1, 730.189: YY-Hex3HexNAc1,Y-Hex3HexNAc1, 753.125: Y-Hex2HexNAc2-B,Hex2HexNAc2-B, 915.224: Y-Hex3HexNAc2-B,Hex3HexNAc2-B, 1095.265: YY-Hex4HexNAc2,Y-Hex4HexNAc2, 1118.312: Y-Hex3HexNAc3-B,Hex3HexNAc3-B, 1298.317: YY-Hex4HexNAc3,Y-Hex4HexNAc3, 1460.461: YY-Hex5HexNAc3,Y-Hex5HexNAc3
8	1485.525	H3N4F1	1485.534	0.0087	5.8259	730.173: YY-Hex3HexNAc1,Y-Hex3HexNAc1, 876.215: YY-Hex3HexNAc1dHex1,Y-Hex3HexNAc1dHex1, 1322.393: Y-Hex3HexNAc4-B,Hex3HexNAc4-B, 1340.314: YY-Hex3HexNAc4,Y-Hex3HexNAc4, 1486.464: YY-Hex3HexNAc4dHex1,Y-Hex3HexNAc4dHex1
9	1501.528	H4N4	1501.529	0.0006	0.3790	
10	1542.558	H3N5	1542.555	-0.0029	-1.8682	388.165: Y-Hex1HexNAc1-B,Hex1HexNAc1-B, 730.177: YY-Hex3HexNAc1,Y-Hex3HexNAc1, 1542.425: YY-Hex3HexNAc5,Y-Hex3HexNAc5
11	1581.530	H7N2	1581.528	-0.0017	-1.0785	
12*	1606.560	H5N3F1	1606.560	-0.0001	-0.0443	
13*	1617.577	H4N3E1	1617.576	-0.0011	-0.6718	
14*	1622.539	H6N3	1622.555	0.0158	9.7645	
15*	1647.588	H4N4F1	1647.586	-0.0015	-0.9238	
16	1663.579	H5N4	1663.581	0.0024	1.4382	
17	1688.613	H3N5F1	1688.613	0.0000	0.0160	226.058: Y-HexNAc1-B,HexNAc1-B; 372.1: Y-HexNAc1dHex1-B,HexNAc1dHex1-B; 388.146: Y-Hex1HexNAc1-B,Hex1HexNAc1-B; 406.188: YY-Hex1HexNAc1,Y-Hex1HexNAc1; 447.164: YY-HexNAc2,Y-HexNAc2; 550.189: Y-Hex2HexNAc1-B,Hex2HexNAc1-B; 593.107: YY-HexNAc2dHex1,Y-HexNAc2dHex1; 712.243: Y-Hex3HexNAc1-B,Hex3HexNAc1-B; 753.187: Y-Hex2HexNAc2-B,Hex2HexNAc2-B; 876.272: YY-Hex3HexNAc1dHex1,Y-Hex3HexNAc1dHex1; 899.245: Y-Hex2HexNAc2dHex1-B,Hex2HexNAc2dHex1-B; 915.207: Y-Hex3HexNAc2-B,Hex3HexNAc2-B; 1118.248: Y-Hex3HexNAc3-B,Hex3HexNAc3-B; 1136.283: YY-Hex3HexNAc3,Y-Hex3HexNAc3; 1321.312: Y-

						Hex3HexNac4-B,Hex3HexNac4-B; 1339.386: YY-Hex3HexNac4,Y-Hex3HexNac4; 1485.403: YY-Hex3HexNac4dHex1,Y-Hex3HexNac4dHex1; 1524.459: Y-Hex3HexNac5-B,Hex3HexNac5-B; 1526.539: YY-Hex2HexNac5dHex1,Y-Hex2HexNac5dHex1; 1542.4: YY-Hex3HexNac5,Y-Hex3HexNac5; 1688.484: YY-Hex3HexNac5dHex1,Y-Hex3HexNac5dHex1
18	1704.595	H4N5	1704.608	0.0129	7.5922	
19*	1733.619	H5N3L1	1733.587	-0.0321	-18.5328	
20	1743.582	H8N2	1743.581	-0.0009	-0.5060	
21	1763.633	H4N3F1E1	1763.634	0.0008	0.4661	
22*	1779.628	H5N3E1	1779.629	0.0007	0.4139	
						186.064: YY-dHex1,Y-dHex1; 226.085: Y-HexNac1-B,HexNac1-B; 331.112: Y-Hex1dHex1-B,Hex1dHex1-B; 388.11: Y-Hex1HexNac1-B,Hex1HexNac1-B; 406.233: YY-Hex1HexNac1,Y-Hex1HexNac1; 509.132: Y-Hex3-B,Hex3-B; 534.173: Y-Hex1HexNac1dHex1-B,Hex1HexNac1dHex1-B; 550.154: Y-Hex2HexNac1-B,Hex2HexNac1-B; 695.276: Y-Hex2HexNac1dHex1-B,Hex2HexNac1dHex1-B; 712.196: Y-Hex3HexNac1-B,Hex3HexNac1-B; 730.2: YY-Hex3HexNac1,Y-Hex3HexNac1; 753.208: Y-Hex2HexNac2-B,Hex2HexNac2-B; 771.191: YY-Hex2HexNac2,Y-Hex2HexNac2; 874.207: Y-Hex4HexNac1-B,Hex4HexNac1-B; 876.258: YY-Hex3HexNac1dHex1,Y-Hex3HexNac1dHex1; 899.258: Y-Hex2HexNac2dHex1-B,Hex2HexNac2dHex1-B; 915.253: Y-Hex3HexNac2-B,Hex3HexNac2-B; 933.262: YY-Hex3HexNac2,Y-Hex3HexNac2; 1061.283: Y-Hex3HexNac2dHex1-B,Hex3HexNac2dHex1-B; 1077.245: Y-Hex4HexNac2-B,Hex4HexNac2-B; 1079.269: YY-Hex3HexNac2dHex1,Y-Hex3HexNac2dHex1; 1095.293: YY-Hex4HexNac2,Y-Hex4HexNac2; 1118.287: Y-Hex3HexNac3-B,Hex3HexNac3-B; 1121.274: YY-Hex2HexNac3dHex1,Y-Hex2HexNac3dHex1; 1136.282: YY-Hex3HexNac3,Y-Hex3HexNac3; 1143.322: Y-Hex1HexNac4dHex1-B,Hex1HexNac4dHex1-B; 1239.278: Y-Hex5HexNac2-B,Hex5HexNac2-B; 1264.37: Y-Hex3HexNac3dHex1-B,Hex3HexNac3dHex1-B; 1280.357: Y-Hex4HexNac3-B,Hex4HexNac3-B; 1283.363: YY-Hex3HexNac3dHex1,Y-Hex3HexNac3dHex1; 1299.321: YY-Hex4HexNac3,Y-Hex4HexNac3; 1321.341: Y-Hex3HexNac4-B,Hex3HexNac4-B; 1427.423: Y-Hex4HexNac3dHex1-B,Hex4HexNac3dHex1-B; 1442.383: Y-Hex5HexNac3-B,Hex5HexNac3-B; 1444.375: YY-Hex4HexNac3dHex1,Y-Hex4HexNac3dHex1; 1460.428: YY-Hex5HexNac3,Y-Hex5HexNac3; 1485.404: YY-Hex3HexNac4dHex1,Y-Hex3HexNac4dHex1; 1501.438: YY-Hex4HexNac4,Y-Hex4HexNac4; 1606.56: YY-Hex5HexNac3dHex1,Y-Hex5HexNac3dHex1; 1629.716: Y-Hex4HexNac4dHex1-B,Hex4HexNac4dHex1-B; 1647.557: YY-Hex4HexNac4dHex1,Y-Hex4HexNac4dHex1; 1663.472: YY-Hex5HexNac4,Y-Hex5HexNac4; 1809.525: YY-Hex5HexNac4dHex1,Y-Hex5HexNac4dHex1
23	1809.640	H5N4F1	1809.639	-0.0007	-0.3861	
24	1820.658	H4N4E1	1820.655	-0.0027	-1.4908	
25*	1825.634	H6N4	1825.634	0.0002	0.1183	
						226.107: Y-HexNac1-B,HexNac1-B; 366.092: YY-Hex2,Y-Hex2; 406.089: YY-Hex1HexNac1,Y-Hex1HexNac1; 447.211: YY-HexNac2,Y-HexNac2; 550.166: Y-Hex2HexNac1-B,Hex2HexNac1-B; 632.219: Y-HexNac3-B,HexNac3-B; 712.198: Y-Hex3HexNac1-B,Hex3HexNac1-B; 730.238: YY-Hex3HexNac1,Y-Hex3HexNac1; 753.205: Y-Hex2HexNac2-B,Hex2HexNac2-B; 915.264: Y-Hex3HexNac2-B,Hex3HexNac2-B; 1077.308: Y-Hex4HexNac2-B,Hex4HexNac2-B; 1118.316: Y-Hex3HexNac3-B,Hex3HexNac3-B; 1137.271: YY-Hex3HexNac3,Y-Hex3HexNac3; 1280.368: Y-Hex4HexNac3-B,Hex4HexNac3-B; 1340.38: YY-Hex3HexNac4,Y-Hex3HexNac4; 1442.36: Y-Hex5HexNac3-B,Hex5HexNac3-B; 1483.433: Y-Hex4HexNac4-B,Hex4HexNac4-B; 1501.407: YY-Hex4HexNac4,Y-Hex4HexNac4; 1704.538: YY-Hex4HexNac5,Y-Hex4HexNac5; 1867.344: YY-Hex5HexNac5,Y-Hex5HexNac5
26*	1850.666	H4N5F1	1850.666	-0.0001	-0.0808	
27	1866.641	H5N5	1866.661	0.0198	10.5885	
28	1905.636	H9N2	1905.634	-0.0021	-1.0804	
29*	1941.681	H6N3E1	1941.682	0.0006	0.2885	

30	1966.710	H4N4F1E1	1966.713	0.0032	1.6243	226.136: Y-HexNac1-B,HexNac1-B; 366.105: YY-Hex2,Y-Hex2; 388.115: Y-Hex1HexNac1-B,Hex1HexNac1-B; 406.168: YY-Hex1HexNac1,Y-Hex1HexNac1; 504.175: Y-Hex1Neu5Ac-Est1-B,Hex1Neu5Ac-Est1-B; 550.192: Y-Hex2HexNac1-B,Hex2HexNac1-B; 568.21: YY-Hex2HexNac1,Y-Hex2HexNac1; 707.203: Y-Hex1HexNac1Neu5Ac-Est1-B,Hex1HexNac1Neu5Ac-Est1-B; 712.221: Y-Hex3HexNac1-B,Hex3HexNac1-B; 730.305: YY-Hex3HexNac1,Y-Hex3HexNac1; 753.317: Y-Hex2HexNac2-B,Hex2HexNac2-B; 915.242: Y-Hex3HexNac2-B,Hex3HexNac2-B; 933.28: YY-Hex3HexNac2,Y-Hex3HexNac2; 1077.28: Y-Hex4HexNac2-B,Hex4HexNac2-B; 1095.329: YY-Hex4HexNac2,Y-Hex4HexNac2; 1118.359: Y-Hex3HexNac3-B,Hex3HexNac3-B; 1136.257: YY-Hex3HexNac3,Y-Hex3HexNac3; 1280.384: Y-Hex4HexNac3-B,Hex4HexNac3-B; 1298.312: YY-Hex4HexNac3,Y-Hex4HexNac3; 1396.367: Y-Hex4HexNac2Neu5Ac-Est1-B,Hex4HexNac2Neu5Ac-Est1-B; 1460.438: YY-Hex5HexNac3,Y-Hex5HexNac3; 1478.303: Y-Hex2HexNac4Neu5Ac-Est1-B,Hex2HexNac4Neu5Ac-Est1-B; 1501.431: YY-Hex4HexNac4,Y-Hex4HexNac4; 1558.396: Y-Hex5HexNac2Neu5Ac-Est1-B,Hex5HexNac2Neu5Ac-Est1-B; 1617.437: YY-Hex4HexNac3Neu5Ac-Est1,Y-Hex4HexNac3Neu5Ac-Est1; 1663.501: YY-Hex5HexNac4,Y-Hex5HexNac4; 1761.526: Y-Hex5HexNac3Neu5Ac-Est1-B,Hex5HexNac3Neu5Ac-Est1-B; 1820.596: YY-Hex4HexNac4Neu5Ac-Est1,Y-Hex4HexNac4Neu5Ac-Est1; 1982.531: YY-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1,Y-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1
31	1982.709	H5N4E1	1982.708	-0.0009	-0.4493	
32	2012.719	H5N5F1	2012.719	-0.0003	-0.1620	168.113: Y-dHex1-B,dHex1-B; 226.119: Y-HexNac1-B,HexNac1-B; 331.142: Y-Hex1dHex1-B,Hex1dHex1-B; 388.114: Y-Hex1HexNac1-B,Hex1HexNac1-B; 550.171: Y-Hex2HexNac1-B,Hex2HexNac1-B; 568.258: YY-Hex2HexNac1,Y-Hex2HexNac1; 712.229: Y-Hex3HexNac1-B,Hex3HexNac1-B; 753.198: Y-Hex2HexNac2-B,Hex2HexNac2-B; 876.226: YY-Hex3HexNac1dHex1,Y-Hex3HexNac1dHex1; 899.258: Y-Hex2HexNac2dHex1-B,Hex2HexNac2dHex1-B; 933.213: YY-Hex3HexNac2,Y-Hex3HexNac2; 1077.281: Y-Hex4HexNac2-B,Hex4HexNac2-B; 1118.358: Y-Hex3HexNac3-B,Hex3HexNac3-B; 1137.274: YY-Hex3HexNac3,Y-Hex3HexNac3; 1143.264: Y-Hex1HexNac4dHex1-B,Hex1HexNac4dHex1-B; 1264.362: Y-Hex3HexNac3dHex1-B,Hex3HexNac3dHex1-B; 1280.303: Y-Hex4HexNac3-B,Hex4HexNac3-B; 1298.451: YY-Hex4HexNac3,Y-Hex4HexNac3; 1322.335: Y-Hex3HexNac4-B,Hex3HexNac4-B; 1442.32: Y-Hex5HexNac3-B,Hex5HexNac3-B; 1485.433: YY-Hex3HexNac4dHex1,Y-Hex3HexNac4dHex1; 1501.393: YY-Hex4HexNac4,Y-Hex4HexNac4; 1524.458: Y-Hex3HexNac5-B,Hex3HexNac5-B; 1606.569: YY-Hex5HexNac3dHex1,Y-Hex5HexNac3dHex1; 1645.436: Y-Hex5HexNac4-B,Hex5HexNac4-B; 1647.448: YY-Hex4HexNac4dHex1,Y-Hex4HexNac4dHex1; 1663.489: YY-Hex5HexNac4,Y-Hex5HexNac4; 1808.675: YY-Hex5HexNac4dHex1,Y-Hex5HexNac4dHex1; 1833.628: Y-Hex4HexNac5dHex1-B,Hex4HexNac5dHex1-B; 1848.647: Y-Hex5HexNac5-B,Hex5HexNac5-B; 1851.594: YY-Hex4HexNac5dHex1,Y-Hex4HexNac5dHex1; 2012.515: YY-Hex5HexNac5dHex1,Y-Hex5HexNac5dHex1
33	2023.743	H4N5E1	2023.735	-0.0083	-4.1219	
34	2128.766	H5N4F1E1	2128.766	0.0000	0.0085	168.113: Y-dHex1-B,dHex1-B; 186.1: YY-dHex1,Y-dHex1; 331.209: Y-Hex1dHex1-B,Hex1dHex1-B; 360.074: YY-Neu5Ac-Est1,Y-Neu5Ac-Est1; 372.122: Y-HexNac1dHex1-B,HexNac1dHex1-B; 388.103: Y-Hex1HexNac1-B,Hex1HexNac1-B; 406.113: YY-Hex1HexNac1,Y-Hex1HexNac1; 447.149: YY-HexNac2,Y-HexNac2; 504.11: Y-Hex1Neu5Ac-Est1-B,Hex1Neu5Ac-Est1-B; 550.14: Y-Hex2HexNac1-B,Hex2HexNac1-B; 568.106: YY-Hex2HexNac1,Y-Hex2HexNac1; 593.102: YY-HexNac2dHex1,Y-HexNac2dHex1; 707.159: Y-Hex1HexNac1Neu5Ac-Est1-B,Hex1HexNac1Neu5Ac-Est1-B; 712.157: Y-Hex3HexNac1-B,Hex3HexNac1-B; 730.228: YY-Hex3HexNac1,Y-Hex3HexNac1; 753.185: Y-Hex2HexNac2-B,Hex2HexNac2-B; 869.223: Y-Hex2HexNac1Neu5Ac-Est1-B,Hex2HexNac1Neu5Ac-Est1-B; 874.195: Y-Hex4HexNac1-B,Hex4HexNac1-B; 876.284: YY-Hex3HexNac1dHex1,Y-Hex3HexNac1dHex1; 899.282: Y-Hex2HexNac2dHex1-B,Hex2HexNac2dHex1-B; 915.245: Y-Hex3HexNac2-B,Hex3HexNac2-B; 917.25: YY-Hex2HexNac2dHex1,Y-Hex2HexNac2dHex1; 933.264: YY-Hex3HexNac2,Y-Hex3HexNac2; 1077.224: Y-Hex4HexNac2-B,Hex4HexNac2-B; 1079.238: YY-

						Hex3HexNac2dHex1,Y-Hex3HexNac2dHex1; 1118.358: Y-Hex3HexNac3-B,Hex3HexNac3-B; 1136.207: Y-Hex4Neu5Ac-Est1dHex1-B,Hex4Neu5Ac-Est1dHex1-B,YY-Hex3HexNac3,Y-Hex3HexNac3; 1144.135: Y-Hex1HexNac4dHex1-B,Hex1HexNac4dHex1-B; 1193.242: Y-Hex4HexNac1Neu5Ac-Est1-B,Hex4HexNac1Neu5Ac-Est1-B; 1239.325: Y-Hex5HexNac2-B,Hex5HexNac2-B; 1241.314: YY-Hex4HexNac2dHex1,Y-Hex4HexNac2dHex1; 1264.359: Y-Hex3HexNac3dHex1-B,Hex3HexNac3dHex1-B; 1282.285: YY-Hex3HexNac3dHex1,Y-Hex3HexNac3dHex1; 1298.284: Y-Hex5Neu5Ac-Est1dHex1-B,Hex5Neu5Ac-Est1dHex1-B,YY-Hex4HexNac3,Y-Hex4HexNac3; 1321.825: Y-Hex3HexNac4-B,Hex3HexNac4-B; 1396.311: Y-Hex4HexNac2Neu5Ac-Est1-B,Hex4HexNac2Neu5Ac-Est1-B; 1426.366: Y-Hex4HexNac3dHex1-B,Hex4HexNac3dHex1-B; 1444.312: YY-Hex4HexNac3dHex1,Y-Hex4HexNac3dHex1; 1456.309: YY-Hex3HexNac3Neu5Ac-Est1,Y-Hex3HexNac3Neu5Ac-Est1; 1460.279: YY-Hex5HexNac3,Y-Hex5HexNac3; 1558.361: Y-Hex5HexNac2Neu5Ac-Est1-B,Hex5HexNac2Neu5Ac-Est1-B; 1601.418: YY-Hex3HexNac3Neu5Ac-Est1dHex1,Y-Hex3HexNac3Neu5Ac-Est1dHex1; 1606.446: YY-Hex5HexNac3dHex1,Y-Hex5HexNac3dHex1; 1618.404: YY-Hex4HexNac3Neu5Ac-Est1,Y-Hex4HexNac3Neu5Ac-Est1; 1645.541: Y-Hex5HexNac4-B,Hex5HexNac4-B; 1648.473: YY-Hex4HexNac4dHex1,Y-Hex4HexNac4dHex1; 1663.41: YY-Hex5HexNac4,Y-Hex5HexNac4; 1761.451: Y-Hex5HexNac3Neu5Ac-Est1-B,Hex5HexNac3Neu5Ac-Est1-B; 1763.44: YY-Hex4HexNac3Neu5Ac-Est1dHex1,Y-Hex4HexNac3Neu5Ac-Est1dHex1; 1779.489: YY-Hex5HexNac3Neu5Ac-Est1,Y-Hex5HexNac3Neu5Ac-Est1; 1792.58: Y-Hex5HexNac4dHex1-B,Hex5HexNac4dHex1-B; 1809.49: YY-Hex5HexNac4dHex1,Y-Hex5HexNac4dHex1; 1821.516: YY-Hex4HexNac4Neu5Ac-Est1,Y-Hex4HexNac4Neu5Ac-Est1; 1907.544: Y-Hex5HexNac3Neu5Ac-Est1dHex1-B,Hex5HexNac3Neu5Ac-Est1dHex1-B; 1966.559: YY-Hex4HexNac4Neu5Ac-Est1dHex1,Y-Hex4HexNac4Neu5Ac-Est1dHex1; 1982.525: YY-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1,Y-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1; 2128.539: YY-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1dHex1,Y-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1dHex1
35	2169.790	H4N5F1E1	2169.793	0.0026	1.1831	
36	2185.790	H5N5E1	2185.787	-0.0025	-1.1521	
37	2255.819	H5N4E1L1	2255.793	-0.0260	-11.5432	
38	2274.823	H5N4F2E1	2274.824	0.0009	0.4074	168.16: Y-dHex1-B,dHex1-B; 186.168: YY-dHex1,Y-dHex1; 342.12: Y-Neu5Ac-Est1-B,Neu5Ac-Est1-B; 348.144: YY-Hex1dHex1,Y-Hex1dHex1; 447.234: YY-HexNac2,Y-HexNac2; 504.156: Y-Hex1Neu5Ac-Est1-B,Hex1Neu5Ac-Est1-B; 534.099: Y-Hex1HexNac1dHex1-B,Hex1HexNac1dHex1-B; 550.148: Y-Hex2HexNac1-B,Hex2HexNac1-B; 707.164: Y-Hex1HexNac1Neu5Ac-Est1-B,Hex1HexNac1Neu5Ac-Est1-B; 712.186: Y-Hex3HexNac1-B,Hex3HexNac1-B; 753.188: Y-Hex2HexNac2-B,Hex2HexNac2-B; 869.211: Y-Hex2HexNac1Neu5Ac-Est1-B,Hex2HexNac1Neu5Ac-Est1-B; 874.156: Y-Hex4HexNac1-B,Hex4HexNac1-B; 876.257: YY-Hex3HexNac1dHex1,Y-Hex3HexNac1dHex1; 899.266: Y-Hex2HexNac2dHex1-B,Hex2HexNac2dHex1-B; 915.27: Y-Hex3HexNac2-B,Hex3HexNac2-B; 933.237: YY-Hex3HexNac2,Y-Hex3HexNac2; 1061.316: Y-Hex3HexNac2dHex1-B,Hex3HexNac2dHex1-B; 1077.247: Y-Hex4HexNac2-B,Hex4HexNac2-B; 1079.25: YY-Hex3HexNac2dHex1,Y-Hex3HexNac2dHex1; 1095.254: YY-Hex4HexNac2,Y-Hex4HexNac2; 1193.224: Y-Hex4HexNac1Neu5Ac-Est1-B,Hex4HexNac1Neu5Ac-Est1-B; 1223.312: Y-Hex4HexNac2dHex1-B,Hex4HexNac2dHex1-B; 1241.362: YY-Hex4HexNac2dHex1,Y-Hex4HexNac2dHex1; 1264.351: Y-Hex3HexNac3dHex1-B,Hex3HexNac3dHex1-B; 1282.345: Y-Hex4Neu5Ac-Est1dHex2-B,Hex4Neu5Ac-Est1dHex2-B,YY-Hex3HexNac3dHex1,Y-Hex3HexNac3dHex1; 1298.348: Y-Hex5Neu5Ac-Est1dHex1-B,Hex5Neu5Ac-Est1dHex1-B,YY-Hex4HexNac3,Y-Hex4HexNac3; 1396.269: Y-Hex4HexNac2Neu5Ac-Est1-B,Hex4HexNac2Neu5Ac-Est1-B; 1410.407: Y-Hex3HexNac3dHex2-B,Hex3HexNac3dHex2-B; 1426.368: Y-Hex4HexNac3dHex1-B,Hex4HexNac3dHex1-B; 1428.354: YY-Hex3HexNac3dHex2,Y-Hex3HexNac3dHex2; 1444.357: Y-Hex5Neu5Ac-Est1dHex2-B,Hex5Neu5Ac-Est1dHex2-B,YY-Hex4HexNac3dHex1,Y-Hex4HexNac3dHex1; 1558.369: Y-Hex5HexNac2Neu5Ac-Est1-B,Hex5HexNac2Neu5Ac-Est1-B; 1572.41: Y-Hex4HexNac3dHex2-B,Hex4HexNac3dHex2-B; 1590.382: YY-Hex4HexNac3dHex2,Y-Hex4HexNac3dHex2; 1606.389: YY-Hex5HexNac3dHex1,Y-

						Hex5HexNac3dHex1; 1617.4: YY-Hex4HexNac3Neu5Ac-Est1,Y-Hex4HexNac3Neu5Ac-Est1; 1663.45: YY-Hex5HexNac4,Y-Hex5HexNac4; 1704.408: Y-Hex5HexNac2Neu5Ac-Est1dHex1-B,Hex5HexNac2Neu5Ac-Est1dHex1-B; 1763.461: YY-Hex4HexNac3Neu5Ac-Est1dHex1,Y-Hex4HexNac3Neu5Ac-Est1dHex1; 1791.488: Y-Hex5HexNac4dHex1-B,Hex5HexNac4dHex1-B; 1809.513: YY-Hex5HexNac4dHex1,Y-Hex5HexNac4dHex1; 1907.514: Y-Hex5HexNac3Neu5Ac-Est1dHex1-B,Hex5HexNac3Neu5Ac-Est1dHex1-B; 1925.619: YY-Hex5HexNac3Neu5Ac-Est1dHex1,Y-Hex5HexNac3Neu5Ac-Est1dHex1; 1955.553: YY-Hex5HexNac4dHex2,Y-Hex5HexNac4dHex2; 1966.576: YY-Hex4HexNac4Neu5Ac-Est1dHex1,Y-Hex4HexNac4Neu5Ac-Est1dHex1; 1982.591: YY-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1,Y-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1; 2112.671: YY-Hex4HexNac4Neu5Ac-Est1dHex2,Y-Hex4HexNac4Neu5Ac-Est1dHex2; 2128.598: YY-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1dHex1,Y-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1dHex1; 2256.608: Y-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1dHex2-B,Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1dHex2-B; 2274.565: YY-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1dHex2,Y-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1dHex2
39	2301.833	H5N4E2	2301.835	0.0018	0.7932	
40	2331.848	H5N5F1E1	2331.845	-0.0026	-1.1191	388.144: Y-Hex1HexNac1-B,Hex1HexNac1-B; 447.22: YY-HexNac2,Y-HexNac2; 504.141: Y-Hex1Neu5Ac-Est1-B,Hex1Neu5Ac-Est1-B; 707.198: Y-Hex1HexNac1Neu5Ac-Est1-B,Hex1HexNac1Neu5Ac-Est1-B; 713.18: Y-Hex3HexNac1-B,Hex3HexNac1-B; 869.242: Y-Hex2HexNac1Neu5Ac-Est1-B,Hex2HexNac1Neu5Ac-Est1-B; 1077.304: Y-Hex4HexNac2-B,Hex4HexNac2-B; 1396.283: Y-Hex4HexNac2Neu5Ac-Est1-B,Hex4HexNac2Neu5Ac-Est1-B; 1617.366: YY-Hex4HexNac3Neu5Ac-Est1,Y-Hex4HexNac3Neu5Ac-Est1; 1821.538: YY-Hex4HexNac4Neu5Ac-Est1,Y-Hex4HexNac4Neu5Ac-Est1; 1982.611: YY-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1,Y-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1; 2080.663: Y-Hex5HexNac3Neu5Ac-Est2-B,Hex5HexNac3Neu5Ac-Est2-B; 2099.747: YY-Hex5HexNac3Neu5Ac-Est2,Y-Hex5HexNac3Neu5Ac-Est2; 2122.744: Y-Hex4HexNac4Neu5Ac-Est2-B,Hex4HexNac4Neu5Ac-Est2-B; 2301.555: YY-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est2,Y-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est2
41	2347.841	H6N5E1	2347.840	-0.0007	-0.2960	
42	2401.861	H5N4F1E1L1	2401.851	-0.0101	-4.2177	
43	2429.932	H4N7E1	2429.893	-0.0386	-15.8841	
44	2447.894	H5N4F1E2	2447.893	-0.0013	-0.5169	168.19: Y-dHex1-B,dHex1-B; 388.122: Y-Hex1HexNac1-B,Hex1HexNac1-B; 447.218: YY-HexNac2,Y-HexNac2; 487.224: Y-Neu5Ac-Est1dHex1-B,Neu5Ac-Est1dHex1-B; 504.157: Y-Hex1Neu5Ac-Est1-B,Hex1Neu5Ac-Est1-B; 707.135: Y-Hex1HexNac1Neu5Ac-Est1-B,Hex1HexNac1Neu5Ac-Est1-B; 869.213: Y-Hex2HexNac1Neu5Ac-Est1-B,Hex2HexNac1Neu5Ac-Est1-B; 899.196: Y-Hex2HexNac2dHex1-B,Hex2HexNac2dHex1-B; 933.198: YY-Hex3HexNac2,Y-Hex3HexNac2; 1031.214: Y-Hex3HexNac1Neu5Ac-Est1-B,Hex3HexNac1Neu5Ac-Est1-B; 1077.265: Y-Hex4HexNac2-B,Hex4HexNac2-B; 1193.295: Y-Hex4HexNac1Neu5Ac-Est1-B,Hex4HexNac1Neu5Ac-Est1-B; 1282.31: YY-Hex3HexNac3dHex1,Y-Hex3HexNac3dHex1; 1396.324: Y-Hex4HexNac2Neu5Ac-Est1-B,Hex4HexNac2Neu5Ac-Est1-B; 1444.378: YY-Hex4HexNac3dHex1,Y-Hex4HexNac3dHex1; 1601.421: YY-Hex3HexNac3Neu5Ac-Est1dHex1,Y-Hex3HexNac3Neu5Ac-Est1dHex1; 1606.397: YY-Hex5HexNac3dHex1,Y-Hex5HexNac3dHex1; 1617.368: Y-Hex5Neu5Ac-Est2dHex1-B,Hex5Neu5Ac-Est2dHex1-B,YY-Hex4HexNac3Neu5Ac-Est1,Y-Hex4HexNac3Neu5Ac-Est1; 1745.433: Y-Hex4HexNac3Neu5Ac-Est1dHex1-B,Hex4HexNac3Neu5Ac-Est1dHex1-B; 1763.417: YY-Hex4HexNac3Neu5Ac-Est1dHex1,Y-Hex4HexNac3Neu5Ac-Est1dHex1; 1877.499: Y-Hex5HexNac2Neu5Ac-Est2-B,Hex5HexNac2Neu5Ac-Est2-B; 1966.519: YY-Hex4HexNac4Neu5Ac-Est1dHex1,Y-Hex4HexNac4Neu5Ac-Est1dHex1; 1982.506: YY-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1,Y-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1; 2080.582: Y-Hex5HexNac3Neu5Ac-Est2-B,Hex5HexNac3Neu5Ac-Est2-B; 2098.566: YY-Hex5HexNac3Neu5Ac-Est2,Y-Hex5HexNac3Neu5Ac-Est2; 2110.628: Y-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1dHex1-B,Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1dHex1-B; 2128.603: YY-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1dHex1,Y-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1dHex1; 2245.646: YY-Hex5HexNac3Neu5Ac-Est2dHex1,Y-Hex5HexNac3Neu5Ac-Est2dHex1; 2283.578: Y-

						Hex5HexNac4Neu5Ac-Est2-B,Hex5HexNac4Neu5Ac-Est2-B; 2301.646: YY-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est2,Y-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est2; 2447.54: YY-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est2dHex1,Y-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est2dHex1
45	2493.900	H6N5F1E1	2493.898	-0.0018	-0.7162	707.228: Y-Hex1HexNac1Neu5Ac-Est1-B,Hex1HexNac1Neu5Ac-Est1-B; 1264.423: Y-Hex3HexNac3dHex1-B,Hex3HexNac3dHex1-B; 1396.257: Y-Hex4HexNac2Neu5Ac-Est1-B,Hex4HexNac2Neu5Ac-Est1-B; 1444.337: YY-Hex4HexNac3dHex1,Y-Hex4HexNac3dHex1; 1763.634: YY-Hex4HexNac3Neu5Ac-Est1dHex1,Y-Hex4HexNac3Neu5Ac-Est1dHex1; 2128.695: YY-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1dHex1,Y-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1dHex1; 2331.585: YY-Hex5HexNac5Neu5Ac-Est1dHex1,Y-Hex5HexNac5Neu5Ac-Est1dHex1; 2493.543: YY-Hex6HexNac5Neu5Ac-Est1dHex1,Y-Hex6HexNac5Neu5Ac-Est1dHex1
46	2504.952	H5N5E2	2504.914	-0.0378	-15.0910	
47	2574.974	H6N5L2	2574.883	-0.0907	-35.2280	
48	2639.957	H6N5F2E1	2639.956	-0.0009	-0.3323	
49	2650.971	H5N5F1E2	2650.972	0.0011	0.4176	
50	2666.937	H6N5E2	2666.967	0.0300	11.2569	
51	2786.014	H6N5F3E1	2786.014	0.0000	0.0113	
52*	2801.995	H7N5F2E1	2802.009	0.0139	4.9772	
53	2813.017	H6N5F1E2	2813.025	0.0079	2.8192	
54*	2848.014	H8N6F2	2848.014	0.0004	0.1494	
55	2932.072	H6N5F4E1	2932.072	-0.0001	-0.0204	
56	2940.072	H6N5E2L1	2940.052	-0.0201	-6.8456	
57	2986.084	H6N5E3	2986.094	0.0097	3.2612	
58	3005.086	H7N6F2E1	3005.088	0.0023	0.7716	
59	3059.087	H6N5F3E1L1	3059.099	0.0119	3.8846	
60	3086.092	H6N5F1E2L1	3086.110	0.0178	5.7621	
61	3105.123	H6N5F3E2	3105.141	0.0177	5.7157	
62	3132.140	H6N5F1E3	3132.152	0.0116	3.7186	
63	3151.146	H7N6F3E1	3151.146	0.0002	0.0722	
64	3232.135	H6N5F2E2L1	3232.168	0.0327	10.1143	
65	3297.211	H7N6F4E1	3297.204	-0.0069	-2.0817	
66	3370.233	H8N7F2E1	3370.221	-0.0125	-3.7046	
67	3470.279	H7N6F3E2	3470.273	-0.0061	-1.7451	

Tablo Ek2. İnek sütü whey glikoproteinlerinden tespit edilen *N*-glikanların listesi. MS/MS'i gerçekleştirilen glikanlara ait sadece B ve Y iyonlarının eşleşmeleri tabloya ilave edilmiştir. *. Selbest süt oligosakkarit profili ile aynı m/z 'ye sahip potansiyel *N*-glikanlar.Koyu işaretliler iç kalibrasyon piklerini temsil etmektedir.

	Detected m/z	composition	Calculated mass (Da)	error (Da)	error (ppm)	MS/MS Peaks
1	1095.371	H4N2	1095.370	-0.0012	-1.0735	
2	1136.396	H3N3	1136.396	0.0004	0.3284	
3	1257.423	H5N2	1257.423	-0.0004	-0.2803	226.061: Y-HexNac1-B,HexNac1-B; 388.124: Y-Hex1HexNac1-B,Hex1HexNac1-B; 429.159: Y-HexNac2-B,HexNac2-B; 447.183: YY-HexNac2,Y-HexNac2; 550.201: Y-Hex2HexNac1-B,Hex2HexNac1-B; 568.135: YY-Hex2HexNac1,Y-Hex2HexNac1; 609.276: YY-Hex1HexNac2,Y-Hex1HexNac2; 671.215: Y-Hex4-B,Hex4-B; 689.14: YY-Hex4,Y-Hex4; 712.359: Y-Hex3HexNac1-B,Hex3HexNac1-B; 730.156: YY-Hex3HexNac1,Y-Hex3HexNac1; 771.264: YY-Hex2HexNac2,Y-Hex2HexNac2; 833.259: Y-Hex5-B,Hex5-B; 874.315: Y-Hex4HexNac1-B,Hex4HexNac1-B; 892.31: YY-Hex4HexNac1,Y-Hex4HexNac1; 933.292: YY-Hex3HexNac2,Y-Hex3HexNac2;

						1036.365: Y-Hex5HexNAc1-B,Hex5HexNAc1-B; 1054.243: YY-Hex5HexNAc1,Y-Hex5HexNAc1; 1095.241: YY-Hex4HexNAc2,Y-Hex4HexNAc2; 1257.482: YY-Hex5HexNAc2,Y-Hex5HexNAc2
4	1282.443	H3N3F1	1282.454	0.0113	8.7972	
5	1298.448	H4N3	1298.449	0.0012	0.9216	
6	1339.472	H3N4	1339.476	0.0037	2.7964	
7	1419.475	H6N2	1419.475	0.0005	0.3318	226.076: Y-HexNAc1-B,HexNAc1-B; 346.127: Y-Hex2-B,Hex2-B; 388.134: Y-Hex1HexNAc1-B,Hex1HexNAc1-B; 429.139: Y-HexNAc2-B,HexNAc2-B; 447.169: YY-HexNAc2,Y-HexNAc2; 509.179: Y-Hex3-B,Hex3-B; 527.2: YY-Hex3,Y-Hex3; 550.225: Y-Hex2HexNAc1-B,Hex2HexNAc1-B; 671.223: Y-Hex4-B,Hex4-B; 713.219: Y-Hex3HexNAc1-B,Hex3HexNAc1-B; 771.306: YY-Hex2HexNAc2,Y-Hex2HexNAc2; 834.248: Y-Hex5-B,Hex5-B; 892.267: YY-Hex4HexNAc1,Y-Hex4HexNAc1; 915.292: Y-Hex3HexNAc2-B,Hex3HexNAc2-B; 933.321: YY-Hex3HexNAc2,Y-Hex3HexNAc2; 995.307: Y-Hex6-B,Hex6-B; 1013.329: YY-Hex6,Y-Hex6; 1036.347: Y-Hex5HexNAc1-B,Hex5HexNAc1-B; 1077.372: Y-Hex4HexNAc2-B,Hex4HexNAc2-B; 1198.418: Y-Hex6HexNAc1-B,Hex6HexNAc1-B; 1216.691: YY-Hex6HexNAc1,Y-Hex6HexNAc1; 1238.867: Y-Hex5HexNAc2-B,Hex5HexNAc2-B; 1257.5: YY-Hex5HexNAc2,Y-Hex5HexNAc2; 1400.505: Y-Hex6HexNAc2-B,Hex6HexNAc2-B; 1419.539: YY-Hex6HexNAc2,Y-Hex6HexNAc2
8	1444.509	H4N3F1	1444.507	-0.0019	-1.3116	
9	1460.499	H5N3	1460.502	0.0030	2.0678	
10	1485.53	H3N4F1	1485.534	0.0037	2.4601	
11	1501.526	H4N4	1501.529	0.0026	1.7110	204.049: YY-Hex1,Y-Hex1; 226.086: Y-HexNAc1-B,HexNAc1-B; 244.098: YY-HexNAc1,Y-HexNAc1; 347.117: Y-Hex2-B,Hex2-B; 388.116: Y-Hex1HexNAc1-B,Hex1HexNAc1-B; 407.128: YY-Hex1HexNAc1,Y-Hex1HexNAc1; 429.166: Y-HexNAc2-B,HexNAc2-B; 447.122: YY-HexNAc2,Y-HexNAc2; 509.172: Y-Hex3-B,Hex3-B; 550.182: Y-Hex2HexNAc1-B,Hex2HexNAc1-B; 671.198: Y-Hex4-B,Hex4-B; 689.174: YY-Hex4,Y-Hex4; 712.226: Y-Hex3HexNAc1-B,Hex3HexNAc1-B; 753.259: Y-Hex2HexNAc2-B,Hex2HexNAc2-B; 772.209: YY-Hex2HexNAc2,Y-Hex2HexNAc2; 875.274: Y-Hex4HexNAc1-B,Hex4HexNAc1-B; 916.297: Y-Hex3HexNAc2-B,Hex3HexNAc2-B; 934.296: YY-Hex3HexNAc2,Y-Hex3HexNAc2; 975.341: YY-Hex2HexNAc3,Y-Hex2HexNAc3; 1077.348: Y-Hex4HexNAc2-B,Hex4HexNAc2-B; 1095.338: YY-Hex4HexNAc2,Y-Hex4HexNAc2; 1137.356: YY-Hex3HexNAc3,Y-Hex3HexNAc3; 1280.428: Y-Hex4HexNAc3-B,Hex4HexNAc3-B; 1298.685: YY-Hex4HexNAc3,Y-Hex4HexNAc3; 1320.907: Y-Hex3HexNAc4-B,Hex3HexNAc4-B; 1338.884: YY-Hex3HexNAc4,Y-Hex3HexNAc4; 1501.536: YY-Hex4HexNAc4,Y-Hex4HexNAc4
12	1542.537	H3N5	1542.555	0.0181	11.7456	
13	1581.528	H7N2	1581.528	0.0003	0.1861	185.043: Y-Hex1-B,Hex1-B; 347.093: Y-Hex2-B,Hex2-B; 388.125: Y-Hex1HexNAc1-B,Hex1HexNAc1-B; 429.144: Y-HexNAc2-B,HexNAc2-B; 448.135: YY-HexNAc2,Y-HexNAc2; 509.145: Y-Hex3-B,Hex3-B; 527.135: YY-Hex3,Y-Hex3; 609.189: YY-Hex1HexNAc2,Y-Hex1HexNAc2; 671.18: Y-Hex4-B,Hex4-B; 689.197: YY-Hex4,Y-Hex4; 712.211: Y-Hex3HexNAc1-B,Hex3HexNAc1-B; 753.212: Y-Hex2HexNAc2-B,Hex2HexNAc2-B; 772.23: YY-Hex2HexNAc2,Y-Hex2HexNAc2; 833.223: Y-Hex5-B,Hex5-B; 874.26: Y-Hex4HexNAc1-B,Hex4HexNAc1-B; 892.298: YY-Hex4HexNAc1,Y-Hex4HexNAc1; 915.225: Y-Hex3HexNAc2-B,Hex3HexNAc2-B; 934.257: YY-Hex3HexNAc2,Y-Hex3HexNAc2; 995.291: Y-Hex6-B,Hex6-B; 1013.218: YY-Hex6,Y-Hex6; 1037.275: Y-Hex5HexNAc1-B,Hex5HexNAc1-B; 1077.357: Y-Hex4HexNAc2-B,Hex4HexNAc2-B; 1095.336: YY-Hex4HexNAc2,Y-Hex4HexNAc2; 1157.322: Y-Hex7-B,Hex7-B; 1175.307: YY-Hex7,Y-Hex7; 1216.273: YY-Hex6HexNAc1,Y-Hex6HexNAc1; 1239.364: Y-Hex5HexNAc2-B,Hex5HexNAc2-B; 1258.376: YY-Hex5HexNAc2,Y-Hex5HexNAc2; 1360.428: Y-Hex7HexNAc1-B,Hex7HexNAc1-B; 1378.783: YY-Hex7HexNAc1,Y-Hex7HexNAc1; 1401.822: Y-Hex6HexNAc2-B,Hex6HexNAc2-B; 1419.62: YY-Hex6HexNAc2,Y-Hex6HexNAc2; 1581.543: YY-Hex7HexNAc2,Y-Hex7HexNAc2
14	1606.546	H5N3F1	1606.560	0.0139	8.6700	
15	1622.553	H6N3	1622.555	0.0018	1.1361	388.118: Y-Hex1HexNAc1-B,Hex1HexNAc1-B; 429.143: Y-HexNAc2-B,HexNAc2-B; 447.115: YY-HexNAc2,Y-HexNAc2; 527.074: YY-Hex3,Y-Hex3; 550.192: Y-Hex2HexNAc1-B,Hex2HexNAc1-B; 671.213: Y-Hex4-B,Hex4-B; 712.24: Y-Hex3HexNAc1-B,Hex3HexNAc1-B; 832.335: Y-Hex5-B,Hex5-B; 834.238: Y-Hex5-B,Hex5-B; 874.202: Y-Hex4HexNAc1-B,Hex4HexNAc1-B; 933.257: YY-Hex3HexNAc2,Y-Hex3HexNAc2; 1036.277: Y-Hex5HexNAc1-B,Hex5HexNAc1-B; 1077.394: Y-Hex4HexNAc2-B,Hex4HexNAc2-B; 1095.328: YY-Hex4HexNAc2,Y-Hex4HexNAc2;

						1136.357: YY-Hex3HexNac3,Y-Hex3HexNac3; 1199.316: Y-Hex6HexNac1-B,Hex6HexNac1-B; 1216.273: YY-Hex6HexNac1,Y-Hex6HexNac1; 1239.37: Y-Hex5HexNac2-B,Hex5HexNac2-B; 1257.382: YY-Hex5HexNac2,Y-Hex5HexNac2; 1298.374: YY-Hex4HexNac3,Y-Hex4HexNac3; 1401.486: Y-Hex6HexNac2-B,Hex6HexNac2-B; 1419.158: YY-Hex6HexNac2,Y-Hex6HexNac2; 1442.837: Y-Hex5HexNac3-B,Hex5HexNac3-B; 1604.593: Y-Hex6HexNac3-B,Hex6HexNac3-B; 1622.561: YY-Hex6HexNac3,Y-Hex6HexNac3
16	1647.584	H4N4F1	1647.586	0.0025	1.5040	
17	1663.579	H5N4	1663.581	0.0024	1.4382	226.059: Y-HexNac1-B,HexNac1-B; 244.1: YY-HexNac1,Y-HexNac1; 347.135: Y-Hex2-B,Hex2-B; 388.131: Y-Hex1HexNac1-B,Hex1HexNac1-B; 429.154: Y-HexNac2-B,HexNac2-B; 447.183: YY-HexNac2,Y-HexNac2; 509.191: Y-Hex3-B,Hex3-B; 527.15: YY-Hex3,Y-Hex3; 550.239: Y-Hex2HexNac1-B,Hex2HexNac1-B; 568.195: YY-Hex2HexNac1,Y-Hex2HexNac1; 671.182: Y-Hex4-B,Hex4-B; 712.248: Y-Hex3HexNac1-B,Hex3HexNac1-B; 771.272: YY-Hex2HexNac2,Y-Hex2HexNac2; 833.253: Y-Hex5-B,Hex5-B; 874.287: Y-Hex4HexNac1-B,Hex4HexNac1-B; 915.296: Y-Hex3HexNac2-B,Hex3HexNac2-B; 933.283: YY-Hex3HexNac2,Y-Hex3HexNac2; 1036.294: Y-Hex5HexNac1-B,Hex5HexNac1-B; 1077.33: Y-Hex4HexNac2-B,Hex4HexNac2-B; 1095.337: YY-Hex4HexNac2,Y-Hex4HexNac2; 1136.352: YY-Hex3HexNac3,Y-Hex3HexNac3; 1239.377: Y-Hex5HexNac2-B,Hex5HexNac2-B; 1257.383: YY-Hex5HexNac2,Y-Hex5HexNac2; 1280.467: Y-Hex4HexNac3-B,Hex4HexNac3-B; 1298.416: YY-Hex4HexNac3,Y-Hex4HexNac3; 1442.492: Y-Hex5HexNac3-B,Hex5HexNac3-B; 1460.5: YY-Hex5HexNac3,Y-Hex5HexNac3; 1483.855: Y-Hex4HexNac4-B,Hex4HexNac4-B; 1501.613: YY-Hex4HexNac4,Y-Hex4HexNac4; 1645.594: Y-Hex5HexNac4-B,Hex5HexNac4-B; 1663.594: YY-Hex5HexNac4,Y-Hex5HexNac4
18	1688.604	H3N5F1	1688.613	0.0090	5.3458	
19	1704.605	H4N5	1704.608	0.0029	1.7257	226.088: Y-HexNac1-B,HexNac1-B; 347.136: Y-Hex2-B,Hex2-B; 388.15: Y-Hex1HexNac1-B,Hex1HexNac1-B; 429.151: Y-HexNac2-B,HexNac2-B; 550.194: Y-Hex2HexNac1-B,Hex2HexNac1-B; 712.217: Y-Hex3HexNac1-B,Hex3HexNac1-B; 753.2: Y-Hex2HexNac2-B,Hex2HexNac2-B; 771.267: YY-Hex2HexNac2,Y-Hex2HexNac2; 874.285: Y-Hex4HexNac1-B,Hex4HexNac1-B; 915.29: Y-Hex3HexNac2-B,Hex3HexNac2-B; 933.309: YY-Hex3HexNac2,Y-Hex3HexNac2; 1077.327: Y-Hex4HexNac2-B,Hex4HexNac2-B; 1118.376: Y-Hex3HexNac3-B,Hex3HexNac3-B; 1136.369: YY-Hex3HexNac3,Y-Hex3HexNac3; 1177.385: YY-Hex2HexNac4,Y-Hex2HexNac4; 1281.407: Y-Hex4HexNac3-B,Hex4HexNac3-B; 1298.424: YY-Hex4HexNac3,Y-Hex4HexNac3; 1321.463: Y-Hex3HexNac4-B,Hex3HexNac4-B; 1339.439: YY-Hex3HexNac4,Y-Hex3HexNac4; 1483.51: Y-Hex4HexNac4-B,Hex4HexNac4-B; 1501.538: YY-Hex4HexNac4,Y-Hex4HexNac4; 1523.918: Y-Hex3HexNac5-B,Hex3HexNac5-B; 1705.597: YY-Hex4HexNac5,Y-Hex4HexNac5
20	1743.582	H8N2	1743.581	-0.0009	-0.5060	
21	1768.605	H6N3F1	1768.613	0.0078	4.3832	
22	1779.627	H5N3E1	1779.629	0.0017	0.9759	
23	1809.638	H5N4F1	1809.639	0.0013	0.7191	168.072: Y-dHex1-B,dHex1-B; 186.08: YY-dHex1,Y-dHex1; 226.122: Y-HexNac1-B,HexNac1-B; 244.097: YY-HexNac1,Y-HexNac1; 372.117: Y-HexNac1dHex1-B,HexNac1dHex1-B; 389.139: YY-HexNac1dHex1,Y-HexNac1dHex1; 447.225: YY-HexNac2,Y-HexNac2; 509.155: Y-Hex3-B,Hex3-B; 527.104: YY-Hex3,Y-Hex3; 550.198: Y-Hex2HexNac1-B,Hex2HexNac1-B; 569.112: YY-Hex2HexNac1,Y-Hex2HexNac1; 593.232: YY-HexNac2dHex1,Y-HexNac2dHex1; 671.221: Y-Hex4-B,Hex4-B; 712.248: Y-Hex3HexNac1-B,Hex3HexNac1-B; 771.262: YY-Hex2HexNac2,Y-Hex2HexNac2; 833.278: Y-Hex5-B,Hex5-B; 875.244: Y-Hex4HexNac1-B,Hex4HexNac1-B; 915.305: Y-Hex3HexNac2-B,Hex3HexNac2-B; 933.332: YY-Hex3HexNac2,Y-Hex3HexNac2; 1037.291: Y-Hex5HexNac1-B,Hex5HexNac1-B; 1077.357: Y-Hex4HexNac2-B,Hex4HexNac2-B; 1080.363: YY-Hex3HexNac2dHex1,Y-Hex3HexNac2dHex1; 1095.388: YY-Hex4HexNac2,Y-Hex4HexNac2; 1118.393: Y-Hex3HexNac3-B,Hex3HexNac3-B; 1136.359: YY-Hex3HexNac3,Y-Hex3HexNac3; 1142.938: Y-Hex1HexNac4dHex1-B,Hex1HexNac4dHex1-B; 1240.382: Y-Hex5HexNac2-B,Hex5HexNac2-B; 1257.412: YY-Hex5HexNac2,Y-Hex5HexNac2; 1282.426: YY-Hex3HexNac3dHex1,Y-Hex3HexNac3dHex1; 1298.445: YY-Hex4HexNac3,Y-Hex4HexNac3; 1321.503: Y-Hex3HexNac4-B,Hex3HexNac4-B; 1384.512: Y-Hex5HexNac2dHex1-B,Hex5HexNac2dHex1-B; 1403.467: YY-Hex5HexNac2dHex1,Y-Hex5HexNac2dHex1; 1426.525: Y-Hex4HexNac3dHex1-B,Hex4HexNac3dHex1-B; 1442.488: Y-Hex5HexNac3-B,Hex5HexNac3-B; 1444.493: YY-Hex4HexNac3dHex1,Y-Hex4HexNac3dHex1; 1460.559: YY-Hex5HexNac3,Y-Hex5HexNac3; 1485.525: YY-



						Hex3HexNac4dHex1,Y-Hex3HexNac4dHex1; 1587.864: Y-Hex5HexNac3dHex1-B,Hex5HexNac3dHex1-B; 1606.636: YY-Hex5HexNac3dHex1,Y-Hex5HexNac3dHex1; 1644.757: Y-Hex5HexNac4-B,Hex5HexNac4-B; 1647.695: YY-Hex4HexNac4dHex1,Y-Hex4HexNac4dHex1; 1809.637: YY-Hex5HexNac4dHex1,Y-Hex5HexNac4dHex1
24	1820.648	H4N4E1	1820.655	0.0073	4.0017	
25	1825.623	H6N4	1825.634	0.0112	6.1436	
26	1850.664	H4N5F1	1850.666	0.0019	0.9999	226.132: Y-HexNac1-B,HexNac1-B; 429.139: Y-HexNac2-B,HexNac2-B; 550.161: Y-Hex2HexNac1-B,Hex2HexNac1-B; 568.257: YY-Hex2HexNac1,Y-Hex2HexNac1; 712.213: Y-Hex3HexNac1-B,Hex3HexNac1-B; 874.324: Y-Hex4HexNac1-B,Hex4HexNac1-B; 916.281: Y-Hex3HexNac2-B,Hex3HexNac2-B; 1078.319: Y-Hex4HexNac2-B,Hex4HexNac2-B; 1118.349: Y-Hex3HexNac3-B,Hex3HexNac3-B; 1136.313: YY-Hex3HexNac3,Y-Hex3HexNac3; 1280.387: Y-Hex4HexNac3-B,Hex4HexNac3-B; 1282.409: YY-Hex3HexNac3dHex1,Y-Hex3HexNac3dHex1; 1298.42: YY-Hex4HexNac3,Y-Hex4HexNac3; 1321.468: Y-Hex3HexNac4-B,Hex3HexNac4-B; 1340.423: YY-Hex3HexNac4,Y-Hex3HexNac4; 1426.496: Y-Hex4HexNac3dHex1-B,Hex4HexNac3dHex1-B; 1444.493: YY-Hex4HexNac3dHex1,Y-Hex4HexNac3dHex1; 1483.498: Y-Hex4HexNac4-B,Hex4HexNac4-B; 1485.507: YY-Hex3HexNac4dHex1,Y-Hex3HexNac4dHex1; 1501.512: YY-Hex4HexNac4,Y-Hex4HexNac4; 1524.561: Y-Hex3HexNac5-B,Hex3HexNac5-B; 1629.804: Y-Hex4HexNac4dHex1-B,Hex4HexNac4dHex1-B; 1647.624: YY-Hex4HexNac4dHex1,Y-Hex4HexNac4dHex1; 1688.774: YY-Hex3HexNac5dHex1,Y-Hex3HexNac5dHex1; 1704.615: YY-Hex4HexNac5,Y-Hex4HexNac5; 1850.66: YY-Hex4HexNac5dHex1,Y-Hex4HexNac5dHex1
27	1866.645	H5N5	1866.661	0.0158	8.4456	
28	1891.69	H3N6F1	1891.692	0.0024	1.2685	
29	1905.636	H9N2	1905.634	-0.0021	-1.0804	185.106: Y-Hex1-B,Hex1-B; 244.111: YY-HexNac1,Y-HexNac1; 346.166: Y-Hex2-B,Hex2-B; 348.064: Y-Hex2-B,Hex2-B; 388.136: Y-Hex1HexNac1-B,Hex1HexNac1-B; 429.174: Y-HexNac2-B,HexNac2-B; 447.161: YY-HexNac2,Y-HexNac2; 510.144: Y-Hex3-B,Hex3-B; 527.181: YY-Hex3,Y-Hex3; 550.287: Y-Hex2HexNac1-B,Hex2HexNac1-B; 609.293: YY-Hex1HexNac2,Y-Hex1HexNac2; 712.306: Y-Hex3HexNac1-B,Hex3HexNac1-B; 753.37: Y-Hex2HexNac2-B,Hex2HexNac2-B; 833.264: Y-Hex5-B,Hex5-B; 851.3: YY-Hex5,Y-Hex5; 874.273: Y-Hex4HexNac1-B,Hex4HexNac1-B; 915.384: Y-Hex3HexNac2-B,Hex3HexNac2-B; 933.354: YY-Hex3HexNac2,Y-Hex3HexNac2; 995.32: Y-Hex6-B,Hex6-B; 1013.263: YY-Hex6,Y-Hex6; 1036.335: Y-Hex5HexNac1-B,Hex5HexNac1-B; 1077.373: Y-Hex4HexNac2-B,Hex4HexNac2-B; 1095.34: YY-Hex4HexNac2,Y-Hex4HexNac2; 1157.362: Y-Hex7-B,Hex7-B; 1175.324: YY-Hex7,Y-Hex7; 1198.362: Y-Hex6HexNac1-B,Hex6HexNac1-B; 1216.308: YY-Hex6HexNac1,Y-Hex6HexNac1; 1258.409: YY-Hex5HexNac2,Y-Hex5HexNac2; 1360.431: Y-Hex7HexNac1-B,Hex7HexNac1-B; 1378.396: YY-Hex7HexNac1,Y-Hex7HexNac1; 1419.465: YY-Hex6HexNac2,Y-Hex6HexNac2; 1481.462: Y-Hex9-B,Hex9-B; 1498.513: YY-Hex9,Y-Hex9; 1540.471: YY-Hex8HexNac1,Y-Hex8HexNac1; 1562.535: Y-Hex7HexNac2-B,Hex7HexNac2-B; 1581.54: YY-Hex7HexNac2,Y-Hex7HexNac2; 1684.571: Y-Hex9HexNac1-B,Hex9HexNac1-B; 1702.608: YY-Hex9HexNac1,Y-Hex9HexNac1; 1724.659: Y-Hex8HexNac2-B,Hex8HexNac2-B; 1743.639: YY-Hex8HexNac2,Y-Hex8HexNac2; 1905.614: YY-Hex9HexNac2,Y-Hex9HexNac2
30	1941.681	H6N3E1	1941.682	0.0006	0.2885	
31	1955.683	H5N4F2	1955.697	0.0142	7.2660	
32	1966.691	H4N4F1E1	1966.713	0.0222	11.2851	
33	1982.707	H5N4E1	1982.708	0.0011	0.5594	226.119: Y-HexNac1-B,HexNac1-B; 388.56: Y-Hex1HexNac1-B,Hex1HexNac1-B; 447.173: YY-HexNac2,Y-HexNac2; 504.159: Y-Hex1Neu5Ac-Est1-B,Hex1Neu5Ac-Est1-B; 509.157: Y-Hex3-B,Hex3-B; 527.178: YY-Hex3,Y-Hex3; 545.204: Y-HexNac1Neu5Ac-Est1-B,HexNac1Neu5Ac-Est1-B; 550.2: Y-Hex2HexNac1-B,Hex2HexNac1-B; 707.252: Y-Hex1HexNac1Neu5Ac-Est1-B,Hex1HexNac1Neu5Ac-Est1-B; 712.263: Y-Hex3HexNac1-B,Hex3HexNac1-B; 748.295: Y-HexNac2Neu5Ac-Est1-B,HexNac2Neu5Ac-Est1-B; 869.303: Y-Hex2HexNac1Neu5Ac-Est1-B,Hex2HexNac1Neu5Ac-Est1-B; 874.31: Y-Hex4HexNac1-B,Hex4HexNac1-B; 915.352: Y-Hex3HexNac2-B,Hex3HexNac2-B; 933.322: YY-Hex3HexNac2,Y-Hex3HexNac2; 1036.35: Y-Hex5HexNac1-B,Hex5HexNac1-B; 1077.347: Y-Hex4HexNac2-B,Hex4HexNac2-B; 1137.368: YY-Hex3HexNac3,Y-Hex3HexNac3; 1193.348: Y-Hex4HexNac1Neu5Ac-Est1-B,Hex4HexNac1Neu5Ac-Est1-B; 1239.433: Y-Hex5HexNac2-

						B,Hex5HexNac2-B; 1257.438: YY-Hex5HexNac2,Y-Hex5HexNac2; 1280.392: Y-Hex4HexNac3-B,Hex4HexNac3-B; 1298.407: YY-Hex4HexNac3,Y-Hex4HexNac3; 1396.486: Y-Hex4HexNac2Neu5Ac-Est1-B,Hex4HexNac2Neu5Ac-Est1-B; 1441.514: Y-Hex5HexNac3-B,Hex5HexNac3-B; 1460.5: YY-Hex5HexNac3,Y-Hex5HexNac3; 1501.563: YY-Hex4HexNac4,Y-Hex4HexNac4; 1558.541: Y-Hex5HexNac2Neu5Ac-Est1-B,Hex5HexNac2Neu5Ac-Est1-B; 1599.569: Y-Hex4HexNac3Neu5Ac-Est1-B,Hex4HexNac3Neu5Ac-Est1-B; 1617.58: YY-Hex4HexNac3Neu5Ac-Est1,Y-Hex4HexNac3Neu5Ac-Est1; 1645.635: Y-Hex5HexNac4-B,Hex5HexNac4-B; 1663.604: YY-Hex5HexNac4,Y-Hex5HexNac4; 1761.707: Y-Hex5HexNac3Neu5Ac-Est1-B,Hex5HexNac3Neu5Ac-Est1-B; 1778.837: YY-Hex5HexNac3Neu5Ac-Est1,Y-Hex5HexNac3Neu5Ac-Est1; 1820.762: YY-Hex4HexNac4Neu5Ac-Est1,Y-Hex4HexNac4Neu5Ac-Est1; 1982.67: YY-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1,Y-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1
34	1998.696	H5N4Ge1	1998.703	0.0070	3.5142	
35	2012.711	H5N5F1	2012.719	0.0077	3.8127	
						226.11: Y-HexNac1-B,HexNac1-B; 388.147: Y-Hex1HexNac1-B,Hex1HexNac1-B; 429.172: Y-HexNac2-B,HexNac2-B; 447.221: YY-HexNac2,Y-HexNac2; 545.199: Y-HexNac1Neu5Ac-Est1-B,HexNac1Neu5Ac-Est1-B; 550.185: Y-Hex2HexNac1-B,Hex2HexNac1-B; 707.281: Y-Hex1HexNac1Neu5Ac-Est1-B,Hex1HexNac1Neu5Ac-Est1-B; 712.33: Y-Hex3HexNac1-B,Hex3HexNac1-B; 748.287: Y-HexNac2Neu5Ac-Est1-B,HexNac2Neu5Ac-Est1-B; 869.391: Y-Hex2HexNac1Neu5Ac-Est1-B,Hex2HexNac1Neu5Ac-Est1-B; 915.384: Y-Hex3HexNac2-B,Hex3HexNac2-B; 933.321: YY-Hex3HexNac2,Y-Hex3HexNac2; 1077.343: Y-Hex4HexNac2-B,Hex4HexNac2-B; 1118.354: Y-Hex3HexNac3-B,Hex3HexNac3-B; 1136.404: YY-Hex3HexNac3,Y-Hex3HexNac3; 1177.333: YY-Hex2HexNac4,Y-Hex2HexNac4; 1280.429: Y-Hex4HexNac3-B,Hex4HexNac3-B; 1298.455: YY-Hex4HexNac3,Y-Hex4HexNac3; 1339.427: YY-Hex3HexNac4,Y-Hex3HexNac4; 1483.542: Y-Hex4HexNac4-B,Hex4HexNac4-B; 1501.508: YY-Hex4HexNac4,Y-Hex4HexNac4; 1524.535: Y-Hex3HexNac5-B,Hex3HexNac5-B; 1599.556: Y-Hex4HexNac3Neu5Ac-Est1-B,Hex4HexNac3Neu5Ac-Est1-B; 1617.562: YY-Hex4HexNac3Neu5Ac-Est1,Y-Hex4HexNac3Neu5Ac-Est1; 1658.591: YY-Hex3HexNac4Neu5Ac-Est1,Y-Hex3HexNac4Neu5Ac-Est1; 1704.616: YY-Hex4HexNac5,Y-Hex4HexNac5; 1802.663: Y-Hex4HexNac4Neu5Ac-Est1-B,Hex4HexNac4Neu5Ac-Est1-B; 1820.682: YY-Hex4HexNac4Neu5Ac-Est1,Y-Hex4HexNac4Neu5Ac-Est1; 2023.669: YY-Hex4HexNac5Neu5Ac-Est1,Y-Hex4HexNac5Neu5Ac-Est1
36	2023.733	H4N5E1	2023.735	0.0017	0.8194	
37	2053.73	H4N6F1	2053.745	0.0152	7.4123	
38	2064.755	H3N6E1	2064.761	0.0062	3.0063	
39	2098.733	H5N4F1GI1	2098.719	-0.0139	-6.6384	
40	2110.762	H4N7	2110.767	0.0047	2.2204	
						226.161: Y-HexNac1-B,HexNac1-B; 331.162: Y-Hex1dHex1-B,Hex1dHex1-B; 342.112: Y-Neu5Ac-Est1-B,Neu5Ac-Est1-B; 360.19: YY-Neu5Ac-Est1,Y-Neu5Ac-Est1; 388.129: Y-Hex1HexNac1-B,Hex1HexNac1-B; 429.163: Y-HexNac2-B,HexNac2-B; 504.175: Y-Hex1Neu5Ac-Est1-B,Hex1Neu5Ac-Est1-B; 522.205: YY-Hex1Neu5Ac-Est1,Y-Hex1Neu5Ac-Est1; 545.22: Y-HexNac1Neu5Ac-Est1-B,HexNac1Neu5Ac-Est1-B; 550.186: Y-Hex2HexNac1-B,Hex2HexNac1-B; 593.277: YY-HexNac2dHex1,Y-HexNac2dHex1; 650.229: Y-Hex1Neu5Ac-Est1dHex1-B,Hex1Neu5Ac-Est1dHex1-B,YY-HexNac3,Y-HexNac3; 707.249: Y-Hex1HexNac1Neu5Ac-Est1-B,Hex1HexNac1Neu5Ac-Est1-B; 712.266: Y-Hex3HexNac1-B,Hex3HexNac1-B; 748.288: Y-HexNac2Neu5Ac-Est1-B,HexNac2Neu5Ac-Est1-B; 869.302: Y-Hex2HexNac1Neu5Ac-Est1-B,Hex2HexNac1Neu5Ac-Est1-B; 874.348: Y-Hex4HexNac1-B,Hex4HexNac1-B; 915.329: Y-Hex3HexNac2-B,Hex3HexNac2-B; 933.312: YY-Hex3HexNac2,Y-Hex3HexNac2; 1077.365: Y-Hex4HexNac2-B,Hex4HexNac2-B; 1079.36: YY-Hex3HexNac2dHex1,Y-Hex3HexNac2dHex1; 1095.348: YY-Hex4HexNac2,Y-Hex4HexNac2; 1136.359: Y-Hex4Neu5Ac-Est1dHex1-B,Hex4Neu5Ac-Est1dHex1-B,YY-Hex3HexNac3,Y-Hex3HexNac3; 1143.568: Y-Hex1HexNac4dHex1-B,Hex1HexNac4dHex1-B; 1193.387: Y-Hex4HexNac1Neu5Ac-Est1-B,Hex4HexNac1Neu5Ac-Est1-B; 1239.412: Y-Hex5HexNac2-B,Hex5HexNac2-B; 1282.427: YY-Hex3HexNac3dHex1,Y-Hex3HexNac3dHex1; 1298.443: Y-Hex5Neu5Ac-Est1dHex1-B,Hex5Neu5Ac-Est1dHex1-B,YY-Hex4HexNac3,Y-Hex4HexNac3; 1322.332: Y-Hex3HexNac4-B,Hex3HexNac4-B; 1396.459: Y-Hex4HexNac2Neu5Ac-Est1-B,Hex4HexNac2Neu5Ac-Est1-B; 1403.478: YY-Hex5HexNac2dHex1,Y-Hex5HexNac2dHex1; 1426.485: Y-Hex4HexNac3dHex1-B,Hex4HexNac3dHex1-B; 1444.47: YY-Hex4HexNac3dHex1,Y-Hex4HexNac3dHex1; 1460.465: YY-
41	2128.765	H5N4F1E1	2128.766	0.0010	0.4782	

						Hex5HexNac3,Y-Hex5HexNac3; 1501.545: Y-Hex5HexNac1Neu5Ac-Est1dHex1-B,Hex5HexNac1Neu5Ac-Est1dHex1-B,YY-Hex4HexNac4,Y-Hex4HexNac4; 1558.515: Y-Hex5HexNac2Neu5Ac-Est1-B,Hex5HexNac2Neu5Ac-Est1-B; 1601.546: YY-Hex3HexNac3Neu5Ac-Est1dHex1,Y-Hex3HexNac3Neu5Ac-Est1dHex1; 1606.55: YY-Hex5HexNac3dHex1,Y-Hex5HexNac3dHex1; 1617.574: YY-Hex4HexNac3Neu5Ac-Est1,Y-Hex4HexNac3Neu5Ac-Est1; 1647.603: YY-Hex4HexNac4dHex1,Y-Hex4HexNac4dHex1; 1663.603: YY-Hex5HexNac4,Y-Hex5HexNac4; 1704.698: Y-Hex5HexNac2Neu5Ac-Est1dHex1-B,Hex5HexNac2Neu5Ac-Est1dHex1-B; 1761.634: Y-Hex5HexNac3Neu5Ac-Est1-B,Hex5HexNac3Neu5Ac-Est1-B; 1763.639: YY-Hex4HexNac3Neu5Ac-Est1dHex1,Y-Hex4HexNac3Neu5Ac-Est1dHex1; 1779.641: YY-Hex5HexNac3Neu5Ac-Est1,Y-Hex5HexNac3Neu5Ac-Est1; 1809.66: YY-Hex5HexNac4dHex1,Y-Hex5HexNac4dHex1; 1907.803: Y-Hex5HexNac3Neu5Ac-Est1dHex1-B,Hex5HexNac3Neu5Ac-Est1dHex1-B; 1948.811: Y-Hex4HexNac4Neu5Ac-Est1dHex1-B,Hex4HexNac4Neu5Ac-Est1dHex1-B; 1964.775: Y-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1-B,Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1-B; 1982.728: YY-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1,Y-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1; 2128.736: YY-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1dHex1,Y-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1dHex1
42	2144.75	H5N4F1Ge1	2144.761	0.0109	5.0974	
43	2169.791	H4N5F1E1	2169.793	0.0016	0.7222	388.15: Y-Hex1HexNac1-B,Hex1HexNac1-B; 429.171: Y-HexNac2-B,HexNac2-B; 505.095: Y-Hex1Neu5Ac-Est1-B,Hex1Neu5Ac-Est1-B; 545.229: Y-HexNac1Neu5Ac-Est1-B,HexNac1Neu5Ac-Est1-B; 550.131: Y-Hex2HexNac1-B,Hex2HexNac1-B; 707.226: Y-Hex1HexNac1Neu5Ac-Est1-B,Hex1HexNac1Neu5Ac-Est1-B; 712.253: Y-Hex3HexNac1-B,Hex3HexNac1-B; 748.274: Y-HexNac2Neu5Ac-Est1-B,HexNac2Neu5Ac-Est1-B; 915.205: Y-Hex3HexNac2-B,Hex3HexNac2-B; 933.348: YY-Hex3HexNac2,Y-Hex3HexNac2; 1077.329: Y-Hex4HexNac2-B,Hex4HexNac2-B; 1079.354: YY-Hex3HexNac2dHex1,Y-Hex3HexNac2dHex1; 1118.41: Y-Hex3HexNac3-B,Hex3HexNac3-B; 1136.415: Y-Hex4Neu5Ac-Est1dHex1-B,Hex4Neu5Ac-Est1dHex1-B,YY-Hex3HexNac3,Y-Hex3HexNac3; 1193.363: Y-Hex4HexNac1Neu5Ac-Est1-B,Hex4HexNac1Neu5Ac-Est1-B; 1282.433: YY-Hex3HexNac3dHex1,Y-Hex3HexNac3dHex1; 1339.412: Y-Hex4HexNac1Neu5Ac-Est1dHex1-B,Hex4HexNac1Neu5Ac-Est1dHex1-B,YY-Hex3HexNac4,Y-Hex3HexNac4; 1444.471: YY-Hex4HexNac3dHex1,Y-Hex4HexNac3dHex1; 1485.487: YY-Hex3HexNac4dHex1,Y-Hex3HexNac4dHex1; 1599.542: Y-Hex4HexNac3Neu5Ac-Est1-B,Hex4HexNac3Neu5Ac-Est1-B; 1647.588: YY-Hex4HexNac4dHex1,Y-Hex4HexNac4dHex1; 1704.678: YY-Hex4HexNac5,Y-Hex4HexNac5; 1763.643: YY-Hex4HexNac3Neu5Ac-Est1dHex1,Y-Hex4HexNac3Neu5Ac-Est1dHex1; 1802.628: Y-Hex4HexNac4Neu5Ac-Est1-B,Hex4HexNac4Neu5Ac-Est1-B; 1804.653: YY-Hex3HexNac4Neu5Ac-Est1dHex1,Y-Hex3HexNac4Neu5Ac-Est1dHex1; 1820.726: YY-Hex4HexNac4Neu5Ac-Est1,Y-Hex4HexNac4Neu5Ac-Est1; 1850.675: YY-Hex4HexNac5dHex1,Y-Hex4HexNac5dHex1; 1947.775: Y-Hex4HexNac4Neu5Ac-Est1dHex1-B,Hex4HexNac4Neu5Ac-Est1dHex1-B; 1966.787: YY-Hex4HexNac4Neu5Ac-Est1dHex1,Y-Hex4HexNac4Neu5Ac-Est1dHex1; 2006.804: YY-Hex3HexNac5Neu5Ac-Est1dHex1,Y-Hex3HexNac5Neu5Ac-Est1dHex1; 2023.727: YY-Hex4HexNac5Neu5Ac-Est1,Y-Hex4HexNac5Neu5Ac-Est1; 2169.717: YY-Hex4HexNac5Neu5Ac-Est1dHex1,Y-Hex4HexNac5Neu5Ac-Est1dHex1
44	2185.774	H5N5E1	2185.787	0.0135	6.1679	
45	2210.817	H3N6F1E1	2210.819	0.0021	0.9572	388.145: Y-Hex1HexNac1-B,Hex1HexNac1-B; 429.162: Y-HexNac2-B,HexNac2-B; 545.177: Y-HexNac1Neu5Ac-Est1-B,HexNac1Neu5Ac-Est1-B; 550.226: Y-Hex2HexNac1-B,Hex2HexNac1-B; 707.371: Y-Hex1HexNac1Neu5Ac-Est1-B,Hex1HexNac1Neu5Ac-Est1-B; 712.233: Y-Hex3HexNac1-B,Hex3HexNac1-B; 730.178: YY-Hex3HexNac1,Y-Hex3HexNac1; 748.274: Y-HexNac2Neu5Ac-Est1-B,HexNac2Neu5Ac-Est1-B; 910.291: Y-Hex1HexNac2Neu5Ac-Est1-B,Hex1HexNac2Neu5Ac-Est1-B; 915.301: Y-Hex3HexNac2-B,Hex3HexNac2-B; 1079.346: YY-Hex3HexNac2dHex1,Y-Hex3HexNac2dHex1; 1118.381: Y-Hex3HexNac3-B,Hex3HexNac3-B; 1282.443: YY-Hex3HexNac3dHex1,Y-Hex3HexNac3dHex1; 1321.47: Y-Hex3HexNac4-B,Hex3HexNac4-B; 1323.496: YY-Hex2HexNac4dHex1,Y-Hex2HexNac4dHex1; 1339.476: YY-Hex3HexNac4,Y-Hex3HexNac4; 1437.489: Y-Hex3HexNac3Neu5Ac-Est1-B,Hex3HexNac3Neu5Ac-Est1-B; 1485.51: YY-Hex3HexNac4dHex1,Y-Hex3HexNac4dHex1; 1640.572: Y-Hex3HexNac4Neu5Ac-Est1-B,Hex3HexNac4Neu5Ac-Est1-B; 1688.602: YY-Hex3HexNac5dHex1,Y-Hex3HexNac5dHex1; 1745.615: YY-Hex3HexNac6,Y-Hex3HexNac6; 1804.693: YY-Hex3HexNac4Neu5Ac-Est1dHex1,Y-Hex3HexNac4Neu5Ac-Est1dHex1; 1843.676: Y-Hex3HexNac5Neu5Ac-Est1-

						B,Hex3HexNac5Neu5Ac-Est1-B, 1861.699: YY-Hex3HexNac5Neu5Ac-Est1,Y-Hex3HexNac5Neu5Ac-Est1, 1891.705: YY-Hex3HexNac6dHex1,Y-Hex3HexNac6dHex1, 1988.881: Y-Hex3HexNac5Neu5Ac-Est1dHex1-B,Hex3HexNac5Neu5Ac-Est1dHex1-B, 2007.818: YY-Hex3HexNac5Neu5Ac-Est1dHex1,Y-Hex3HexNac5Neu5Ac-Est1dHex1, 2064.818: YY-Hex3HexNac6Neu5Ac-Est1,Y-Hex3HexNac6Neu5Ac-Est1, 2210.738: YY-Hex3HexNac6Neu5Ac-Est1dHex1,Y-Hex3HexNac6Neu5Ac-Est1dHex1
46	2256.821	H4N7F1	2256.825	0.0036	1.5932	226.213: Y-HexNac1-B,HexNac1-B, 388.135: Y-Hex1HexNac1-B,Hex1HexNac1-B, 429.168: Y-HexNac2-B,HexNac2-B, 712.288: Y-Hex3HexNac1-B,Hex3HexNac1-B, 915.36: Y-Hex3HexNac2-B,Hex3HexNac2-B, 933.297: YY-Hex3HexNac2,Y-Hex3HexNac2, 1077.342: Y-Hex4HexNac2-B,Hex4HexNac2-B, 1118.356: Y-Hex3HexNac3-B,Hex3HexNac3-B, 1280.428: Y-Hex4HexNac3-B,Hex4HexNac3-B, 1282.484: YY-Hex3HexNac3dHex1,Y-Hex3HexNac3dHex1, 1298.431: YY-Hex4HexNac3,Y-Hex4HexNac3, 1321.403: Y-Hex3HexNac4-B,Hex3HexNac4-B, 1444.458: YY-Hex4HexNac3dHex1,Y-Hex4HexNac3dHex1,Y-HexNac7-B,HexNac7-B, 1483.494: Y-Hex4HexNac4-B,Hex4HexNac4-B, 1485.554: YY-Hex3HexNac4dHex1,Y-Hex3HexNac4dHex1, 1502.498: YY-Hex4HexNac4,Y-Hex4HexNac4, 1647.533: YY-Hex4HexNac4dHex1,Y-Hex4HexNac4dHex1, 1686.55: Y-Hex4HexNac5-B,Hex4HexNac5-B, 1688.597: YY-Hex3HexNac5dHex1,Y-Hex3HexNac5dHex1, 1704.601: YY-Hex4HexNac5,Y-Hex4HexNac5, 1768.556: Y-Hex2HexNac7-B,Hex2HexNac7-B, 1850.682: YY-Hex4HexNac5dHex1,Y-Hex4HexNac5dHex1, 1889.657: Y-Hex4HexNac6-B,Hex4HexNac6-B, 1891.717: YY-Hex3HexNac6dHex1,Y-Hex3HexNac6dHex1, 2034.802: Y-Hex4HexNac6dHex1-B,Hex4HexNac6dHex1-B, 2053.751: YY-Hex4HexNac6dHex1,Y-Hex4HexNac6dHex1, 2094.755: YY-Hex3HexNac7dHex1,Y-Hex3HexNac7dHex1, 2110.764: YY-Hex4HexNac7,Y-Hex4HexNac7
47	2274.811	H5N4F2E1	2274.824	0.0129	5.6825	
48	2287.803	H5N4Ge1G1	2287.783	-0.0202	-8.8338	
49	2301.825	H5N4E2	2301.835	0.0098	4.2687	
50	2317.827	H6N5G1	2317.793	-0.0336	-14.5160	
51	2331.839	H5N5F1E1	2331.845	0.0064	2.7405	
52	2333.826	H5N4Ge2	2333.825	-0.0013	-0.5763	
53	2347.84	H6N5E1	2347.840	0.0003	0.1300	
54	2356.864	H3N6F2E1	2356.877	0.0130	5.5264	
55	2372.847	H4N6F1E1	2372.872	0.0249	10.5103	
56	2388.865	H5N6E1	2388.867	0.0019	0.7762	
57	2401.852	H5N4F1E1L1	2401.851	-0.0011	-0.4705	
58	2429.89	H4N7E1	2429.893	0.0034	1.4006	
59	2433.864	H5N4F1Ge1G1	2433.841	-0.0233	-9.5737	
60	2447.882	H5N4F1E2	2447.893	0.0107	4.3853	
61	2488.904	H4N5F1E2	2488.919	0.0153	6.1407	
62	2493.899	H6N5F1E1	2493.898	-0.0008	-0.3152	504.163: Y-Hex1Neu5Ac-Est1-B,Hex1Neu5Ac-Est1-B; 552.08: YY-Hex1HexNac1dHex1,Y-Hex1HexNac1dHex1; 707.204: Y-Hex1HexNac1Neu5Ac-Est1-B,Hex1HexNac1Neu5Ac-Est1-B; 932.689: YY-Hex3HexNac2,Y-Hex3HexNac2; 1077.376: Y-Hex4HexNac2-B,Hex4HexNac2-B; 1239.336: Y-Hex5HexNac2-B,Hex5HexNac2-B; 1442.415: Y-Hex5HexNac3-B,Hex5HexNac3-B; 1444.463: YY-Hex4HexNac3dHex1,Y-Hex4HexNac3dHex1; 1647.525: YY-Hex4HexNac4dHex1,Y-Hex4HexNac4dHex1; 1761.509: Y-Hex5HexNac3Neu5Ac-Est1-B,Hex5HexNac3Neu5Ac-Est1-B; 1809.563: YY-Hex5HexNac4dHex1,Y-Hex5HexNac4dHex1; 1923.664: Y-Hex6HexNac3Neu5Ac-Est1-B,Hex6HexNac3Neu5Ac-Est1-B; 2028.691: YY-Hex6HexNac5,Y-Hex6HexNac5; 2126.74: Y-Hex6HexNac4Neu5Ac-Est1-B,Hex6HexNac4Neu5Ac-Est1-B; 2128.731: YY-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1dHex1,Y-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1dHex1; 2144.754: YY-Hex6HexNac4Neu5Ac-Est1,Y-Hex6HexNac4Neu5Ac-Est1; 2168.932: YY-Hex4HexNac5Neu5Ac-Est1dHex1,Y-Hex4HexNac5Neu5Ac-Est1dHex1; 2174.804: YY-Hex6HexNac5dHex1,Y-Hex6HexNac5dHex1; 2290.899: YY-Hex6HexNac4Neu5Ac-Est1dHex1,Y-Hex6HexNac4Neu5Ac-Est1dHex1; 2331.829: YY-Hex5HexNac5Neu5Ac-Est1dHex1,Y-Hex5HexNac5Neu5Ac-Est1dHex1; 2347.813: YY-Hex6HexNac5Neu5Ac-Est1,Y-Hex6HexNac5Neu5Ac-Est1; 2493.808: YY-Hex6HexNac5Neu5Ac-Est1dHex1,Y-Hex6HexNac5Neu5Ac-Est1dHex1

63	2509.877	H6N5F1Ge1	2509.893	0.0161	6.4260	168.206: Y-dHex1-B,dHex1-B, 707.22: Y-Hex1HexNAc1Neu5Ac-Est1-B,Hex1HexNAc1Neu5Ac-Est1-B, 748.23: Y-HexNAc2Neu5Ac-Est1-B,HexNAc2Neu5Ac-Est1-B, 915.265: Y-Hex3HexNAc2-B,Hex3HexNAc2-B, 1077.404: Y-Hex4HexNAc2-B,Hex4HexNAc2-B, 1118.384: Y-Hex3HexNAc3-B,Hex3HexNAc3-B, 1280.445: Y-Hex4HexNAc3-B,Hex4HexNAc3-B, 1442.451: Y-Hex5HexNAc3-B,Hex5HexNAc3-B, 1444.477: YY-Hex4HexNAc3dHex1,Y-Hex4HexNAc3dHex1, 1483.445: Y-Hex4HexNAc4-B,Hex4HexNAc4-B, 1647.564: YY-Hex4HexNAc4dHex1,Y-Hex4HexNAc4dHex1, 1688.535: YY-Hex3HexNAc5dHex1,Y-Hex3HexNAc5dHex1, 1761.59: Y-Hex5HexNAc3Neu5Ac-Est1-B,Hex5HexNAc3Neu5Ac-Est1-B, 1809.675: YY-Hex5HexNAc4dHex1,Y-Hex5HexNAc4dHex1, 1850.606: YY-Hex4HexNAc5dHex1,Y-Hex4HexNAc5dHex1, 1964.696: Y-Hex5HexNAc4Neu5Ac-Est1-B,Hex5HexNAc4Neu5Ac-Est1-B, 2013.627: YY-Hex5HexNAc5dHex1,Y-Hex5HexNAc5dHex1, 2070.729: YY-Hex5HexNAc6,Y-Hex5HexNAc6, 2128.87: YY-Hex5HexNAc4Neu5Ac-Est1dHex1,Y-Hex5HexNAc4Neu5Ac-Est1dHex1, 2168.774: Y-Hex5HexNAc5Neu5Ac-Est1-B,Hex5HexNAc5Neu5Ac-Est1-B, 2185.791: YY-Hex5HexNAc5Neu5Ac-Est1,Y-Hex5HexNAc5Neu5Ac-Est1, 2215.806: YY-Hex5HexNAc6dHex1,Y-Hex5HexNAc6dHex1, 2331.85: YY-Hex5HexNAc5Neu5Ac-Est1dHex1,Y-Hex5HexNAc5Neu5Ac-Est1dHex1, 2372.818: YY-Hex4HexNAc6Neu5Ac-Est1dHex1,Y-Hex4HexNAc6Neu5Ac-Est1dHex1, 2388.86: YY-Hex5HexNAc6Neu5Ac-Est1,Y-Hex5HexNAc6Neu5Ac-Est1, 2534.782: YY-Hex5HexNAc6Neu5Ac-Est1dHex1,Y-Hex5HexNAc6Neu5Ac-Est1dHex1
64	2534.925	H5N6F1E1	2534.925	-0.0002	-0.0935	
65	2575.948	H4N7F1E1	2575.951	0.0033	1.2858	
66	2621.936	H5N8F1	2621.957	0.0208	7.9297	
67	2696.971	H6N6F1E1	2696.978	0.0066	2.4422	
68	2712.973	H7N6E1	2712.973	-0.0005	-0.1839	
69	2813.002	H6N5F1E2	2813.025	0.0229	8.1516	
70	2859.031	H7N6F1E1	2859.030	-0.0006	-0.2064	707.23: Y-Hex1HexNAc1Neu5Ac-Est1-B,Hex1HexNAc1Neu5Ac-Est1-B, 1809.541: YY-Hex5HexNAc4dHex1,Y-Hex5HexNAc4dHex1, 2174.712: YY-Hex6HexNAc5dHex1,Y-Hex6HexNAc5dHex1, 2288.829: Y-Hex7HexNAc4Neu5Ac-Est1-B,Hex7HexNAc4Neu5Ac-Est1-B, 2491.889: Y-Hex7HexNAc5Neu5Ac-Est1-B,Hex7HexNAc5Neu5Ac-Est1-B, 2493.866: YY-Hex6HexNAc5Neu5Ac-Est1dHex1,Y-Hex6HexNAc5Neu5Ac-Est1dHex1, 2539.931: YY-Hex7HexNAc6dHex1,Y-Hex7HexNAc6dHex1, 2696.93: YY-Hex6HexNAc6Neu5Ac-Est1dHex1,Y-Hex6HexNAc6Neu5Ac-Est1dHex1, 2713.004: YY-Hex7HexNAc6Neu5Ac-Est1,Y-Hex7HexNAc6Neu5Ac-Est1, 2858.994: YY-Hex7HexNAc6Neu5Ac-Est1dHex1,Y-Hex7HexNAc6Neu5Ac-Est1dHex1
71	2875.007	H7N6F1Ge1	2875.025	0.0183	6.3737	
72	2900.057	H6N7F1E1	2900.057	0.0000	-0.0141	
73	2916.027	H7N7E1	2916.052	0.0249	8.5299	
74	2941.07	H5N8F1E1	2941.084	0.0135	4.5929	
75	3005.067	H7N6F2E1	3005.088	0.0213	7.0942	

Tablo Ek3. Manda sütü whey glikoproteinlerinden tespit edilen *N*-glikanların listesi. MS/MS'i gerçekleştirilen glikanlara ait sadece B ve Y iyonlarının eşleşmeleri tabloya ilave edilmiştir. *. Selbest süt oligosakkarit profili ile aynı m/z 'ye sahip potansiyel *N*-glikanlar.Koyu işaretliiler iç kalibrasyon piklerini temsil etmektedir.

	Detected		Calculated			
	m/z	composition	mass (Da)	error (Da)	error (ppm)	MS/MS Peaks
1	1095.372	H4N2	1095.370	-0.0022	-1.9865	203.061: YY-Hex1,Y-Hex1, 365.128: YY-Hex2,Y-Hex2, 388.155: Y-Hex1HexNAc1-B,Hex1HexNAc1-B, 406.174: YY-Hex1HexNAc1,Y-Hex1HexNAc1, 447.174: YY-HexNAc2,Y-HexNAc2, 550.239: Y-Hex2HexNAc1-B,Hex2HexNAc1-B, 568.206: YY-Hex2HexNAc1,Y-Hex2HexNAc1, 671.235: Y-Hex4-B,Hex4-B, 712.233: Y-Hex3HexNAc1-B,Hex3HexNAc1-B, 730.245: YY-Hex3HexNAc1,Y-Hex3HexNAc1, 874.273: Y-Hex4HexNAc1-B,Hex4HexNAc1-B, 893.025: YY-Hex4HexNAc1,Y-Hex4HexNAc1, 915.147: Y-

						Hex3HexNac2-B,Hex3HexNac2-B, 933.015: YY-Hex3HexNac2,Y-Hex3HexNac2, 1095.318: YY-Hex4HexNac2,Y-Hex4HexNac2
2	1136.395	H3N3	1136.396	0.0014	1.2084	
3	1257.423	H5N2	1257.423	-0.0004	-0.2803	244.111: YY-HexNac1,Y-HexNac1; 388.144: Y-Hex1HexNac1-B,Hex1HexNac1-B; 527.221: YY-Hex3,Y-Hex3; 550.212: Y-Hex2HexNac1-B,Hex2HexNac1-B; 671.31: Y-Hex4-B,Hex4-B; 712.286: Y-Hex3HexNac1-B,Hex3HexNac1-B; 730.31: YY-Hex3HexNac1,Y-Hex3HexNac1; 833.297: Y-Hex5-B,Hex5-B; 915.282: Y-Hex3HexNac2-B,Hex3HexNac2-B; 933.345: YY-Hex3HexNac2,Y-Hex3HexNac2; 1036.371: Y-Hex5HexNac1-B,Hex5HexNac1-B; 1095.295: YY-Hex4HexNac2,Y-Hex4HexNac2; 1257.476: YY-Hex5HexNac2,Y-Hex5HexNac2
4	1298.447	H4N3	1298.449	0.0022	1.6917	
5	1339.471	H3N4	1339.476	0.0047	3.5430	388.383: Y-Hex1HexNac1-B,Hex1HexNac1-B, 429.166: Y-HexNac2-B,HexNac2-B, 1159.03: Y-Hex2HexNac4-B,Hex2HexNac4-B, 1176.973: YY-Hex2HexNac4,Y-Hex2HexNac4, 1339.506: YY-Hex3HexNac4,Y-Hex3HexNac4
6	1419.476	H6N2	1419.475	-0.0005	-0.3727	226.069: Y-HexNac1-B,HexNac1-B; 244.181: YY-HexNac1,Y-HexNac1; 347.111: Y-Hex2-B,Hex2-B; 388.144: Y-Hex1HexNac1-B,Hex1HexNac1-B; 429.193: Y-HexNac2-B,HexNac2-B; 509.206: Y-Hex3-B,Hex3-B; 550.177: Y-Hex2HexNac1-B,Hex2HexNac1-B; 671.288: Y-Hex4-B,Hex4-B; 712.282: Y-Hex3HexNac1-B,Hex3HexNac1-B; 833.241: Y-Hex5-B,Hex5-B; 933.398: YY-Hex3HexNac2,Y-Hex3HexNac2; 995.364: Y-Hex6-B,Hex6-B; 1036.367: Y-Hex5HexNac1-B,Hex5HexNac1-B; 1095.425: YY-Hex4HexNac2,Y-Hex4HexNac2; 1198.433: Y-Hex6HexNac1-B,Hex6HexNac1-B; 1216.574: YY-Hex6HexNac1,Y-Hex6HexNac1; 1238.986: Y-Hex5HexNac2-B,Hex5HexNac2-B; 1257.253: YY-Hex5HexNac2,Y-Hex5HexNac2; 1419.59: YY-Hex6HexNac2,Y-Hex6HexNac2
7	1444.499	H4N3F1	1444.507	0.0081	5.6112	
8	1460.500	H5N3	1460.502	0.0020	1.3831	
9	1485.530	H3N4F1	1485.534	0.0037	2.4601	
10	1501.523	H4N4	1501.529	0.0056	3.7090	
11	1581.528	H7N2	1581.528	0.0003	0.1861	388.2: Y-Hex1HexNac1-B,Hex1HexNac1-B; 447.198: YY-HexNac2,Y-HexNac2; 509.208: Y-Hex3-B,Hex3-B; 671.219: Y-Hex4-B,Hex4-B; 833.3: Y-Hex5-B,Hex5-B; 1077.361: Y-Hex4HexNac2-B,Hex4HexNac2-B; 1095.381: YY-Hex4HexNac2,Y-Hex4HexNac2; 1216.304: YY-Hex6HexNac1,Y-Hex6HexNac1; 1257.442: YY-Hex5HexNac2,Y-Hex5HexNac2; 1360.48: Y-Hex7HexNac1-B,Hex7HexNac1-B; 1378.622: YY-Hex7HexNac1,Y-Hex7HexNac1; 1401.948: Y-Hex6HexNac2-B,Hex6HexNac2-B; 1581.626: YY-Hex7HexNac2,Y-Hex7HexNac2
12	1606.550	H5N3F1	1606.560	0.0099	6.1802	
13	1622.549	H6N3	1622.555	0.0058	3.6014	
14	1647.584	H4N4F1	1647.586	0.0025	1.5040	
15	1663.577	H5N4	1663.581	0.0044	2.6404	226.116: Y-HexNac1-B,HexNac1-B; 388.182: Y-Hex1HexNac1-B,Hex1HexNac1-B; 429.154: Y-HexNac2-B,HexNac2-B; 447.166: YY-HexNac2,Y-HexNac2; 712.255: Y-Hex3HexNac1-B,Hex3HexNac1-B; 874.261: Y-Hex4HexNac1-B,Hex4HexNac1-B; 915.283: Y-Hex3HexNac2-B,Hex3HexNac2-B; 933.31: YY-Hex3HexNac2,Y-Hex3HexNac2; 1077.357: Y-Hex4HexNac2-B,Hex4HexNac2-B; 1240.407: Y-Hex5HexNac2-B,Hex5HexNac2-B; 1257.398: YY-Hex5HexNac2,Y-Hex5HexNac2; 1280.457: Y-Hex4HexNac3-B,Hex4HexNac3-B; 1298.472: YY-Hex4HexNac3,Y-Hex4HexNac3; 1442.528: Y-Hex5HexNac3-B,Hex5HexNac3-B; 1460.566: YY-Hex5HexNac3,Y-Hex5HexNac3; 1483.887: Y-Hex4HexNac4-B,Hex4HexNac4-B; 1501.778: YY-Hex4HexNac4,Y-Hex4HexNac4
16	1688.605	H3N5F1	1688.613	0.0080	4.7536	
17	1704.604	H4N5	1704.608	0.0039	2.3124	
18	1743.582	H8N2	1743.581	-0.0009	-0.5060	202.054: YY-Hex1,Y-Hex1; 244.069: YY-HexNac1,Y-HexNac1; 347.121: Y-Hex2-B,Hex2-B; 388.203: Y-Hex1HexNac1-B,Hex1HexNac1-B; 429.173: Y-HexNac2-B,HexNac2-B; 447.199: YY-HexNac2,Y-HexNac2; 509.22: Y-Hex3-B,Hex3-B; 671.237: Y-Hex4-B,Hex4-B; 712.335: Y-Hex3HexNac1-B,Hex3HexNac1-B; 833.259: Y-Hex5-B,Hex5-B; 874.293: Y-Hex4HexNac1-B,Hex4HexNac1-B; 933.284:

						YY-Hex3HexNac2,Y-Hex3HexNac2; 995.352: Y-Hex6-B,Hex6-B; 1036.299: Y-Hex5HexNac1-B,Hex5HexNac1-B; 1077.327: Y-Hex4HexNac2-B,Hex4HexNac2-B; 1095.357: YY-Hex4HexNac2,Y-Hex4HexNac2; 1257.47: YY-Hex5HexNac2,Y-Hex5HexNac2; 1319.427: Y-Hex8-B,Hex8-B; 1419.522: YY-Hex6HexNac2,Y-Hex6HexNac2; 1522.538: Y-Hex8HexNac1-B,Hex8HexNac1-B; 1563.732: Y-Hex7HexNac2-B,Hex7HexNac2-B; 1581.728: YY-Hex7HexNac2,Y-Hex7HexNac2; 1743.674: YY-Hex8HexNac2,Y-Hex8HexNac2
19	1768.610	H6N3F1	1768.613	0.0028	1.5562	
20	1779.623	H5N3E1	1779.629	0.0057	3.2235	
21	1809.636	H5N4F1	1809.639	0.0033	1.8243	388.162: Y-Hex1HexNac1-B,Hex1HexNac1-B; 429.179: Y-HexNac2-B,HexNac2-B; 509.197: Y-Hex3-B,Hex3-B; 712.282: Y-Hex3HexNac1-B,Hex3HexNac1-B; 874.269: Y-Hex4HexNac1-B,Hex4HexNac1-B; 915.277: Y-Hex3HexNac2-B,Hex3HexNac2-B; 1077.42: Y-Hex4HexNac2-B,Hex4HexNac2-B; 1079.4: YY-Hex3HexNac2dHex1,Y-Hex3HexNac2dHex1; 1095.317: YY-Hex4HexNac2,Y-Hex4HexNac2; 1137.34: YY-Hex3HexNac3,Y-Hex3HexNac3; 1239.398: Y-Hex5HexNac2-B,Hex5HexNac2-B; 1282.499: YY-Hex3HexNac3dHex1,Y-Hex3HexNac3dHex1; 1298.489: YY-Hex4HexNac3,Y-Hex4HexNac3; 1442.542: Y-Hex5HexNac3-B,Hex5HexNac3-B; 1444.539: YY-Hex4HexNac3dHex1,Y-Hex4HexNac3dHex1; 1460.535: YY-Hex5HexNac3,Y-Hex5HexNac3; 1501.595: YY-Hex4HexNac4,Y-Hex4HexNac4; 1628.896: Y-Hex4HexNac4dHex1-B,Hex4HexNac4dHex1-B; 1644.665: Y-Hex5HexNac4-B,Hex5HexNac4-B; 1647.768: YY-Hex4HexNac4dHex1,Y-Hex4HexNac4dHex1; 1663.655: YY-Hex5HexNac4,Y-Hex5HexNac4
22	1820.644	H4N4E1	1820.655	0.0113	6.1987	
23	1825.611	H6N4	1825.634	0.0232	12.7167	
24	1850.663	H4N5F1	1850.666	0.0029	1.5402	168.101: Y-dHex1-B,dHex1-B; 226.089: Y-HexNac1-B,HexNac1-B; 388.16: Y-Hex1HexNac1-B,Hex1HexNac1-B; 550.236: Y-Hex2HexNac1-B,Hex2HexNac1-B; 712.319: Y-Hex3HexNac1-B,Hex3HexNac1-B; 753.243: Y-Hex2HexNac2-B,Hex2HexNac2-B; 874.241: Y-Hex4HexNac1-B,Hex4HexNac1-B; 915.313: Y-Hex3HexNac2-B,Hex3HexNac2-B; 933.353: YY-Hex3HexNac2,Y-Hex3HexNac2; 1077.32: Y-Hex4HexNac2-B,Hex4HexNac2-B; 1119.333: Y-Hex3HexNac3-B,Hex3HexNac3-B; 1136.313: YY-Hex3HexNac3,Y-Hex3HexNac3; 1280.411: Y-Hex4HexNac3-B,Hex4HexNac3-B; 1283.397: YY-Hex3HexNac3dHex1,Y-Hex3HexNac3dHex1; 1298.412: YY-Hex4HexNac3,Y-Hex4HexNac3; 1339.445: YY-Hex3HexNac4,Y-Hex3HexNac4; 1483.538: Y-Hex4HexNac4-B,Hex4HexNac4-B; 1485.549: YY-Hex3HexNac4dHex1,Y-Hex3HexNac4dHex1; 1502.516: YY-Hex4HexNac4,Y-Hex4HexNac4; 1524.516: Y-Hex3HexNac5-B,Hex3HexNac5-B; 1686.843: Y-Hex4HexNac5-B,Hex4HexNac5-B; 1704.689: YY-Hex4HexNac5,Y-Hex4HexNac5; 1850.698: YY-Hex4HexNac5dHex1,Y-Hex4HexNac5dHex1
25	1866.644	H5N5	1866.661	0.0168	8.9813	
26	1891.689	H3N6F1	1891.692	0.0034	1.7971	226.104: Y-HexNac1-B,HexNac1-B; 244.109: YY-HexNac1,Y-HexNac1; 429.106: Y-HexNac2-B,HexNac2-B; 447.139: YY-HexNac2,Y-HexNac2; 509.156: Y-Hex3-B,Hex3-B; 1485.621: YY-Hex3HexNac4dHex1,Y-Hex3HexNac4dHex1; 1524.577: Y-Hex3HexNac5-B,Hex3HexNac5-B; 1688.735: YY-Hex3HexNac5dHex1,Y-Hex3HexNac5dHex1; 1891.766: YY-Hex3HexNac6dHex1,Y-Hex3HexNac6dHex1
27	1905.635	H9N2	1905.634	-0.0011	-0.5556	226.101: Y-HexNac1-B,HexNac1-B; 347.101: Y-Hex2-B,Hex2-B; 388.14: Y-Hex1HexNac1-B,Hex1HexNac1-B; 447.188: YY-HexNac2,Y-HexNac2; 509.219: Y-Hex3-B,Hex3-B; 671.271: Y-Hex4-B,Hex4-B; 851.387: YY-Hex5,Y-Hex5; 874.299: Y-Hex4HexNac1-B,Hex4HexNac1-B; 995.408: Y-Hex6-B,Hex6-B; 1095.387: YY-Hex4HexNac2,Y-Hex4HexNac2; 1175.336: YY-Hex7,Y-Hex7; 1198.373: Y-Hex6HexNac1-B,Hex6HexNac1-B; 1239.361: Y-Hex5HexNac2-B,Hex5HexNac2-B; 1360.48: Y-Hex7HexNac1-B,Hex7HexNac1-B; 1419.525: YY-Hex6HexNac2,Y-Hex6HexNac2; 1481.523: Y-Hex9-B,Hex9-B; 1540.503: YY-Hex8HexNac1,Y-Hex8HexNac1; 1684.614: Y-Hex9HexNac1-B,Hex9HexNac1-B; 1702.657: YY-Hex9HexNac1,Y-Hex9HexNac1; 1725.794: Y-Hex8HexNac2-B,Hex8HexNac2-B; 1743.698: YY-Hex8HexNac2,Y-Hex8HexNac2; 1905.699: YY-Hex9HexNac2,Y-Hex9HexNac2

28	1941.680	H6N3E1	1941.682	0.0016	0.8035	
29	1955.688	H5N4F2	1955.697	0.0092	4.7094	
30	1966.695	H4N4F1E1	1966.713	0.0182	9.2513	
31	1982.706	H5N4E1	1982.708	0.0021	1.0638	
32	1998.700	H5N4Ge1	1998.703	0.0030	1.5129	
33	2012.711	H5N5F1	2012.719	0.0077	3.8127	
34	2023.727	H4N5E1	2023.735	0.0077	3.7842	
35	2064.747	H3N6E1	2064.761	0.0142	6.8809	
36	2087.739	H6N3F1E1	2087.739	0.0005	0.2246	
37	2128.765	H5N4F1E1	2128.766	0.0010	0.4782	
38	2144.745	H5N4F1Ge1	2144.761	0.0159	7.4286	
39	2169.790	H4N5F1E1	2169.793	0.0026	1.1831	
40	2174.769	H6N5F1	2174.771	0.0025	1.1483	
41	2185.777	H5N5E1	2185.787	0.0105	4.7954	
42	2210.814	H3N6F1E1	2210.819	0.0051	2.3142	
43	2215.795	H5N6F1	2215.798	0.0030	1.3749	
44	2226.800	H4N6E1	2226.814	0.0140	6.3008	
45	2256.816	H4N7F1	2256.825	0.0086	3.8087	
46	2274.816	H5N4F2E1	2274.824	0.0079	3.4846	
47	2301.837	H5N4E2	2301.835	-0.0022	-0.9445	388.12: Y-Hex1HexNAc1-B,Hex1HexNAc1-B; 550.161: Y-Hex2HexNAc1-B,Hex2HexNAc1-B; 707.216: Y-Hex1HexNAc1Neu5Ac-Est1-B,Hex1HexNAc1Neu5Ac-Est1-B; 933.286: YY-Hex3HexNAc2,Y-Hex3HexNAc2; 1298.377: YY-Hex4HexNAc3,Y-Hex4HexNAc3; 1455.467: YY-Hex3HexNAc3Neu5Ac-Est1,Y-Hex3HexNAc3Neu5Ac-Est1; 1617.531: YY-Hex4HexNAc3Neu5Ac-Est1,Y-Hex4HexNAc3Neu5Ac-Est1; 1982.791: YY-Hex5HexNAc4Neu5Ac-Est1,Y-Hex5HexNAc4Neu5Ac-Est1; 2080.784: Y-Hex5HexNAc3Neu5Ac-Est2-B,Hex5HexNAc3Neu5Ac-Est2-B
48	2317.831	H6N5GI1	2317.793	-0.0376	-16.2418	
49	2331.851	H5N5F1E1	2331.845	-0.0056	-2.4056	
50	2333.824	H5N4Ge2	2333.825	0.0007	0.2807	
51	2347.838	H6N5E1	2347.840	0.0023	0.9818	
52	2356.865	H3N6F2E1	2356.877	0.0120	5.1021	
53	2372.877	H4N6F1E1	2372.872	-0.0051	-2.1326	
54	2401.870	H5N4F1E1L1	2401.851	-0.0191	-7.9648	
55	2447.884	H5N4F1E2	2447.893	0.0087	3.5682	168.207: Y-dHex1-B,dHex1-B; 707.231: Y-Hex1HexNAc1Neu5Ac-Est1-B,Hex1HexNAc1Neu5Ac-Est1-B; 1763.559: YY-Hex4HexNAc3Neu5Ac-Est1dHex1,Y-Hex4HexNAc3Neu5Ac-Est1dHex1; 1983.689: YY-Hex5HexNAc4Neu5Ac-Est1,Y-Hex5HexNAc4Neu5Ac-Est1; 2128.868: YY-Hex5HexNAc4Neu5Ac-Est1dHex1,Y-Hex5HexNAc4Neu5Ac-Est1dHex1; 2282.891: Y-Hex5HexNAc4Neu5Ac-Est2-B,Hex5HexNAc4Neu5Ac-Est2-B; 2447.847: YY-Hex5HexNAc4Neu5Ac-Est2dHex1,Y-Hex5HexNAc4Neu5Ac-Est2dHex1
56	2488.904	H4N5F1E2	2488.919	0.0153	6.1407	
57	2493.899	H6N5F1E1	2493.898	-0.0008	-0.3152	388.163: Y-Hex1HexNAc1-B,Hex1HexNAc1-B; 707.555: Y-Hex1HexNAc1Neu5Ac-Est1-B,Hex1HexNAc1Neu5Ac-Est1-B; 709.254: YY-HexNAc1Neu5Ac-Est1dHex1,Y-HexNAc1Neu5Ac-Est1dHex1; 915.212: Y-Hex3HexNAc2-B,Hex3HexNAc2-B; 1077.39: Y-Hex4HexNAc2-B,Hex4HexNAc2-B; 1442.431: Y-Hex5HexNAc3-B,Hex5HexNAc3-B; 1444.472: YY-Hex4HexNAc3dHex1,Y-Hex4HexNAc3dHex1; 1648.526: YY-Hex4HexNAc4dHex1,Y-Hex4HexNAc4dHex1; 1663.529: Y-Hex6HexNAc1Neu5Ac-Est1dHex1-B,Hex6HexNAc1Neu5Ac-Est1dHex1-B,YY-Hex5HexNAc4,Y-Hex5HexNAc4; 1762.593: Y-Hex5HexNAc3Neu5Ac-Est1-B,Hex5HexNAc3Neu5Ac-Est1-B; 1809.61: YY-Hex5HexNAc4dHex1,Y-Hex5HexNAc4dHex1; 1825.53: YY-Hex6HexNAc4,Y-Hex6HexNAc4; 1923.63: Y-

						Hex6HexNac3Neu5Ac-Est1-B,Hex6HexNac3Neu5Ac-Est1-B; 1982.74: YY-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1,Y-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1; 2012.717: YY-Hex5HexNac5dHex1,Y-Hex5HexNac5dHex1; 2125.803: Y-Hex6HexNac4Neu5Ac-Est1-B,Hex6HexNac4Neu5Ac-Est1-B; 2128.781: YY-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1dHex1,Y-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1dHex1; 2144.803: YY-Hex6HexNac4Neu5Ac-Est1,Y-Hex6HexNac4Neu5Ac-Est1; 2174.804: YY-Hex6HexNac5dHex1,Y-Hex6HexNac5dHex1; 2330.828: Y-Hex6HexNac5Neu5Ac-Est1-B,Hex6HexNac5Neu5Ac-Est1-B; 2347.835: YY-Hex6HexNac5Neu5Ac-Est1,Y-Hex6HexNac5Neu5Ac-Est1; 2493.869: YY-Hex6HexNac5Neu5Ac-Est1dHex1,Y-Hex6HexNac5Neu5Ac-Est1dHex1
58	2509.875	H6N5F1Ge1	2509.893	0.0181	7.2228	
59	2534.924	H5N6F1E1	2534.925	0.0008	0.3010	
60	2550.912	H6N6E1	2550.920	0.0077	3.0098	
61	2575.946	H4N7F1E1	2575.951	0.0053	2.0622	
62	2616.986	H3N8F1E1	2616.978	-0.0081	-3.1100	
63	2621.952	H5N8F1	2621.957	0.0048	1.8274	
64	2712.957	H7N6E1	2712.973	0.0155	5.7137	
65	2813.059	H6N5F1E2	2813.025	-0.0341	-12.1113	
						707.228: Y-Hex1HexNac1Neu5Ac-Est1-B,Hex1HexNac1Neu5Ac-Est1-B; 1809.526: YY-Hex5HexNac4dHex1,Y-Hex5HexNac4dHex1; 2128.668: YY-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1dHex1,Y-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1dHex1; 2174.786: YY-Hex6HexNac5dHex1,Y-Hex6HexNac5dHex1; 2289.795: Y-Hex7HexNac4Neu5Ac-Est1-B,Hex7HexNac4Neu5Ac-Est1-B; 2490.986: Y-Hex7HexNac5Neu5Ac-Est1-B,Hex7HexNac5Neu5Ac-Est1-B; 2493.956: YY-Hex6HexNac5Neu5Ac-Est1dHex1,Y-Hex6HexNac5Neu5Ac-Est1dHex1; 2509.944: YY-Hex7HexNac5Neu5Ac-Est1,Y-Hex7HexNac5Neu5Ac-Est1; 2539.901: YY-Hex7HexNac6dHex1,Y-Hex7HexNac6dHex1; 2696.995: YY-Hex6HexNac6Neu5Ac-Est1dHex1,Y-Hex6HexNac6Neu5Ac-Est1dHex1; 2713.074: YY-Hex7HexNac6Neu5Ac-Est1,Y-Hex7HexNac6Neu5Ac-Est1; 2859.127: YY-Hex7HexNac6Neu5Ac-Est1dHex1,Y-Hex7HexNac6Neu5Ac-Est1dHex1
66	2859.033	H7N6F1E1	2859.030	-0.0026	-0.9059	
67	2875.003	H7N6F1Ge1	2875.025	0.0223	7.7650	
68	2900.057	H6N7F1E1	2900.057	0.0000	-0.0141	
69	2916.040	H7N7E1	2916.052	0.0119	4.0718	
70	2941.106	H5N8F1E1	2941.084	-0.0225	-7.6475	
71	3005.098	H7N6F2E1	3005.088	-0.0097	-3.2216	

Tablo Ek4. Keçi sütü whey glikoproteinlerinden tespit edilen *N*-glikanların listesi. MS/MS'i gerçekleştirilen glikanlara ait sadece B ve Y iyonlarının eşleşmeleri tabloya ilave edilmiştir. *. Selbest süt oligosakkarit profili ile aynı m/z 'ye sahip potansiyel *N*-glikanlar. Koyu işaretliler iç kalibrasyon piklerini temsil etmektedir.

	Detected		Calculated			
	m/z	composition	mass (Da)	error (Da)	error (ppm)	MS/MS Peaks
1	1095.369	H4N2	1095.370	0.0008	0.7523	
2	1136.393	H3N3	1136.396	0.0034	2.9683	
3	1257.423	H5N2	1257.423	-0.0004	-0.2803	204.042: YY-Hex1,Y-Hex1; 347.17: Y-Hex2-B,Hex2-B; 388.172: Y-Hex1HexNac1-B,Hex1HexNac1-B; 447.184: YY-HexNac2,Y-HexNac2; 527.245: YY-Hex3,Y-Hex3; 550.207: Y-Hex2HexNac1-B,Hex2HexNac1-B; 568.23: YY-Hex2HexNac1,Y-Hex2HexNac1; 712.274: Y-Hex3HexNac1-B,Hex3HexNac1-B; 730.228: YY-Hex3HexNac1,Y-Hex3HexNac1; 771.313: YY-Hex2HexNac2,Y-Hex2HexNac2; 833.293: Y-Hex5-B,Hex5-B; 851.357: YY-Hex5,Y-Hex5; 874.339: Y-Hex4HexNac1-B,Hex4HexNac1-B; 892.305: YY-Hex4HexNac1,Y-Hex4HexNac1; 915.304: Y-Hex3HexNac2-B,Hex3HexNac2-B; 1036.388: Y-Hex5HexNac1-B,Hex5HexNac1-B; 1054.171: YY-Hex5HexNac1,Y-Hex5HexNac1; 1077.045: Y-Hex4HexNac2-B,Hex4HexNac2-B; 1095.061: YY-Hex4HexNac2,Y-Hex4HexNac2; 1257.514: YY-Hex5HexNac2,Y-Hex5HexNac2
4	1282.453	H3N3F1	1282.454	0.0013	0.9996	
5	1298.449	H4N3	1298.449	0.0002	0.1514	

6	1339.475	H3N4	1339.476	0.0007	0.5567	226.125: Y-HexNac1-B,HexNac1-B, 388.133: Y-Hex1HexNac1-B,Hex1HexNac1-B, 447.204: YY-HexNac2,Y-HexNac2, 550.241: Y-Hex2HexNac1-B,Hex2HexNac1-B, 568.212: YY-Hex2HexNac1,Y-Hex2HexNac1, 712.259: Y-Hex3HexNac1-B,Hex3HexNac1-B, 915.366: Y-Hex3HexNac2-B,Hex3HexNac2-B, 974.396: YY-Hex2HexNac3,Y-Hex2HexNac3, 1118.457: Y-Hex3HexNac3-B,Hex3HexNac3-B, 1136.465: YY-Hex3HexNac3,Y-Hex3HexNac3, 1158.986: Y-Hex2HexNac4-B,Hex2HexNac4-B, 1176.984: YY-Hex2HexNac4,Y-Hex2HexNac4, 1339.571: YY-Hex3HexNac4,Y-Hex3HexNac4
7	1419.476	H6N2	1419.475	-0.0005	-0.3727	226.103: Y-HexNac1-B,HexNac1-B; 347.204: Y-Hex2-B,Hex2-B; 388.198: Y-Hex1HexNac1-B,Hex1HexNac1-B; 429.23: Y-HexNac2-B,HexNac2-B; 447.18: YY-HexNac2,Y-HexNac2; 509.206: Y-Hex3-B,Hex3-B; 527.197: YY-Hex3,Y-Hex3; 550.233: Y-Hex2HexNac1-B,Hex2HexNac1-B; 712.247: Y-Hex3HexNac1-B,Hex3HexNac1-B; 730.284: YY-Hex3HexNac1,Y-Hex3HexNac1; 771.301: YY-Hex2HexNac2,Y-Hex2HexNac2; 833.315: Y-Hex5-B,Hex5-B; 915.403: Y-Hex3HexNac2-B,Hex3HexNac2-B; 933.371: YY-Hex3HexNac2,Y-Hex3HexNac2; 995.347: Y-Hex6-B,Hex6-B; 1013.343: YY-Hex6,Y-Hex6; 1036.362: Y-Hex5HexNac1-B,Hex5HexNac1-B; 1077.406: Y-Hex4HexNac2-B,Hex4HexNac2-B; 1095.428: YY-Hex4HexNac2,Y-Hex4HexNac2; 1198.439: Y-Hex6HexNac1-B,Hex6HexNac1-B; 1216.451: YY-Hex6HexNac1,Y-Hex6HexNac1; 1239.763: Y-Hex5HexNac2-B,Hex5HexNac2-B; 1257.486: YY-Hex5HexNac2,Y-Hex5HexNac2; 1419.569: YY-Hex6HexNac2,Y-Hex6HexNac2
8	1444.504	H4N3F1	1444.507	0.0031	2.1498	
9	1460.504	H5N3	1460.502	-0.0020	-1.3557	
10	1485.533	H3N4F1	1485.534	0.0007	0.4406	226.09: Y-HexNac1-B,HexNac1-B; 406.158: YY-Hex1HexNac1,Y-Hex1HexNac1; 447.17: YY-HexNac2,Y-HexNac2; 550.195: Y-Hex2HexNac1-B,Hex2HexNac1-B; 593.253: YY-HexNac2dHex1,Y-HexNac2dHex1; 713.161: Y-Hex3HexNac1-B,Hex3HexNac1-B; 753.246: Y-Hex2HexNac2-B,Hex2HexNac2-B; 771.295: YY-Hex2HexNac2,Y-Hex2HexNac2; 915.318: Y-Hex3HexNac2-B,Hex3HexNac2-B; 933.338: YY-Hex3HexNac2,Y-Hex3HexNac2; 1079.429: YY-Hex3HexNac2dHex1,Y-Hex3HexNac2dHex1; 1119.416: YY-Hex2HexNac3dHex1,Y-Hex2HexNac3dHex1; 1136.445: YY-Hex3HexNac3,Y-Hex3HexNac3; 1282.478: YY-Hex3HexNac3dHex1,Y-Hex3HexNac3dHex1; 1304.97: Y-Hex2HexNac4dHex1-B,Hex2HexNac4dHex1-B; 1323.002: YY-Hex2HexNac4dHex1,Y-Hex2HexNac4dHex1; 1339.543: YY-Hex3HexNac4,Y-Hex3HexNac4; 1485.605: YY-Hex3HexNac4dHex1,Y-Hex3HexNac4dHex1
11	1501.529	H4N4	1501.529	-0.0004	-0.2869	185.069: Y-Hex1-B,Hex1-B; 226.11: Y-HexNac1-B,HexNac1-B; 244.096: YY-HexNac1,Y-HexNac1; 347.126: Y-Hex2-B,Hex2-B; 388.159: Y-Hex1HexNac1-B,Hex1HexNac1-B; 406.194: YY-Hex1HexNac1,Y-Hex1HexNac1; 447.176: YY-HexNac2,Y-HexNac2; 509.17: Y-Hex3-B,Hex3-B; 550.227: Y-Hex2HexNac1-B,Hex2HexNac1-B; 568.267: YY-Hex2HexNac1,Y-Hex2HexNac1; 610.203: YY-Hex1HexNac2,Y-Hex1HexNac2; 712.251: Y-Hex3HexNac1-B,Hex3HexNac1-B; 730.248: YY-Hex3HexNac1,Y-Hex3HexNac1; 753.275: Y-Hex2HexNac2-B,Hex2HexNac2-B; 771.291: YY-Hex2HexNac2,Y-Hex2HexNac2; 874.27: Y-Hex4HexNac1-B,Hex4HexNac1-B; 915.331: Y-Hex3HexNac2-B,Hex3HexNac2-B; 933.325: YY-Hex3HexNac2,Y-Hex3HexNac2; 1077.37: Y-Hex4HexNac2-B,Hex4HexNac2-B; 1095.375: YY-Hex4HexNac2,Y-Hex4HexNac2; 1118.439: Y-Hex3HexNac3-B,Hex3HexNac3-B; 1136.414: YY-Hex3HexNac3,Y-Hex3HexNac3; 1280.471: Y-Hex4HexNac3-B,Hex4HexNac3-B; 1298.49: YY-Hex4HexNac3,Y-Hex4HexNac3; 1321.927: Y-Hex3HexNac4-B,Hex3HexNac4-B; 1339.536: YY-Hex3HexNac4,Y-Hex3HexNac4; 1501.597: YY-Hex4HexNac4,Y-Hex4HexNac4
12	1542.554	H3N5	1542.555	0.0011	0.7249	
13	1581.530	H7N2	1581.528	-0.0017	-1.0785	185.045: Y-Hex1-B,Hex1-B; 204.052: YY-Hex1,Y-Hex1; 347.129: Y-Hex2-B,Hex2-B; 388.132: Y-Hex1HexNac1-B,Hex1HexNac1-B; 447.187: YY-HexNac2,Y-HexNac2; 509.186: Y-Hex3-B,Hex3-B; 527.158: YY-Hex3,Y-Hex3; 550.21: Y-Hex2HexNac1-B,Hex2HexNac1-B; 568.229: YY-Hex2HexNac1,Y-Hex2HexNac1; 671.24: Y-Hex4-B,Hex4-B; 689.294: YY-Hex4,Y-Hex4; 712.229: Y-Hex3HexNac1-B,Hex3HexNac1-B; 771.217: YY-Hex2HexNac2,Y-Hex2HexNac2; 833.244: Y-Hex5-B,Hex5-B; 874.266: Y-Hex4HexNac1-B,Hex4HexNac1-B; 892.273: YY-Hex4HexNac1,Y-Hex4HexNac1; 915.309: Y-Hex3HexNac2-B,Hex3HexNac2-B; 933.319: YY-Hex3HexNac2,Y-Hex3HexNac2; 1013.252: YY-Hex6,Y-Hex6; 1036.319: Y-Hex5HexNac1-B,Hex5HexNac1-B; 1077.362: Y-Hex4HexNac2-B,Hex4HexNac2-B; 1096.361: YY-Hex4HexNac2,Y-Hex4HexNac2; 1157.36: Y-Hex7-B,Hex7-B; 1175.368: YY-Hex7,Y-Hex7; 1216.316: YY-Hex6HexNac1,Y-Hex6HexNac1; 1239.422: Y-Hex5HexNac2-B,Hex5HexNac2-B; 1257.44: YY-Hex5HexNac2,Y-Hex5HexNac2; 1360.46: Y-Hex7HexNac1-

						B,Hex7HexNac1-B; 1378.459: YY-Hex7HexNac1,Y-Hex7HexNac1; 1400.895: Y-Hex6HexNac2-B,Hex6HexNac2-B; 1419.538: YY-Hex6HexNac2,Y-Hex6HexNac2; 1581.579: YY-Hex7HexNac2,Y-Hex7HexNac2
14	1617.575	H4N3E1	1617.576	0.0009	0.5646	
15	1622.555	H6N3	1622.555	-0.0002	-0.0965	
16	1647.587	H4N4F1	1647.586	-0.0005	-0.3169	168.064: Y-dHex1-B,dHex1-B; 226.092: Y-HexNac1-B,HexNac1-B; 347.183: Y-Hex2-B,Hex2-B; 388.153: Y-Hex1HexNac1-B,Hex1HexNac1-B; 429.207: Y-HexNac2-B,HexNac2-B; 447.242: YY-HexNac2,Y-HexNac2; 509.139: Y-Hex3-B,Hex3-B; 550.219: Y-Hex2HexNac1-B,Hex2HexNac1-B; 712.247: Y-Hex3HexNac1-B,Hex3HexNac1-B; 753.241: Y-Hex2HexNac2-B,Hex2HexNac2-B; 771.213: YY-Hex2HexNac2,Y-Hex2HexNac2; 874.255: Y-Hex4HexNac1-B,Hex4HexNac1-B; 915.287: Y-Hex3HexNac2-B,Hex3HexNac2-B; 933.308: YY-Hex3HexNac2,Y-Hex3HexNac2; 1077.341: Y-Hex4HexNac2-B,Hex4HexNac2-B; 1095.359: YY-Hex4HexNac2,Y-Hex4HexNac2; 1118.403: Y-Hex3HexNac3-B,Hex3HexNac3-B; 1120.383: YY-Hex2HexNac3dHex1,Y-Hex2HexNac3dHex1; 1136.399: YY-Hex3HexNac3,Y-Hex3HexNac3; 1280.429: Y-Hex4HexNac3-B,Hex4HexNac3-B; 1282.427: YY-Hex3HexNac3dHex1,Y-Hex3HexNac3dHex1; 1298.471: YY-Hex4HexNac3,Y-Hex4HexNac3; 1484.498: Y-Hex4HexNac4-B,Hex4HexNac4-B; 1501.558: YY-Hex4HexNac4,Y-Hex4HexNac4; 1647.64: YY-Hex4HexNac4dHex1,Y-Hex4HexNac4dHex1
17	1663.582	H5N4	1663.581	-0.0006	-0.3651	185.057: Y-Hex1-B,Hex1-B; 203.095: YY-Hex1,Y-Hex1; 226.099: Y-HexNac1-B,HexNac1-B; 244.115: YY-HexNac1,Y-HexNac1; 347.137: Y-Hex2-B,Hex2-B; 365.072: YY-Hex2,Y-Hex2; 388.156: Y-Hex1HexNac1-B,Hex1HexNac1-B; 406.204: YY-Hex1HexNac1,Y-Hex1HexNac1; 429.209: Y-HexNac2-B,HexNac2-B; 447.202: YY-HexNac2,Y-HexNac2; 509.174: Y-Hex3-B,Hex3-B; 550.242: Y-Hex2HexNac1-B,Hex2HexNac1-B; 568.266: YY-Hex2HexNac1,Y-Hex2HexNac1; 712.278: Y-Hex3HexNac1-B,Hex3HexNac1-B; 753.254: Y-Hex2HexNac2-B,Hex2HexNac2-B; 771.279: YY-Hex2HexNac2,Y-Hex2HexNac2; 833.245: Y-Hex5-B,Hex5-B; 915.355: Y-Hex3HexNac2-B,Hex3HexNac2-B; 933.33: YY-Hex3HexNac2,Y-Hex3HexNac2; 956.222: Y-Hex2HexNac3-B,Hex2HexNac3-B; 975.335: YY-Hex2HexNac3,Y-Hex2HexNac3; 1077.382: Y-Hex4HexNac2-B,Hex4HexNac2-B; 1095.4: YY-Hex4HexNac2,Y-Hex4HexNac2; 1118.398: Y-Hex3HexNac3-B,Hex3HexNac3-B; 1136.414: YY-Hex3HexNac3,Y-Hex3HexNac3; 1239.425: Y-Hex5HexNac2-B,Hex5HexNac2-B; 1257.457: YY-Hex5HexNac2,Y-Hex5HexNac2; 1280.516: Y-Hex4HexNac3-B,Hex4HexNac3-B; 1298.472: YY-Hex4HexNac3,Y-Hex4HexNac3; 1442.534: Y-Hex5HexNac3-B,Hex5HexNac3-B; 1460.592: YY-Hex5HexNac3,Y-Hex5HexNac3; 1483.595: Y-Hex4HexNac4-B,Hex4HexNac4-B; 1501.608: YY-Hex4HexNac4,Y-Hex4HexNac4; 1663.658: YY-Hex5HexNac4,Y-Hex5HexNac4
18	1688.611	H3N5F1	1688.613	0.0020	1.2004	
19	1704.608	H4N5	1704.608	-0.0001	-0.0342	226.078: Y-HexNac1-B,HexNac1-B; 347.138: Y-Hex2-B,Hex2-B; 388.162: Y-Hex1HexNac1-B,Hex1HexNac1-B; 447.184: YY-HexNac2,Y-HexNac2; 550.286: Y-Hex2HexNac1-B,Hex2HexNac1-B; 568.328: YY-Hex2HexNac1,Y-Hex2HexNac1; 712.256: Y-Hex3HexNac1-B,Hex3HexNac1-B; 753.222: Y-Hex2HexNac2-B,Hex2HexNac2-B; 771.27: YY-Hex2HexNac2,Y-Hex2HexNac2; 915.344: Y-Hex3HexNac2-B,Hex3HexNac2-B; 956.233: Y-Hex2HexNac3-B,Hex2HexNac3-B; 975.308: YY-Hex2HexNac3,Y-Hex2HexNac3; 1077.357: Y-Hex4HexNac2-B,Hex4HexNac2-B; 1118.415: Y-Hex3HexNac3-B,Hex3HexNac3-B; 1136.394: YY-Hex3HexNac3,Y-Hex3HexNac3; 1177.399: YY-Hex2HexNac4,Y-Hex2HexNac4; 1280.459: Y-Hex4HexNac3-B,Hex4HexNac3-B; 1321.549: Y-Hex3HexNac4-B,Hex3HexNac4-B; 1339.481: YY-Hex3HexNac4,Y-Hex3HexNac4; 1483.57: Y-Hex4HexNac4-B,Hex4HexNac4-B; 1501.576: YY-Hex4HexNac4,Y-Hex4HexNac4; 1523.93: Y-Hex3HexNac5-B,Hex3HexNac5-B; 1542.839: YY-Hex3HexNac5,Y-Hex3HexNac5; 1704.647: YY-Hex4HexNac5,Y-Hex4HexNac5
20	1743.584	H8N2	1743.581	-0.0029	-1.6531	185.065: Y-Hex1-B,Hex1-B; 429.151: Y-HexNac2-B,HexNac2-B; 447.167: YY-HexNac2,Y-HexNac2; 509.214: Y-Hex3-B,Hex3-B; 550.188: Y-Hex2HexNac1-B,Hex2HexNac1-B; 671.219: Y-Hex4-B,Hex4-B; 712.272: Y-Hex3HexNac1-B,Hex3HexNac1-B; 833.311: Y-Hex5-B,Hex5-B; 874.289: Y-Hex4HexNac1-B,Hex4HexNac1-B; 915.28: Y-Hex3HexNac2-B,Hex3HexNac2-B; 933.321: YY-Hex3HexNac2,Y-Hex3HexNac2; 995.34: Y-Hex6-B,Hex6-B; 1013.236: YY-Hex6,Y-Hex6; 1036.335: Y-Hex5HexNac1-B,Hex5HexNac1-B; 1077.364: Y-Hex4HexNac2-B,Hex4HexNac2-B; 1095.352: YY-Hex4HexNac2,Y-Hex4HexNac2; 1157.334: Y-Hex7-B,Hex7-B; 1198.374: Y-Hex6HexNac1-B,Hex6HexNac1-B; 1319.431: Y-Hex8-B,Hex8-B; 1360.486: Y-Hex7HexNac1-B,Hex7HexNac1-B; 1378.385: YY-Hex7HexNac1,Y-Hex7HexNac1; 1400.466: Y-Hex6HexNac2-B,Hex6HexNac2-B

						B; 1419.505: YY-Hex6HexNac2,Y-Hex6HexNac2; 1522.538: Y-Hex8HexNac1-B,Hex8HexNac1-B; 1540.671: YY-Hex8HexNac1,Y-Hex8HexNac1; 1562.53: Y-Hex7HexNac2-B,Hex7HexNac2-B; 1581.63: YY-Hex7HexNac2,Y-Hex7HexNac2; 1743.632: YY-Hex8HexNac2,Y-Hex8HexNac2
21	1768.616	H6N3F1	1768.613	-0.0032	-1.8363	
22	1779.629	H5N3E1	1779.629	-0.0003	-0.1480	388.112: Y-Hex1HexNac1-B,Hex1HexNac1-B; 522.156: YY-Hex1Neu5Ac-Est1,Y-Hex1Neu5Ac-Est1; 712.258: Y-Hex3HexNac1-B,Hex3HexNac1-B; 915.322: Y-Hex3HexNac2-B,Hex3HexNac2-B; 1036.28: Y-Hex5HexNac1-B,Hex5HexNac1-B; 1077.367: Y-Hex4HexNac2-B,Hex4HexNac2-B; 1396.514: Y-Hex4HexNac2Neu5Ac-Est1-B,Hex4HexNac2Neu5Ac-Est1-B; 1442.518: Y-Hex5HexNac3-B,Hex5HexNac3-B; 1576.979: YY-Hex5HexNac2Neu5Ac-Est1,Y-Hex5HexNac2Neu5Ac-Est1; 1598.981: Y-Hex4HexNac3Neu5Ac-Est1-B,Hex4HexNac3Neu5Ac-Est1-B; 1779.678: YY-Hex5HexNac3Neu5Ac-Est1,Y-Hex5HexNac3Neu5Ac-Est1
23	1809.640	H5N4F1	1809.639	-0.0007	-0.3861	169.092: Y-dHex1-B,dHex1-B; 226.13: Y-HexNac1-B,HexNac1-B; 389.137: YY-HexNac1dHex1,Y-HexNac1dHex1; 429.178: Y-HexNac2-B,HexNac2-B; 447.224: YY-HexNac2,Y-HexNac2; 527.178: YY-Hex3,Y-Hex3; 550.219: Y-Hex2HexNac1-B,Hex2HexNac1-B; 568.238: YY-Hex2HexNac1,Y-Hex2HexNac1; 713.254: YY-Hex2HexNac1dHex1,Y-Hex2HexNac1dHex1; 874.305: Y-Hex4HexNac1-B,Hex4HexNac1-B; 916.338: YY-Hex2HexNac2dHex1,Y-Hex2HexNac2dHex1; 1077.396: Y-Hex4HexNac2-B,Hex4HexNac2-B; 1136.435: YY-Hex3HexNac3,Y-Hex3HexNac3; 1143.475: Y-Hex1HexNac4dHex1-B,Hex1HexNac4dHex1-B; 1239.445: Y-Hex5HexNac2-B,Hex5HexNac2-B; 1282.491: YY-Hex3HexNac3dHex1,Y-Hex3HexNac3dHex1; 1298.486: YY-Hex4HexNac3,Y-Hex4HexNac3; 1321.604: Y-Hex3HexNac4-B,Hex3HexNac4-B; 1426.543: Y-Hex4HexNac3dHex1-B,Hex4HexNac3dHex1-B; 1442.529: Y-Hex5HexNac3-B,Hex5HexNac3-B; 1444.55: YY-Hex4HexNac3dHex1,Y-Hex4HexNac3dHex1; 1460.604: YY-Hex5HexNac3,Y-Hex5HexNac3; 1647.708: YY-Hex4HexNac4dHex1,Y-Hex4HexNac4dHex1; 1663.666: YY-Hex5HexNac4,Y-Hex5HexNac4; 1809.694: YY-Hex5HexNac4dHex1,Y-Hex5HexNac4dHex1
24	1820.651	H4N4E1	1820.655	0.0043	2.3540	
25	1825.625	H6N4	1825.634	0.0092	5.0481	
26	1836.647	H4N4Ge1	1836.650	0.0032	1.7425	
27	1850.664	H4N5F1	1850.666	0.0019	0.9999	
28	1866.657	H5N5	1866.661	0.0038	2.0170	
29	1891.689	H3N6F1	1891.692	0.0034	1.7971	
30	1905.636	H9N2	1905.634	-0.0021	-1.0804	
31	1941.680	H6N3E1	1941.682	0.0016	0.8035	
32	1952.657	H5N4GI1	1952.661	0.0042	2.1299	
33	1966.704	H4N4F1E1	1966.713	0.0092	4.6751	
34	1982.708	H5N4E1	1982.708	0.0001	0.0551	226.172: Y-HexNac1-B,HexNac1-B; 388.165: Y-Hex1HexNac1-B,Hex1HexNac1-B; 504.208: Y-Hex1Neu5Ac-Est1-B,Hex1Neu5Ac-Est1-B; 522.189: YY-Hex1Neu5Ac-Est1,Y-Hex1Neu5Ac-Est1; 550.246: Y-Hex2HexNac1-B,Hex2HexNac1-B; 650.311: YY-HexNac3,Y-HexNac3; 707.276: Y-Hex1HexNac1Neu5Ac-Est1-B,Hex1HexNac1Neu5Ac-Est1-B; 712.326: Y-Hex3HexNac1-B,Hex3HexNac1-B; 748.383: Y-HexNac2Neu5Ac-Est1-B,HexNac2Neu5Ac-Est1-B; 771.35: YY-Hex2HexNac2,Y-Hex2HexNac2; 915.358: Y-Hex3HexNac2-B,Hex3HexNac2-B; 933.363: YY-Hex3HexNac2,Y-Hex3HexNac2; 1036.318: Y-Hex5HexNac1-B,Hex5HexNac1-B; 1077.384: Y-Hex4HexNac2-B,Hex4HexNac2-B; 1095.409: YY-Hex4HexNac2,Y-Hex4HexNac2; 1118.365: Y-Hex3HexNac3-B,Hex3HexNac3-B; 1193.417: Y-Hex4HexNac1Neu5Ac-Est1-B,Hex4HexNac1Neu5Ac-Est1-B; 1257.492: YY-Hex5HexNac2,Y-Hex5HexNac2; 1280.485: Y-Hex4HexNac3-B,Hex4HexNac3-B; 1298.466: YY-Hex4HexNac3,Y-Hex4HexNac3; 1396.543: Y-Hex4HexNac2Neu5Ac-Est1-B,Hex4HexNac2Neu5Ac-Est1-B; 1442.551: Y-Hex5HexNac3-B,Hex5HexNac3-B; 1455.614: YY-Hex3HexNac3Neu5Ac-Est1,Y-Hex3HexNac3Neu5Ac-Est1; 1460.474: YY-Hex5HexNac3,Y-Hex5HexNac3; 1483.575: Y-Hex4HexNac4-B,Hex4HexNac4-B; 1501.609: YY-Hex4HexNac4,Y-Hex4HexNac4; 1558.598: Y-Hex5HexNac2Neu5Ac-Est1-B,Hex5HexNac2Neu5Ac-Est1-B; 1599.67: Y-Hex4HexNac3Neu5Ac-Est1-B,Hex4HexNac3Neu5Ac-Est1-B; 1617.639: YY-Hex4HexNac3Neu5Ac-Est1,Y-Hex4HexNac3Neu5Ac-Est1; 1645.684: Y-Hex5HexNac4-B,Hex5HexNac4-B; 1663.658: YY-Hex5HexNac4,Y-Hex5HexNac4; 1761.717: Y-Hex5HexNac3Neu5Ac-Est1-

						B,Hex5HexNac3Neu5Ac-Est1-B; 1779.778: YY-Hex5HexNac3Neu5Ac-Est1,Y-Hex5HexNac3Neu5Ac-Est1; 1820.772: YY-Hex4HexNac4Neu5Ac-Est1,Y-Hex4HexNac4Neu5Ac-Est1; 1982.743: YY-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1,Y-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1
35	1998.702	H5N4Ge1	1998.703	0.0010	0.5122	
36	2012.715	H5N5F1	2012.719	0.0037	1.8253	
37	2039.728	H4N5Ge1	2039.730	0.0016	0.7711	
38	2067.692	H10N2	2067.687	-0.0052	-2.5320	
39	2082.726	H5N4F1L1	2082.724	-0.0018	-0.8867	
40	2087.736	H6N3F1E1	2087.739	0.0035	1.6616	
41	2098.719	H5N4F1G1	2098.719	0.0001	0.0323	
42	2103.733	H7N3E1	2103.734	0.0014	0.6576	226.171: Y-HexNac1-B,HexNac1-B, 388.163: Y-Hex1HexNac1-B,Hex1HexNac1-B, 504.206: Y-Hex1Neu5Ac-Est1-B,Hex1Neu5Ac-Est1-B, 545.234: Y-HexNac1Neu5Ac-Est1-B,HexNac1Neu5Ac-Est1-B, 550.168: Y-Hex2HexNac1-B,Hex2HexNac1-B, 707.229: Y-Hex1HexNac1Neu5Ac-Est1-B,Hex1HexNac1Neu5Ac-Est1-B, 712.29: Y-Hex3HexNac1-B,Hex3HexNac1-B, 874.311: Y-Hex4HexNac1-B,Hex4HexNac1-B, 915.336: Y-Hex3HexNac2-B,Hex3HexNac2-B, 1036.414: Y-Hex5HexNac1-B,Hex5HexNac1-B, 1077.358: Y-Hex4HexNac2-B,Hex4HexNac2-B, 1095.32: YY-Hex4HexNac2,Y-Hex4HexNac2, 1136.299: YY-Hex3HexNac3,Y-Hex3HexNac3, 1193.392: Y-Hex4HexNac1Neu5Ac-Est1-B,Hex4HexNac1Neu5Ac-Est1-B, 1198.35: Y-Hex6HexNac1-B,Hex6HexNac1-B, 1239.448: Y-Hex5HexNac2-B,Hex5HexNac2-B, 1298.412: YY-Hex4HexNac3,Y-Hex4HexNac3, 1396.511: Y-Hex4HexNac2Neu5Ac-Est1-B,Hex4HexNac2Neu5Ac-Est1-B, 1558.536: Y-Hex5HexNac2Neu5Ac-Est1-B,Hex5HexNac2Neu5Ac-Est1-B, 1562.588: Y-Hex7HexNac2-B,Hex7HexNac2-B, 1617.646: YY-Hex4HexNac3Neu5Ac-Est1,Y-Hex4HexNac3Neu5Ac-Est1, 1622.622: YY-Hex6HexNac3,Y-Hex6HexNac3, 1761.66: Y-Hex5HexNac3Neu5Ac-Est1-B,Hex5HexNac3Neu5Ac-Est1-B, 1779.705: YY-Hex5HexNac3Neu5Ac-Est1,Y-Hex5HexNac3Neu5Ac-Est1, 1881.774: Y-Hex7HexNac2Neu5Ac-Est1-B,Hex7HexNac2Neu5Ac-Est1-B, 1941.766: YY-Hex6HexNac3Neu5Ac-Est1,Y-Hex6HexNac3Neu5Ac-Est1, 2103.733: YY-Hex7HexNac3Neu5Ac-Est1,Y-Hex7HexNac3Neu5Ac-Est1
43	2128.765	H5N4F1E1	2128.766	0.0010	0.4782	342.177: Y-Neu5Ac-Est1-B,Neu5Ac-Est1-B; 347.238: Y-Hex2-B,Hex2-B; 389.189: YY-HexNac1dHex1,Y-HexNac1dHex1; 488.159: Y-Neu5Ac-Est1dHex1-B,Neu5Ac-Est1dHex1-B; 504.198: Y-Hex1Neu5Ac-Est1-B,Hex1Neu5Ac-Est1-B; 550.246: Y-Hex2HexNac1-B,Hex2HexNac1-B; 593.21: YY-HexNac2dHex1,Y-HexNac2dHex1; 650.272: Y-Hex1Neu5Ac-Est1dHex1-B,Hex1Neu5Ac-Est1dHex1-B,YY-HexNac3,Y-HexNac3; 707.285: Y-Hex1HexNac1Neu5Ac-Est1-B,Hex1HexNac1Neu5Ac-Est1-B; 713.259: YY-Hex2HexNac1dHex1,Y-Hex2HexNac1dHex1; 748.283: Y-HexNac2Neu5Ac-Est1-B,HexNac2Neu5Ac-Est1-B; 765.318: YY-HexNac2Neu5Ac-Est1,Y-HexNac2Neu5Ac-Est1; 869.351: Y-Hex2HexNac1Neu5Ac-Est1-B,Hex2HexNac1Neu5Ac-Est1-B; 874.313: Y-Hex4HexNac1-B,Hex4HexNac1-B; 886.331: YY-Hex2HexNac1Neu5Ac-Est1,Y-Hex2HexNac1Neu5Ac-Est1; 915.412: Y-Hex3HexNac2-B,Hex3HexNac2-B; 933.388: YY-Hex3HexNac2,Y-Hex3HexNac2; 1036.331: Y-Hex5HexNac1-B,Hex5HexNac1-B; 1077.385: Y-Hex4HexNac2-B,Hex4HexNac2-B; 1080.343: YY-Hex3HexNac2dHex1,Y-Hex3HexNac2dHex1; 1095.381: YY-Hex4HexNac2,Y-Hex4HexNac2; 1136.463: Y-Hex4Neu5Ac-Est1dHex1-B,Hex4Neu5Ac-Est1dHex1-B,YY-Hex3HexNac3,Y-Hex3HexNac3; 1193.508: Y-Hex4HexNac1Neu5Ac-Est1-B,Hex4HexNac1Neu5Ac-Est1-B; 1239.429: Y-Hex5HexNac2-B,Hex5HexNac2-B; 1282.472: YY-Hex3HexNac3dHex1,Y-Hex3HexNac3dHex1; 1298.458: Y-Hex5Neu5Ac-Est1dHex1-B,Hex5Neu5Ac-Est1dHex1-B,YY-Hex4HexNac3,Y-Hex4HexNac3; 1322.707: YY-Hex2HexNac4dHex1,Y-Hex2HexNac4dHex1; 1396.509: Y-Hex4HexNac2Neu5Ac-Est1-B,Hex4HexNac2Neu5Ac-Est1-B; 1403.565: YY-Hex5HexNac2dHex1,Y-Hex5HexNac2dHex1; 1426.553: Y-Hex4HexNac3dHex1-B,Hex4HexNac3dHex1-B; 1444.53: YY-Hex4HexNac3dHex1,Y-Hex4HexNac3dHex1; 1460.539: YY-Hex5HexNac3,Y-Hex5HexNac3; 1501.588: Y-Hex5HexNac1Neu5Ac-Est1dHex1-B,Hex5HexNac1Neu5Ac-Est1dHex1-B,YY-Hex4HexNac4,Y-Hex4HexNac4; 1558.575: Y-Hex5HexNac2Neu5Ac-Est1-B,Hex5HexNac2Neu5Ac-Est1-B; 1606.618: YY-Hex5HexNac3dHex1,Y-Hex5HexNac3dHex1; 1617.623: YY-Hex4HexNac3Neu5Ac-Est1,Y-Hex4HexNac3Neu5Ac-Est1; 1647.64: YY-Hex4HexNac4dHex1,Y-Hex4HexNac4dHex1; 1663.652: YY-Hex5HexNac4,Y-Hex5HexNac4; 1761.691: Y-Hex5HexNac3Neu5Ac-Est1-

						B,Hex5HexNac3Neu5Ac-Est1-B; 1763.706: YY-Hex4HexNac3Neu5Ac-Est1dHex1,Y-Hex4HexNac3Neu5Ac-Est1dHex1; 1779.696: YY-Hex5HexNac3Neu5Ac-Est1,Y-Hex5HexNac3Neu5Ac-Est1; 1791.756: Y-Hex5HexNac4dHex1-B,Hex5HexNac4dHex1-B; 1809.727: YY-Hex5HexNac4dHex1,Y-Hex5HexNac4dHex1; 1963.714: Y-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1-B,Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1-B; 1966.811: YY-Hex4HexNac4Neu5Ac-Est1dHex1,Y-Hex4HexNac4Neu5Ac-Est1dHex1; 1982.807: YY-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1,Y-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1; 2128.768: YY-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1dHex1,Y-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1dHex1
						226.162: Y-HexNac1-B,HexNac1-B, 372.172: Y-HexNac1dHex1-B,HexNac1dHex1-B, 388.165: Y-Hex1HexNac1-B,Hex1HexNac1-B, 429.165: Y-HexNac2-B,HexNac2-B, 504.235: Y-Neu5Gc-Est1dHex1-B,Neu5Gc-Est1dHex1-B, 520.22: Y-Hex1Neu5Gc-Est1-B,Hex1Neu5Gc-Est1-B, 550.234: Y-Hex2HexNac1-B,Hex2HexNac1-B, 561.224: Y-HexNac1Neu5Gc-Est1-B,HexNac1Neu5Gc-Est1-B, 568.237: YY-Hex2HexNac1,Y-Hex2HexNac1, 578.319: YY-HexNac1Neu5Gc-Est1,Y-HexNac1Neu5Gc-Est1, 666.355: Y-Hex1Neu5Gc-Est1dHex1-B,Hex1Neu5Gc-Est1dHex1-B, 712.292: Y-Hex3HexNac1-B,Hex3HexNac1-B, 723.28: Y-Hex1HexNac1Neu5Gc-Est1-B,Hex1HexNac1Neu5Gc-Est1-B, 753.306: Y-Hex2HexNac2-B,Hex2HexNac2-B, 764.3: Y-HexNac2Neu5Gc-Est1-B,HexNac2Neu5Gc-Est1-B, 869.407: Y-Hex1HexNac1Neu5Gc-Est1dHex1-B,Hex1HexNac1Neu5Gc-Est1dHex1-B, 874.362: Y-Hex4HexNac1-B,Hex4HexNac1-B, 885.36: Y-Hex2HexNac1Neu5Gc-Est1-B,Hex2HexNac1Neu5Gc-Est1-B, 915.348: Y-Hex3HexNac2-B,Hex3HexNac2-B, 933.382: YY-Hex3HexNac2,Y-Hex3HexNac2, 1036.412: Y-Hex5HexNac1-B,Hex5HexNac1-B, 1077.435: Y-Hex4HexNac2-B,Hex4HexNac2-B, 1095.385: YY-Hex4HexNac2,Y-Hex4HexNac2, 1143.678: Y-Hex1HexNac4dHex1-B,Hex1HexNac4dHex1-B, 1146.671: YY-Hex1HexNac3Neu5Gc-Est1,Y-Hex1HexNac3Neu5Gc-Est1, 1209.441: Y-Hex4HexNac1Neu5Gc-Est1-B,Hex4HexNac1Neu5Gc-Est1-B, 1240.455: YY-Hex4HexNac2dHex1,Y-Hex4HexNac2dHex1, 1257.494: YY-Hex5HexNac2,Y-Hex5HexNac2, 1280.501: Y-Hex4HexNac3-B,Hex4HexNac3-B, 1298.484: YY-Hex4HexNac3,Y-Hex4HexNac3, 1322.646: YY-Hex2HexNac4dHex1,Y-Hex2HexNac4dHex1, 1403.526: YY-Hex5HexNac2dHex1,Y-Hex5HexNac2dHex1, 1412.521: Y-Hex4HexNac2Neu5Gc-Est1-B,Hex4HexNac2Neu5Gc-Est1-B, 1426.536: Y-Hex4HexNac3dHex1-B,Hex4HexNac3dHex1-B, 1444.565: YY-Hex4HexNac3dHex1,Y-Hex4HexNac3dHex1, 1460.552: YY-Hex5HexNac3,Y-Hex5HexNac3, 1558.656: Y-Hex4HexNac2Neu5Gc-Est1dHex1-B,Hex4HexNac2Neu5Gc-Est1dHex1-B, 1574.588: Y-Hex5HexNac2Neu5Gc-Est1-B,Hex5HexNac2Neu5Gc-Est1-B, 1606.612: YY-Hex5HexNac3dHex1,Y-Hex5HexNac3dHex1, 1617.601: YY-Hex3HexNac3Neu5Gc-Est1dHex1,Y-Hex3HexNac3Neu5Gc-Est1dHex1, 1633.681: YY-Hex4HexNac3Neu5Gc-Est1,Y-Hex4HexNac3Neu5Gc-Est1, 1647.674: YY-Hex4HexNac4dHex1,Y-Hex4HexNac4dHex1, 1663.707: YY-Hex5HexNac4,Y-Hex5HexNac4, 1777.691: Y-Hex5HexNac3Neu5Gc-Est1-B,Hex5HexNac3Neu5Gc-Est1-B, 1779.697: YY-Hex4HexNac3Neu5Gc-Est1dHex1,Y-Hex4HexNac3Neu5Gc-Est1dHex1, 1791.716: Y-Hex5HexNac4dHex1-B,Hex5HexNac4dHex1-B, 1795.711: YY-Hex5HexNac3Neu5Gc-Est1,Y-Hex5HexNac3Neu5Gc-Est1, 1809.746: YY-Hex5HexNac4dHex1,Y-Hex5HexNac4dHex1, 1964.819: Y-Hex4HexNac4Neu5Gc-Est1dHex1-B,Hex4HexNac4Neu5Gc-Est1dHex1-B, 1979.797: Y-Hex5HexNac4Neu5Gc-Est1-B,Hex5HexNac4Neu5Gc-Est1-B, 1982.816: YY-Hex4HexNac4Neu5Gc-Est1dHex1,Y-Hex4HexNac4Neu5Gc-Est1dHex1, 1998.779: YY-Hex5HexNac4Neu5Gc-Est1,Y-Hex5HexNac4Neu5Gc-Est1, 2144.764: YY-Hex5HexNac4Neu5Gc-Est1dHex1,Y-Hex5HexNac4Neu5Gc-Est1dHex1
44	2144.760	H5N4F1Ge1	2144.761	0.0009	0.4348	
45	2160.743	H6N4Ge1	2160.756	0.0128	5.9457	
46	2169.783	H4N5F1E1	2169.793	0.0096	4.4092	
47	2185.787	H5N5E1	2185.787	0.0005	0.2204	226.165: Y-HexNac1-B,HexNac1-B; 359.148: YY-Neu5Ac-Est1,Y-Neu5Ac-Est1; 388.158: Y-Hex1HexNac1-B,Hex1HexNac1-B; 429.169: Y-HexNac2-B,HexNac2-B; 504.246: Y-Hex1Neu5Ac-Est1-B,Hex1Neu5Ac-Est1-B; 550.2: Y-Hex2HexNac1-B,Hex2HexNac1-B; 707.292: Y-Hex1HexNac1Neu5Ac-Est1-B,Hex1HexNac1Neu5Ac-Est1-B; 712.35: Y-Hex3HexNac1-B,Hex3HexNac1-B; 765.293: YY-HexNac2Neu5Ac-Est1,Y-HexNac2Neu5Ac-Est1; 874.288: Y-Hex4HexNac1-B,Hex4HexNac1-B; 915.343: Y-Hex3HexNac2-B,Hex3HexNac2-B; 933.355: YY-Hex3HexNac2,Y-Hex3HexNac2; 1077.39: Y-Hex4HexNac2-B,Hex4HexNac2-B; 1118.411: Y-Hex3HexNac3-B,Hex3HexNac3-B; 1136.413: YY-Hex3HexNac3,Y-Hex3HexNac3; 1280.448: Y-Hex4HexNac3-B,Hex4HexNac3-B; 1298.461: YY-Hex4HexNac3,Y-Hex4HexNac3; 1339.484: YY-Hex3HexNac4,Y-Hex3HexNac4; 1501.535: YY-Hex4HexNac4,Y-Hex4HexNac4; 1663.724: YY-Hex5HexNac4,Y-Hex5HexNac4; 1761.74: Y-

						Hex5HexNac3Neu5Ac-Est1-B,Hex5HexNac3Neu5Ac-Est1-B; 1779.743: YY-Hex5HexNac3Neu5Ac-Est1,Y-Hex5HexNac3Neu5Ac-Est1; 1820.691: YY-Hex4HexNac4Neu5Ac-Est1,Y-Hex4HexNac4Neu5Ac-Est1; 1866.697: YY-Hex5HexNac5,Y-Hex5HexNac5; 1982.802: YY-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1,Y-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1; 2023.85: YY-Hex4HexNac5Neu5Ac-Est1,Y-Hex4HexNac5Neu5Ac-Est1; 2185.754: YY-Hex5HexNac5Neu5Ac-Est1,Y-Hex5HexNac5Neu5Ac-Est1
48	2201.778	H5N5Ge1	2201.782	0.0044	1.9967	
49	2210.813	H3N6F1E1	2210.819	0.0061	2.7665	
50	2226.808	H4N6E1	2226.814	0.0060	2.7083	226.226: Y-HexNac1-B,HexNac1-B, 429.158: Y-HexNac2-B,HexNac2-B, 545.248: Y-HexNac1Neu5Ac-Est1-B,HexNac1Neu5Ac-Est1-B, 550.145: Y-Hex2HexNac1-B,Hex2HexNac1-B, 707.29: Y-Hex1HexNac1Neu5Ac-Est1-B,Hex1HexNac1Neu5Ac-Est1-B, 712.348: Y-Hex3HexNac1-B,Hex3HexNac1-B, 748.374: Y-HexNac2Neu5Ac-Est1-B,HexNac2Neu5Ac-Est1-B, 827.276: Y-Hex3Neu5Ac-Est1-B,Hex3Neu5Ac-Est1-B, 915.405: Y-Hex3HexNac2-B,Hex3HexNac2-B, 933.337: YY-Hex3HexNac2,Y-Hex3HexNac2, 1118.398: Y-Hex3HexNac3-B,Hex3HexNac3-B, 1136.376: YY-Hex3HexNac3,Y-Hex3HexNac3, 1321.438: Y-Hex3HexNac4-B,Hex3HexNac4-B, 1340.44: YY-Hex3HexNac4,Y-Hex3HexNac4, 1524.528: Y-Hex3HexNac5-B,Hex3HexNac5-B, 1543.537: YY-Hex3HexNac5,Y-Hex3HexNac5, 1820.726: YY-Hex4HexNac4Neu5Ac-Est1,Y-Hex4HexNac4Neu5Ac-Est1, 1843.695: Y-Hex3HexNac5Neu5Ac-Est1-B,Hex3HexNac5Neu5Ac-Est1-B, 2023.81: YY-Hex4HexNac5Neu5Ac-Est1,Y-Hex4HexNac5Neu5Ac-Est1, 2226.74: YY-Hex4HexNac6Neu5Ac-Est1,Y-Hex4HexNac6Neu5Ac-Est1
51	2241.749	H5N4GI2	2241.741	-0.0081	-3.6019	
52	2255.797	H4N4F1E1GI1	2255.793	-0.0040	-1.7905	
53	2271.787	H5N4E1GI1	2271.788	0.0009	0.3854	
54	2285.857	H4N4F1E2	2285.840	-0.0171	-7.4759	
55	2290.816	H5N4F2Ge1	2290.819	0.0028	1.2403	
56	2301.831	H5N4E2	2301.835	0.0038	1.6621	545.984: Y-HexNac1Neu5Ac-Est1-B,HexNac1Neu5Ac-Est1-B; 550.137: Y-Hex2HexNac1-B,Hex2HexNac1-B; 707.247: Y-Hex1HexNac1Neu5Ac-Est1-B,Hex1HexNac1Neu5Ac-Est1-B; 712.179: Y-Hex3HexNac1-B,Hex3HexNac1-B; 933.289: YY-Hex3HexNac2,Y-Hex3HexNac2; 1077.347: Y-Hex4HexNac2-B,Hex4HexNac2-B; 1239.397: Y-Hex5HexNac2-B,Hex5HexNac2-B; 1298.456: YY-Hex4HexNac3,Y-Hex4HexNac3; 1396.496: Y-Hex4HexNac2Neu5Ac-Est1-B,Hex4HexNac2Neu5Ac-Est1-B; 1599.55: Y-Hex4HexNac3Neu5Ac-Est1-B,Hex4HexNac3Neu5Ac-Est1-B; 1617.561: YY-Hex4HexNac3Neu5Ac-Est1,Y-Hex4HexNac3Neu5Ac-Est1; 1982.781: YY-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1,Y-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1; 2301.752: YY-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est2,Y-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est2
57	2306.813	H6N4F1Ge1	2306.814	0.0008	0.3277	
58	2317.827	H6N5GI1	2317.793	-0.0336	-14.5160	
59	2331.838	H5N5F1E1	2331.845	0.0074	3.1694	
60	2333.838	H5N4Ge2	2333.825	-0.0133	-5.7181	
61	2347.836	H6N5E1	2347.840	0.0043	1.8337	
62	2356.851	H3N6F2E1	2356.877	0.0260	11.0422	
63	2371.811	H5N4F1L1GI1	2371.804	-0.0071	-2.9852	
64	2387.802	H5N4F1GI2	2387.799	-0.0032	-1.3258	1079.254: YY-Hex3HexNac2dHex1,Y-Hex3HexNac2dHex1, 1444.479: YY-Hex4HexNac3dHex1,Y-Hex4HexNac3dHex1, 1734.579: YY-Hex4HexNac3Neu5GcLac1dHex1,Y-Hex4HexNac3Neu5GcLac1dHex1, 1809.662: YY-Hex5HexNac4dHex1,Y-Hex5HexNac4dHex1, 2225.844: YY-Hex4HexNac4Neu5GcLac2dHex1,Y-Hex4HexNac4Neu5GcLac2dHex1, 2241.838: YY-Hex5HexNac4Neu5GcLac2,Y-Hex5HexNac4Neu5GcLac2, 2387.708: YY-Hex5HexNac4Neu5GcLac2dHex1,Y-Hex5HexNac4Neu5GcLac2dHex1
65	2401.841	H5N4F1E1L1	2401.851	0.0099	4.1093	
66	2417.842	H5N4F1E1GI1	2417.846	0.0038	1.5652	
67	2433.842	H5N4F1Ge1GI1	2433.841	-0.0013	-0.5345	388.185: Y-Hex1HexNac1-B,Hex1HexNac1-B, 712.201: Y-Hex3HexNac1-B,Hex3HexNac1-B, 723.225: Y-Hex1HexNac1Neu5Gc-Est1-B,Hex1HexNac1Neu5Gc-Est1-B, 915.302: Y-Hex3HexNac2-B,Hex3HexNac2-B, 933.313: YY-Hex3HexNac2,Y-Hex3HexNac2, 1077.43: Y-Hex4HexNac2-B,Hex4HexNac2-B, 1079.313: YY-Hex3HexNac2dHex1,Y-Hex3HexNac2dHex1, 1193.35: YY-Hex2HexNac1Neu5Gc-Est1Neu5GcLac1,Y-

						Hex2HexNac1Neu5Gc-Est1Neu5GcLac1,Y-Hex3HexNac1Neu5Gc-Est1dHex1-B,Hex3HexNac1Neu5Gc-Est1dHex1-B, 1209.386: Y-Hex4HexNac1Neu5Gc-Est1-B,Hex4HexNac1Neu5Gc-Est1-B, 1282.447: YY-Hex3HexNac3dHex1,Y-Hex3HexNac3dHex1, 1412.411: Y-Hex4HexNac2Neu5Gc-Est1-B,Hex4HexNac2Neu5Gc-Est1-B, 1444.54: YY-Hex4HexNac3dHex1,Y-Hex4HexNac3dHex1, 1733.583: YY-Hex4HexNac3Neu5GcLac1dHex1,Y-Hex4HexNac3Neu5GcLac1dHex1, 1780.602: YY-Hex4HexNac3Neu5Gc-Est1dHex1,Y-Hex4HexNac3Neu5Gc-Est1dHex1, 1791.67: Y-Hex5HexNac4dHex1-B,Hex5HexNac4dHex1-B, 1809.69: YY-Hex5HexNac4dHex1,Y-Hex5HexNac4dHex1, 1982.746: YY-Hex4HexNac4Neu5Gc-Est1dHex1,Y-Hex4HexNac4Neu5Gc-Est1dHex1, 2066.743: Y-Hex5HexNac3Neu5Gc-Est1Neu5GcLac1-B,Hex5HexNac3Neu5Gc-Est1Neu5GcLac1-B, 2098.814: YY-Hex5HexNac4Neu5GcLac1dHex1,Y-Hex5HexNac4Neu5GcLac1dHex1, 2286.796: YY-Hex5HexNac4Neu5Gc-Est1Neu5GcLac1,Y-Hex5HexNac4Neu5Gc-Est1Neu5GcLac1, 2433.742: YY-Hex5HexNac4Neu5Gc-Est1Neu5GcLac1dHex1,Y-Hex5HexNac4Neu5Gc-Est1Neu5GcLac1dHex1
68	2447.888	H5N4F1E2	2447.893	0.0047	1.9342	
69	2463.884	H6N5F1G1	2463.851	-0.0327	-13.2866	550.144: Y-Hex2HexNac1-B,Hex2HexNac1-B, 594.16: YY-HexNac2dHex1,Y-HexNac2dHex1, 712.216: Y-Hex3HexNac1-B,Hex3HexNac1-B, 874.224: Y-Hex4HexNac1-B,Hex4HexNac1-B, 915.341: Y-Hex3HexNac2-B,Hex3HexNac2-B, 933.299: YY-Hex3HexNac2,Y-Hex3HexNac2, 1077.345: Y-Hex4HexNac2-B,Hex4HexNac2-B, 1079.375: YY-Hex3HexNac2dHex1,Y-Hex3HexNac2dHex1, 1282.467: YY-Hex3HexNac3dHex1,Y-Hex3HexNac3dHex1, 1298.372: YY-Hex4HexNac3,Y-Hex4HexNac3, 1444.476: YY-Hex4HexNac3dHex1,Y-Hex4HexNac3dHex1, 1633.545: Y-Hex6HexNac1Neu5GcLac1dHex1-B,Hex6HexNac1Neu5GcLac1dHex1-B, 1809.672: YY-Hex5HexNac4dHex1,Y-Hex5HexNac4dHex1, 1850.724: YY-Hex4HexNac5dHex1,Y-Hex4HexNac5dHex1, 1893.674: Y-Hex6HexNac3Neu5GcLac1-B,Hex6HexNac3Neu5GcLac1-B, 2096.747: Y-Hex6HexNac4Neu5GcLac1-B,Hex6HexNac4Neu5GcLac1-B, 2301.882: YY-Hex5HexNac5Neu5GcLac1dHex1,Y-Hex5HexNac5Neu5GcLac1dHex1, 2463.757: YY-Hex6HexNac5Neu5GcLac1dHex1,Y-Hex6HexNac5Neu5GcLac1dHex1
70	2479.882	H5N4F1Ge2	2479.883	0.0006	0.2274	
71	2488.906	H4N5F1E2	2488.919	0.0133	5.3371	
72	2493.896	H6N5F1E1	2493.898	0.0022	0.8877	226.22: Y-HexNac1-B,HexNac1-B; 347.201: Y-Hex2-B,Hex2-B; 372.196: Y-HexNac1dHex1-B,HexNac1dHex1-B; 388.214: Y-Hex1HexNac1-B,Hex1HexNac1-B; 504.178: Y-Hex1Neu5Ac-Est1-B,Hex1Neu5Ac-Est1-B; 550.146: Y-Hex2HexNac1-B,Hex2HexNac1-B; 594.203: YY-HexNac2dHex1,Y-HexNac2dHex1; 707.271: Y-Hex1HexNac1Neu5Ac-Est1-B,Hex1HexNac1Neu5Ac-Est1-B; 712.334: Y-Hex3HexNac1-B,Hex3HexNac1-B; 874.322: Y-Hex4HexNac1-B,Hex4HexNac1-B; 915.306: Y-Hex3HexNac2-B,Hex3HexNac2-B; 933.336: YY-Hex3HexNac2,Y-Hex3HexNac2; 1077.388: Y-Hex4HexNac2-B,Hex4HexNac2-B; 1239.457: Y-Hex5HexNac2-B,Hex5HexNac2-B; 1282.456: YY-Hex3HexNac3dHex1,Y-Hex3HexNac3dHex1; 1298.496: Y-Hex5Neu5Ac-Est1dHex1-B,Hex5Neu5Ac-Est1dHex1-B,YY-Hex4HexNac3,Y-Hex4HexNac3; 1442.506: Y-Hex5HexNac3-B,Hex5HexNac3-B; 1444.493: YY-Hex4HexNac3dHex1,Y-Hex4HexNac3dHex1; 1617.556: YY-Hex4HexNac3Neu5Ac-Est1,Y-Hex4HexNac3Neu5Ac-Est1; 1647.541: YY-Hex4HexNac4dHex1,Y-Hex4HexNac4dHex1; 1663.575: Y-Hex6HexNac1Neu5Ac-Est1dHex1-B,Hex6HexNac1Neu5Ac-Est1dHex1-B,YY-Hex5HexNac4,Y-Hex5HexNac4; 1761.705: Y-Hex5HexNac3Neu5Ac-Est1-B,Hex5HexNac3Neu5Ac-Est1-B; 1763.711: YY-Hex4HexNac3Neu5Ac-Est1dHex1,Y-Hex4HexNac3Neu5Ac-Est1dHex1; 1779.696: YY-Hex5HexNac3Neu5Ac-Est1,Y-Hex5HexNac3Neu5Ac-Est1; 1791.648: Y-Hex5HexNac4dHex1-B,Hex5HexNac4dHex1-B; 1809.632: YY-Hex5HexNac4dHex1,Y-Hex5HexNac4dHex1; 1923.686: Y-Hex6HexNac3Neu5Ac-Est1-B,Hex6HexNac3Neu5Ac-Est1-B; 1966.751: YY-Hex4HexNac4Neu5Ac-Est1dHex1,Y-Hex4HexNac4Neu5Ac-Est1dHex1; 1982.815: YY-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1,Y-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1; 2012.787: YY-Hex5HexNac5dHex1,Y-Hex5HexNac5dHex1; 2127.825: YY-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1dHex1,Y-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1dHex1; 2144.835: YY-Hex6HexNac4Neu5Ac-Est1,Y-Hex6HexNac4Neu5Ac-Est1; 2174.841: YY-Hex6HexNac5dHex1,Y-Hex6HexNac5dHex1; 2347.901: YY-Hex6HexNac5Neu5Ac-Est1,Y-Hex6HexNac5Neu5Ac-Est1; 2493.804: YY-Hex6HexNac5Neu5Ac-Est1dHex1,Y-Hex6HexNac5Neu5Ac-Est1dHex1
73	2504.894	H5N5E2	2504.914	0.0202	8.0635	

					358.212: Y-Neu5Gc-Est1-B, Neu5Gc-Est1-B, 388.199: Y-Hex1HexNac1-B, Hex1HexNac1-B, 406.266: YY-Hex1HexNac1, Y-Hex1HexNac1, 504.205: Y-Neu5Gc-Est1dHex1-B, Neu5Gc-Est1dHex1-B, 550.223: Y-Hex2HexNac1-B, Hex2HexNac1-B, 666.239: Y-Hex1Neu5Gc-Est1dHex1-B, Hex1Neu5Gc-Est1dHex1-B, 707.291: ,HexNac1Neu5Gc-Est1dHex1-B, 712.272: Y-Hex3HexNac1-B, Hex3HexNac1-B, 723.272: Y-Hex1HexNac1Neu5Gc-Est1-B, Hex1HexNac1Neu5Gc-Est1-B, 764.249: Y-HexNac2Neu5Gc-Est1-B, HexNac2Neu5Gc-Est1-B, 874.268: Y-Hex4HexNac1-B, Hex4HexNac1-B, 885.331: Y-Hex2HexNac1Neu5Gc-Est1-B, Hex2HexNac1Neu5Gc-Est1-B, 915.302: Y-Hex3HexNac2-B, Hex3HexNac2-B, 933.417: YY-Hex3HexNac2, Y-Hex3HexNac2, 1031.443: Y-Hex2HexNac1Neu5Gc-Est1dHex1-B, Hex2HexNac1Neu5Gc-Est1dHex1-B, 1047.57: Y-Hex3HexNac1Neu5Gc-Est1-B, Hex3HexNac1Neu5Gc-Est1-B, 1077.43: Y-Hex4HexNac2-B, Hex4HexNac2-B, 1080.345: YY-Hex3HexNac2dHex1, Y-Hex3HexNac2dHex1, 1239.43: Y-Hex5HexNac2-B, Hex5HexNac2-B, 1250.434: Y-Hex3HexNac2Neu5Gc-Est1-B, Hex3HexNac2Neu5Gc-Est1-B, 1282.476: YY-Hex3HexNac3dHex1, Y-Hex3HexNac3dHex1, 1298.44: YY-Hex4HexNac3, Y-Hex4HexNac3, 1412.539: Y-Hex4HexNac2Neu5Gc-Est1-B, Hex4HexNac2Neu5Gc-Est1-B, 1442.509: Y-Hex5HexNac3-B, Hex5HexNac3-B, 1444.525: YY-Hex4HexNac3dHex1, Y-Hex4HexNac3dHex1, 1574.574: Y-Hex5HexNac2Neu5Gc-Est1-B, Hex5HexNac2Neu5Gc-Est1-B, 1617.642: YY-Hex3HexNac3Neu5Gc-Est1dHex1, Y-Hex3HexNac3Neu5Gc-Est1dHex1, 1647.578: YY-Hex4HexNac4dHex1, Y-Hex4HexNac4dHex1, 1663.606: YY-Hex5HexNac4, Y-Hex5HexNac4, 1779.697: YY-Hex4HexNac3Neu5Gc-Est1dHex1, Y-Hex4HexNac3Neu5Gc-Est1dHex1, 1791.717: Y-Hex5HexNac4dHex1-B, Hex5HexNac4dHex1-B, 1806.671: Y-Hex6HexNac4-B, Hex6HexNac4-B, 1809.667: YY-Hex5HexNac4dHex1, Y-Hex5HexNac4dHex1, 1820.645: YY-Hex3HexNac4Neu5Gc-Est1dHex1, Y-Hex3HexNac4Neu5Gc-Est1dHex1, 1836.931: YY-Hex4HexNac4Neu5Gc-Est1, Y-Hex4HexNac4Neu5Gc-Est1, 1939.715: Y-Hex6HexNac3Neu5Gc-Est1-B, Hex6HexNac3Neu5Gc-Est1-B, 1982.761: YY-Hex4HexNac4Neu5Gc-Est1dHex1, Y-Hex4HexNac4Neu5Gc-Est1dHex1, 1998.827: YY-Hex5HexNac4Neu5Gc-Est1, Y-Hex5HexNac4Neu5Gc-Est1, 2012.812: YY-Hex5HexNac5dHex1, Y-Hex5HexNac5dHex1, 2142.818: Y-Hex6HexNac4Neu5Gc-Est1-B, Hex6HexNac4Neu5Gc-Est1-B, 2144.829: YY-Hex5HexNac4Neu5Gc-Est1dHex1, Y-Hex5HexNac4Neu5Gc-Est1dHex1, 2156.868: Y-Hex6HexNac5dHex1-B, Hex6HexNac5dHex1-B, 2160.851: YY-Hex6HexNac4Neu5Gc-Est1, Y-Hex6HexNac4Neu5Gc-Est1, 2174.863: YY-Hex6HexNac5dHex1, Y-Hex6HexNac5dHex1, 2184.815: YY-Hex4HexNac5Neu5Gc-Est1dHex1, Y-Hex4HexNac5Neu5Gc-Est1dHex1, 2201.841: YY-Hex5HexNac5Neu5Gc-Est1, Y-Hex5HexNac5Neu5Gc-Est1, 2347.898: YY-Hex5HexNac5Neu5Gc-Est1dHex1, Y-Hex5HexNac5Neu5Gc-Est1dHex1, 2363.893: YY-Hex6HexNac5Neu5Gc-Est1, Y-Hex6HexNac5Neu5Gc-Est1, 2509.812: YY-Hex6HexNac5Neu5Gc-Est1dHex1, Y-Hex6HexNac5Neu5Gc-Est1dHex1
74	2509.894	H6N5F1Ge1	2509.893	-0.0009	-0.3472
75	2520.906	H5N5E1Ge1	2520.909	0.0031	1.2349
76	2534.905	H5N6F1E1	2534.925	0.0198	7.7963
					347.218: Y-Hex2-B, Hex2-B, 429.181: Y-HexNac2-B, HexNac2-B, 545.206: Y-HexNac1Neu5Ac-Est1-B, HexNac1Neu5Ac-Est1-B, 707.293: Y-Hex1HexNac1Neu5Ac-Est1-B, Hex1HexNac1Neu5Ac-Est1-B, 712.354: Y-Hex3HexNac1-B, Hex3HexNac1-B, 748.214: Y-HexNac2Neu5Ac-Est1-B, HexNac2Neu5Ac-Est1-B, 915.334: Y-Hex3HexNac2-B, Hex3HexNac2-B, 933.269: YY-Hex3HexNac2, Y-Hex3HexNac2, 1077.431: Y-Hex4HexNac2-B, Hex4HexNac2-B, 1484.504: Y-Hex4HexNac4-B, Hex4HexNac4-B, 1502.513: YY-Hex4HexNac4, Y-Hex4HexNac4, 1779.694: YY-Hex5HexNac3Neu5Ac-Est1, Y-Hex5HexNac3Neu5Ac-Est1, 2144.904: YY-Hex6HexNac4Neu5Ac-Est1, Y-Hex6HexNac4Neu5Ac-Est1, 2184.828: YY-Hex5HexNac5Neu5Ac-Est1, Y-Hex5HexNac5Neu5Ac-Est1, 2347.964: YY-Hex6HexNac5Neu5Ac-Est1, Y-Hex6HexNac5Neu5Ac-Est1, 2388.908: YY-Hex5HexNac6Neu5Ac-Est1, Y-Hex5HexNac6Neu5Ac-Est1, 2550.827: YY-Hex6HexNac6Neu5Ac-Est1, Y-Hex6HexNac6Neu5Ac-Est1
77	2550.919	H6N6E1	2550.920	0.0007	0.2656
78	2574.914	H5N4E2L1	2574.920	0.0057	2.2050
79	2590.903	H6N5L1G1	2590.878	-0.0248	-9.5694
80	2620.969	H6N5E1L1	2620.925	-0.0438	-16.7281
81	2650.993	H5N5F1E2	2650.972	-0.0209	-7.8812
					168.198: Y-dHex1-B, dHex1-B; 186.209: YY-dHex1, Y-dHex1; 388.215: Y-Hex1HexNac1-B, Hex1HexNac1-B; 683.327: YY-Hex2Neu5Ac-Est1, Y-Hex2Neu5Ac-Est1; 708.272: YY-HexNac1Neu5Ac-Est1dHex1, Y-

						HexNac1Neu5Ac-Est1dHex1; 1444.476: YY-Hex4HexNac3dHex1,Y-Hex4HexNac3dHex1; 1809.6: YY-Hex5HexNac4dHex1,Y-Hex5HexNac4dHex1; 2128.873: YY-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1dHex1,Y-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1dHex1; 2169.878: YY-Hex4HexNac5Neu5Ac-Est1dHex1,Y-Hex4HexNac5Neu5Ac-Est1dHex1; 2185.792: YY-Hex5HexNac5Neu5Ac-Est1,Y-Hex5HexNac5Neu5Ac-Est1; 2285.94: YY-Hex4HexNac4Neu5Ac-Est2dHex1,Y-Hex4HexNac4Neu5Ac-Est2dHex1; 2301.945: YY-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est2,Y-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est2; 2331.898: YY-Hex5HexNac5Neu5Ac-Est1dHex1,Y-Hex5HexNac5Neu5Ac-Est1dHex1
82	2666.964	H5N5F1E1Ge1	2666.967	0.0030	1.1330	
83	2682.959	H6N5E1Ge1	2682.962	0.0029	1.0945	
84	2696.971	H6N6F1E1	2696.978	0.0066	2.4422	
85	2712.976	H7N6E1	2712.973	-0.0035	-1.2897	
86	2813.021	H6N5F1E2	2813.025	0.0039	1.3973	
87	2817.999	H8N5F1E1	2818.004	0.0049	1.7249	
88	2829.014	H6N5F1E1Ge1	2829.020	0.0058	2.0662	
89	2845.014	H7N5E1Ge1	2845.015	0.0008	0.2671	
90	2859.029	H7N6F1E1	2859.030	0.0014	0.4931	388.156: Y-Hex1HexNac1-B,Hex1HexNac1-B, 707.237: Y-Hex1HexNac1Neu5Ac-Est1-B,Hex1HexNac1Neu5Ac-Est1-B, 1077.36: Y-Hex4HexNac2-B,Hex4HexNac2-B, 1239.445: Y-Hex5HexNac2-B,Hex5HexNac2-B, 1442.433: Y-Hex5HexNac3-B,Hex5HexNac3-B, 1506.293: Y-Hex7HexNac1dHex1-B,Hex7HexNac1dHex1-B, 1604.423: Y-Hex6HexNac3-B,Hex6HexNac3-B, 1647.499: YY-Hex4HexNac4dHex1,Y-Hex4HexNac4dHex1, 1807.565: Y-Hex6HexNac4-B,Hex6HexNac4-B, 1809.58: YY-Hex5HexNac4dHex1,Y-Hex5HexNac4dHex1, 1868.599: Y-Hex1HexNac6Neu5Ac-Est1dHex1-B,Hex1HexNac6Neu5Ac-Est1dHex1-B, 2128.843: YY-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1dHex1,Y-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1dHex1, 2144.816: YY-Hex6HexNac4Neu5Ac-Est1,Y-Hex6HexNac4Neu5Ac-Est1, 2174.787: YY-Hex6HexNac5dHex1,Y-Hex6HexNac5dHex1, 2288.824: Y-Hex7HexNac4Neu5Ac-Est1-B,Hex7HexNac4Neu5Ac-Est1-B, 2347.961: YY-Hex6HexNac5Neu5Ac-Est1,Y-Hex6HexNac5Neu5Ac-Est1, 2377.947: YY-Hex6HexNac6dHex1,Y-Hex6HexNac6dHex1, 2491.965: Y-Hex7HexNac5Neu5Ac-Est1-B,Hex7HexNac5Neu5Ac-Est1-B, 2509.98: YY-Hex7HexNac5Neu5Ac-Est1,Y-Hex7HexNac5Neu5Ac-Est1, 2539.985: YY-Hex7HexNac6dHex1,Y-Hex7HexNac6dHex1, 2697.052: YY-Hex6HexNac6Neu5Ac-Est1dHex1,Y-Hex6HexNac6Neu5Ac-Est1dHex1, 2713.078: YY-Hex7HexNac6Neu5Ac-Est1,Y-Hex7HexNac6Neu5Ac-Est1, 2859.032: YY-Hex7HexNac6Neu5Ac-Est1dHex1,Y-Hex7HexNac6Neu5Ac-Est1dHex1
91	2875.024	H7N6F1Ge1	2875.025	0.0013	0.4607	358.125: Y-Neu5Gc-Est1-B,Neu5Gc-Est1-B, 388.175: Y-Hex1HexNac1-B,Hex1HexNac1-B, 520.169: Y-Hex1Neu5Gc-Est1-B,Hex1Neu5Gc-Est1-B, 707.302: ,HexNac1Neu5Gc-Est1dHex1-B, 712.28: Y-Hex3HexNac1-B,Hex3HexNac1-B, 723.24: Y-Hex1HexNac1Neu5Gc-Est1-B,Hex1HexNac1Neu5Gc-Est1-B, 1077.377: Y-Hex4HexNac2-B,Hex4HexNac2-B, 1239.39: Y-Hex5HexNac2-B,Hex5HexNac2-B, 1250.436: Y-Hex3HexNac2Neu5Gc-Est1-B,Hex3HexNac2Neu5Gc-Est1-B, 1282.402: YY-Hex3HexNac3dHex1,Y-Hex3HexNac3dHex1, 1442.448: Y-Hex5HexNac3-B,Hex5HexNac3-B, 1507.479: Y-Hex7HexNac1dHex1-B,Hex7HexNac1dHex1-B, 1605.527: Y-Hex6HexNac3-B,Hex6HexNac3-B, 1647.575: YY-Hex4HexNac4dHex1,Y-Hex4HexNac4dHex1, 1809.609: YY-Hex5HexNac4dHex1,Y-Hex5HexNac4dHex1, 1867.511: YY-Hex5HexNac5,Y-Hex5HexNac5, 1939.635: Y-Hex6HexNac3Neu5Gc-Est1-B,Hex6HexNac3Neu5Gc-Est1-B, 2012.694: YY-Hex5HexNac5dHex1,Y-Hex5HexNac5dHex1, 2028.733: YY-Hex6HexNac5,Y-Hex6HexNac5, 2141.75: Y-Hex6HexNac4Neu5Gc-Est1-B,Hex6HexNac4Neu5Gc-Est1-B, 2144.809: YY-Hex5HexNac4Neu5Gc-Est1dHex1,Y-Hex5HexNac4Neu5Gc-Est1dHex1, 2156.767: Y-Hex6HexNac5dHex1-B,Hex6HexNac5dHex1-B, 2171.788: Y-Hex7HexNac5-B,Hex7HexNac5-B, 2174.782: YY-Hex6HexNac5dHex1,Y-Hex6HexNac5dHex1, 2202.616: YY-Hex5HexNac5Neu5Gc-Est1,Y-Hex5HexNac5Neu5Gc-Est1, 2304.849: Y-Hex7HexNac4Neu5Gc-Est1-B,Hex7HexNac4Neu5Gc-Est1-B, 2347.922: YY-Hex5HexNac5Neu5Gc-Est1dHex1,Y-Hex5HexNac5Neu5Gc-Est1dHex1, 2363.907: YY-Hex6HexNac5Neu5Gc-Est1,Y-Hex6HexNac5Neu5Gc-Est1, 2377.911: YY-Hex6HexNac6dHex1,Y-Hex6HexNac6dHex1, 2507.952: Y-Hex7HexNac5Neu5Gc-Est1-B,Hex7HexNac5Neu5Gc-Est1-B, 2509.955: YY-Hex6HexNac5Neu5Gc-Est1dHex1,Y-Hex6HexNac5Neu5Gc-Est1dHex1, 2525.985: YY-

						Hex7HexNAc5Neu5Gc-Est1,Y-Hex7HexNAc5Neu5Gc-Est1, 2539.98: YY-Hex7HexNAc6dHex1,Y-Hex7HexNAc6dHex1, 2713.05: YY-Hex6HexNAc6Neu5Gc-Est1dHex1,Y-Hex6HexNAc6Neu5Gc-Est1dHex1, 2729.056: YY-Hex7HexNAc6Neu5Gc-Est1,Y-Hex7HexNAc6Neu5Gc-Est1, 2875.047: YY-Hex7HexNAc6Neu5Gc-Est1dHex1,Y-Hex7HexNAc6Neu5Gc-Est1dHex1
92	2900.063	H6N7F1E1	2900.057	-0.0060	-2.0831	
93	2916.051	H7N7E1	2916.052	0.0009	0.2996	
94	3148.123	H6N5F1E2Ge1	3148.147	0.0236	7.4843	
95	3164.136	H6N5F1E1Ge2	3164.141	0.0055	1.7308	
96	3180.145	H7N5E1Ge2	3180.136	-0.0086	-2.7071	
97	3194.152	H7N6F1E1Ge1	3194.152	0.0000	0.0129	
						358.125: Y-Neu5Gc-Est1-B,Neu5Gc-Est1-B, 388.175: Y-Hex1HexNAc1-B,Hex1HexNAc1-B, 520.169: Y-Hex1Neu5Gc-Est1-B,Hex1Neu5Gc-Est1-B,HexNAc1Neu5Gc-Est1dHex1-B, 712.28: Y-Hex3HexNAc1-B,Hex3HexNAc1-B, 723.24: Y-Hex1HexNAc1Neu5Gc-Est1-B,Hex1HexNAc1Neu5Gc-Est1-B, 1077.377: Y-Hex4HexNAc2-B,Hex4HexNAc2-B, 1239.39: YY-Hex2HexNAc1Neu5Gc-Est2,Y-Hex2HexNAc1Neu5Gc-Est2,Y-Hex5HexNAc2-B,Hex5HexNAc2-B, 1250.436: Y-Hex3HexNAc2Neu5Gc-Est1-B,Hex3HexNAc2Neu5Gc-Est1-B, 1282.402: YY-Hex3HexNAc3dHex1,Y-Hex3HexNAc3dHex1, 1442.448: YY-Hex2HexNAc2Neu5Gc-Est2,Y-Hex2HexNAc2Neu5Gc-Est2,Y-Hex5HexNAc3-B,Hex5HexNAc3-B, 1507.479: Y-Hex7HexNAc1dHex1-B,Hex7HexNAc1dHex1-B, 1605.527: Y-Hex6HexNAc3-B,Hex6HexNAc3-B, 1647.575: YY-Hex4HexNAc4dHex1,Y-Hex4HexNAc4dHex1, 1809.609: YY-Hex5HexNAc4dHex1,Y-Hex5HexNAc4dHex1, 1867.511: YY-Hex5HexNAc5,Y-Hex5HexNAc5, 1870.163: YY-Hex5HexNAc1Neu5Gc-Est2dHex1,Y-Hex5HexNAc1Neu5Gc-Est2dHex1,Y-Hex1HexNAc5Neu5Gc-Est2-B,Hex1HexNAc5Neu5Gc-Est2-B, 1933.972: Y-Hex3HexNAc3Neu5Gc-Est2dHex1-B,Hex3HexNAc3Neu5Gc-Est2dHex1-B, 1939.635: Y-Hex6HexNAc3Neu5Gc-Est1-B,Hex6HexNAc3Neu5Gc-Est1-B, 2012.694: YY-Hex5HexNAc5dHex1,Y-Hex5HexNAc5dHex1, 2028.733: YY-Hex6HexNAc5,Y-Hex6HexNAc5, 2141.75: Y-Hex6HexNAc4Neu5Gc-Est1-B,Hex6HexNAc4Neu5Gc-Est1-B, 2144.809: YY-Hex5HexNAc4Neu5Gc-Est1dHex1,Y-Hex5HexNAc4Neu5Gc-Est1dHex1, 2156.767: YY-Hex3HexNAc4Neu5Gc-Est2dHex1,Y-Hex3HexNAc4Neu5Gc-Est2dHex1,Y-Hex6HexNAc5dHex1-B,Hex6HexNAc5dHex1-B, 2171.788: YY-Hex4HexNAc4Neu5Gc-Est2,Y-Hex4HexNAc4Neu5Gc-Est2,Y-Hex7HexNAc5-B,Hex7HexNAc5-B, 2174.782: YY-Hex6HexNAc5dHex1,Y-Hex6HexNAc5dHex1, 2202.616: YY-Hex5HexNAc5Neu5Gc-Est1,Y-Hex5HexNAc5Neu5Gc-Est1, 2304.849: Y-Hex7HexNAc4Neu5Gc-Est1-B,Hex7HexNAc4Neu5Gc-Est1-B, 2347.922: YY-Hex5HexNAc5Neu5Gc-Est1dHex1,Y-Hex5HexNAc5Neu5Gc-Est1dHex1, 2363.907: YY-Hex6HexNAc5Neu5Gc-Est1,Y-Hex6HexNAc5Neu5Gc-Est1, 2377.911: YY-Hex6HexNAc6dHex1,Y-Hex6HexNAc6dHex1, 2478.999: YY-Hex5HexNAc4Neu5Gc-Est2dHex1,Y-Hex5HexNAc4Neu5Gc-Est2dHex1, 2507.952: Y-Hex7HexNAc5Neu5Gc-Est1-B,Hex7HexNAc5Neu5Gc-Est1-B, 2509.955: YY-Hex6HexNAc5Neu5Gc-Est1dHex1,Y-Hex6HexNAc5Neu5Gc-Est1dHex1, 2525.985: YY-Hex7HexNAc5Neu5Gc-Est1,Y-Hex7HexNAc5Neu5Gc-Est1, 2539.98: YY-Hex7HexNAc6dHex1,Y-Hex7HexNAc6dHex1, 2713.05: YY-Hex6HexNAc6Neu5Gc-Est1dHex1,Y-Hex6HexNAc6Neu5Gc-Est1dHex1, 2729.056: YY-Hex7HexNAc6Neu5Gc-Est1,Y-Hex7HexNAc6Neu5Gc-Est1, 2875.047: YY-Hex7HexNAc6Neu5Gc-Est1dHex1,Y-Hex7HexNAc6Neu5Gc-Est1dHex1
98	3210.147	H7N6F1Ge2	3210.147	0.0000	-0.0138	
99	3251.242	H7N7E1Ge1	3251.174	-0.0685	-21.0678	

Tablo Ek5. Eşek sütü whey glikoproteinlerinden tespit edilen *N*-glikanların listesi. MS/MS'i gerçekleştirilen glikanlara ait sadece B ve Y iyonlarının eşleşmeleri tabloya ilave edilmiştir. *. Selbest süt oligosakkarit profili ile aynı m/z 'ye sahip potansiyel *N*-glikanlar.Koyu işaretliler iç kalibrasyon piklerini temsil etmektedir.

	Detected		Calculated			
	m/z	composition	mass (Da)	error (Da)	error (ppm)	MS/MS Peaks

						204.043: YY-Hex1,Y-Hex1, 365.086: YY-Hex2,Y-Hex2, 388.094: Y-Hex1HexNAc1-B,Hex1HexNAc1-B, 406.108: YY-Hex1HexNAc1,Y-Hex1HexNAc1, 448.155: YY-HexNAc2,Y-HexNAc2, 509.118: Y-Hex3-B,Hex3-B, 527.084: YY-Hex3,Y-Hex3, 550.14: Y-Hex2HexNAc1-B,Hex2HexNAc1-B, 568.112: YY-Hex2HexNAc1,Y-Hex2HexNAc1, 671.138: Y-Hex4-B,Hex4-B, 712.152: Y-Hex3HexNAc1-B,Hex3HexNAc1-B, 730.153: YY-Hex3HexNAc1,Y-Hex3HexNAc1, 753.114: Y-Hex2HexNAc2-B,Hex2HexNAc2-B, 772.137: YY-Hex2HexNAc2,Y-Hex2HexNAc2, 874.157: Y-Hex4HexNAc1-B,Hex4HexNAc1-B, 892.076: YY-Hex4HexNAc1,Y-Hex4HexNAc1, 915.07: Y-Hex3HexNAc2-B,Hex3HexNAc2-B, 933.084: YY-Hex3HexNAc2,Y-Hex3HexNAc2, 1095.269: YY-Hex4HexNAc2,Y-Hex4HexNAc2
1	1095.370	H4N2	1095.370	-0.0002	-0.1606	
2	1136.399	H3N3	1136.396	-0.0026	-2.3115	
						347.079: Y-Hex2-B,Hex2-B; 388.127: Y-Hex1HexNAc1-B,Hex1HexNAc1-B; 447.155: YY-HexNAc2,Y-HexNAc2; 550.173: Y-Hex2HexNAc1-B,Hex2HexNAc1-B; 568.211: YY-Hex2HexNAc1,Y-Hex2HexNAc1; 671.213: Y-Hex4-B,Hex4-B; 712.172: Y-Hex3HexNAc1-B,Hex3HexNAc1-B; 731.188: YY-Hex3HexNAc1,Y-Hex3HexNAc1; 771.265: YY-Hex2HexNAc2,Y-Hex2HexNAc2; 833.216: Y-Hex5-B,Hex5-B; 851.218: YY-Hex5,Y-Hex5; 874.255: Y-Hex4HexNAc1-B,Hex4HexNAc1-B; 893.208: YY-Hex4HexNAc1,Y-Hex4HexNAc1; 915.119: Y-Hex3HexNAc2-B,Hex3HexNAc2-B; 934.277: YY-Hex3HexNAc2,Y-Hex3HexNAc2; 1036.283: Y-Hex5HexNAc1-B,Hex5HexNAc1-B; 1054.191: YY-Hex5HexNAc1,Y-Hex5HexNAc1; 1077.938: Y-Hex4HexNAc2-B,Hex4HexNAc2-B; 1095.142: YY-Hex4HexNAc2,Y-Hex4HexNAc2; 1258.394: YY-Hex5HexNAc2,Y-Hex5HexNAc2
3	1257.423	H5N2	1257.423	-0.0004	-0.2803	
4	1282.455	H3N3F1	1282.454	-0.0007	-0.5599	
						226.085: Y-HexNAc1-B,HexNAc1-B, 366.079: YY-Hex2,Y-Hex2, 388.107: Y-Hex1HexNAc1-B,Hex1HexNAc1-B, 406.166: YY-Hex1HexNAc1,Y-Hex1HexNAc1, 448.098: YY-HexNAc2,Y-HexNAc2, 509.129: Y-Hex3-B,Hex3-B, 550.153: Y-Hex2HexNAc1-B,Hex2HexNAc1-B, 569.129: YY-Hex2HexNAc1,Y-Hex2HexNAc1, 610.147: YY-Hex1HexNAc2,Y-Hex1HexNAc2, 651.163: YY-HexNAc3,Y-HexNAc3, 712.201: Y-Hex3HexNAc1-B,Hex3HexNAc1-B, 730.216: YY-Hex3HexNAc1,Y-Hex3HexNAc1, 771.212: YY-Hex2HexNAc2,Y-Hex2HexNAc2, 875.214: Y-Hex4HexNAc1-B,Hex4HexNAc1-B, 915.283: Y-Hex3HexNAc2-B,Hex3HexNAc2-B, 933.246: YY-Hex3HexNAc2,Y-Hex3HexNAc2, 975.242: YY-Hex2HexNAc3,Y-Hex2HexNAc3, 1077.285: Y-Hex4HexNAc2-B,Hex4HexNAc2-B, 1095.927: YY-Hex4HexNAc2,Y-Hex4HexNAc2, 1118.924: Y-Hex3HexNAc3-B,Hex3HexNAc3-B, 1135.964: YY-Hex3HexNAc3,Y-Hex3HexNAc3, 1298.362: YY-Hex4HexNAc3,Y-Hex4HexNAc3
5	1298.452	H4N3	1298.449	-0.0028	-2.1590	
						204.015: YY-Hex1,Y-Hex1, 226.052: Y-HexNAc1-B,HexNAc1-B, 244.054: YY-HexNAc1,Y-HexNAc1, 366.097: YY-Hex2,Y-Hex2, 388.105: Y-Hex1HexNAc1-B,Hex1HexNAc1-B, 406.164: YY-Hex1HexNAc1,Y-Hex1HexNAc1, 429.152: Y-HexNAc2-B,HexNAc2-B, 447.141: YY-HexNAc2,Y-HexNAc2, 509.14: Y-Hex3-B,Hex3-B, 550.151: Y-Hex2HexNAc1-B,Hex2HexNAc1-B, 568.144: YY-Hex2HexNAc1,Y-Hex2HexNAc1, 712.196: Y-Hex3HexNAc1-B,Hex3HexNAc1-B, 753.207: Y-Hex2HexNAc2-B,Hex2HexNAc2-B, 772.203: YY-Hex2HexNAc2,Y-Hex2HexNAc2, 915.253: Y-Hex3HexNAc2-B,Hex3HexNAc2-B, 933.255: YY-Hex3HexNAc2,Y-Hex3HexNAc2, 975.252: YY-Hex2HexNAc3,Y-Hex2HexNAc3, 1118.312: Y-Hex3HexNAc3-B,Hex3HexNAc3-B, 1136.325: YY-Hex3HexNAc3,Y-Hex3HexNAc3, 1158.851: Y-Hex2HexNAc4-B,Hex2HexNAc4-B, 1176.833: YY-Hex2HexNAc4,Y-Hex2HexNAc4, 1339.438: YY-Hex3HexNAc4,Y-Hex3HexNAc4
6	1339.476	H3N4	1339.476	-0.0003	-0.1898	
						347.1: Y-Hex2-B,Hex2-B; 366.089: YY-Hex2,Y-Hex2; 388.117: Y-Hex1HexNAc1-B,Hex1HexNAc1-B; 509.161: Y-Hex3-B,Hex3-B; 528.149: YY-Hex3,Y-Hex3; 550.137: Y-Hex2HexNAc1-B,Hex2HexNAc1-B; 671.162: Y-Hex4-B,Hex4-B; 712.18: Y-Hex3HexNAc1-B,Hex3HexNAc1-B; 730.201: YY-Hex3HexNAc1,Y-Hex3HexNAc1; 833.213: Y-Hex5-B,Hex5-B; 874.252: Y-Hex4HexNAc1-B,Hex4HexNAc1-B; 892.268: YY-Hex4HexNAc1,Y-Hex4HexNAc1; 915.252: Y-Hex3HexNAc2-B,Hex3HexNAc2-B; 933.272: YY-Hex3HexNAc2,Y-Hex3HexNAc2; 995.24: Y-Hex6-B,Hex6-B; 1035.356: Y-Hex5HexNAc1-B,Hex5HexNAc1-B; 1077.29: Y-Hex4HexNAc2-B,Hex4HexNAc2-B; 1096.305: YY-Hex4HexNAc2,Y-Hex4HexNAc2; 1198.329: Y-Hex6HexNAc1-B,Hex6HexNAc1-B; 1216.2: YY-Hex6HexNAc1,Y-Hex6HexNAc1; 1238.946: Y-Hex5HexNAc2-B,Hex5HexNAc2-B; 1257.963: YY-Hex5HexNAc2,Y-Hex5HexNAc2; 1419.438: YY-Hex6HexNAc2,Y-Hex6HexNAc2
7	1419.475	H6N2	1419.475	0.0005	0.3318	
8	1444.510	H4N3F1	1444.507	-0.0029	-2.0039	
9	1460.501	H5N3	1460.502	0.0010	0.6984	

10	1485.534	H3N4F1	1485.534	-0.0003	-0.2326	226.068: Y-HexNac1-B,HexNac1-B; 244.045: YY-HexNac1,Y-HexNac1; 406.127: YY-Hex1HexNac1,Y-Hex1HexNac1; 447.187: YY-HexNac2,Y-HexNac2; 509.142: Y-Hex3-B,Hex3-B; 534.181: Y-Hex1HexNac1dHex1-B,Hex1HexNac1dHex1-B; 550.18: Y-Hex2HexNac1-B,Hex2HexNac1-B; 594.163: YY-HexNac2dHex1,Y-HexNac2dHex1; 713.181: Y-Hex3HexNac1-B,Hex3HexNac1-B; 730.258: YY-Hex3HexNac1,Y-Hex3HexNac1; 753.185: Y-Hex2HexNac2-B,Hex2HexNac2-B; 915.22: Y-Hex3HexNac2-B,Hex3HexNac2-B; 933.258: YY-Hex3HexNac2,Y-Hex3HexNac2; 1118.295: Y-Hex3HexNac3-B,Hex3HexNac3-B; 1136.303: YY-Hex3HexNac3,Y-Hex3HexNac3; 1178.325: YY-Hex2HexNac4,Y-Hex2HexNac4; 1264.204: Y-Hex3HexNac3dHex1-B,Hex3HexNac3dHex1-B; 1282.35: YY-Hex3HexNac3dHex1,Y-Hex3HexNac3dHex1; 1320.908: Y-Hex3HexNac4-B,Hex3HexNac4-B; 1339.385: YY-Hex3HexNac4,Y-Hex3HexNac4; 1485.493: YY-Hex3HexNac4dHex1,Y-Hex3HexNac4dHex1
11	1501.524	H4N4	1501.529	0.0046	3.0430	185.069: Y-Hex1-B,Hex1-B; 226.106: Y-HexNac1-B,HexNac1-B; 366.085: YY-Hex2,Y-Hex2; 406.143: YY-Hex1HexNac1,Y-Hex1HexNac1; 447.124: YY-HexNac2,Y-HexNac2; 509.136: Y-Hex3-B,Hex3-B; 528.116: YY-Hex3,Y-Hex3; 550.154: Y-Hex2HexNac1-B,Hex2HexNac1-B; 712.176: Y-Hex3HexNac1-B,Hex3HexNac1-B; 772.157: YY-Hex2HexNac2,Y-Hex2HexNac2; 915.226: Y-Hex3HexNac2-B,Hex3HexNac2-B; 934.227: YY-Hex3HexNac2,Y-Hex3HexNac2; 974.256: YY-Hex2HexNac3,Y-Hex2HexNac3; 1077.273: Y-Hex4HexNac2-B,Hex4HexNac2-B; 1095.345: YY-Hex4HexNac2,Y-Hex4HexNac2; 1118.323: Y-Hex3HexNac3-B,Hex3HexNac3-B; 1136.324: YY-Hex3HexNac3,Y-Hex3HexNac3; 1280.364: Y-Hex4HexNac3-B,Hex4HexNac3-B; 1298.378: YY-Hex4HexNac3,Y-Hex4HexNac3; 1320.896: Y-Hex3HexNac4-B,Hex3HexNac4-B; 1339.344: YY-Hex3HexNac4,Y-Hex3HexNac4; 1483.512: Y-Hex4HexNac4-B,Hex4HexNac4-B; 1501.49: YY-Hex4HexNac4,Y-Hex4HexNac4
12	1581.529	H7N2	1581.528	-0.0007	-0.4462	204.028: YY-Hex1,Y-Hex1; 226.063: Y-HexNac1-B,HexNac1-B; 347.119: Y-Hex2-B,Hex2-B; 388.119: Y-Hex1HexNac1-B,Hex1HexNac1-B; 429.105: Y-HexNac2-B,HexNac2-B; 448.116: YY-HexNac2,Y-HexNac2; 509.139: Y-Hex3-B,Hex3-B; 528.107: YY-Hex3,Y-Hex3; 550.154: Y-Hex2HexNac1-B,Hex2HexNac1-B; 671.141: Y-Hex4-B,Hex4-B; 712.186: Y-Hex3HexNac1-B,Hex3HexNac1-B; 772.199: YY-Hex2HexNac2,Y-Hex2HexNac2; 833.168: Y-Hex5-B,Hex5-B; 875.212: Y-Hex4HexNac1-B,Hex4HexNac1-B; 934.23: YY-Hex3HexNac2,Y-Hex3HexNac2; 995.223: Y-Hex6-B,Hex6-B; 1013.189: YY-Hex6,Y-Hex6; 1036.252: Y-Hex5HexNac1-B,Hex5HexNac1-B; 1077.289: Y-Hex4HexNac2-B,Hex4HexNac2-B; 1095.261: YY-Hex4HexNac2,Y-Hex4HexNac2; 1157.264: Y-Hex7-B,Hex7-B; 1175.261: YY-Hex7,Y-Hex7; 1216.23: YY-Hex6HexNac1,Y-Hex6HexNac1; 1239.345: Y-Hex5HexNac2-B,Hex5HexNac2-B; 1257.338: YY-Hex5HexNac2,Y-Hex5HexNac2; 1360.355: Y-Hex7HexNac1-B,Hex7HexNac1-B; 1378.813: YY-Hex7HexNac1,Y-Hex7HexNac1; 1400.755: Y-Hex6HexNac2-B,Hex6HexNac2-B; 1419.459: YY-Hex6HexNac2,Y-Hex6HexNac2; 1563.437: Y-Hex7HexNac2-B,Hex7HexNac2-B; 1581.475: YY-Hex7HexNac2,Y-Hex7HexNac2
13	1606.560	H5N3F1	1606.560	-0.0001	-0.0443	
14	1617.588	H4N3E1	1617.576	-0.0121	-7.4721	
15	1622.565	H6N3	1622.555	-0.0102	-6.2596	
16	1647.588	H4N4F1	1647.586	-0.0015	-0.9238	331.142: Y-Hex1dHex1-B,Hex1dHex1-B; 429.051: Y-HexNac2-B,HexNac2-B; 448.15: YY-HexNac2,Y-HexNac2; 509.142: Y-Hex3-B,Hex3-B; 550.164: Y-Hex2HexNac1-B,Hex2HexNac1-B; 568.113: YY-Hex2HexNac1,Y-Hex2HexNac1; 712.169: Y-Hex3HexNac1-B,Hex3HexNac1-B; 753.075: Y-Hex2HexNac2-B,Hex2HexNac2-B; 874.168: Y-Hex4HexNac1-B,Hex4HexNac1-B; 915.203: Y-Hex3HexNac2-B,Hex3HexNac2-B; 933.235: YY-Hex3HexNac2,Y-Hex3HexNac2; 1077.251: Y-Hex4HexNac2-B,Hex4HexNac2-B; 1079.278: YY-Hex3HexNac2dHex1,Y-Hex3HexNac2dHex1; 1095.214: YY-Hex4HexNac2,Y-Hex4HexNac2; 1118.295: Y-Hex3HexNac3-B,Hex3HexNac3-B; 1120.277: YY-Hex2HexNac3dHex1,Y-Hex2HexNac3dHex1; 1280.338: Y-Hex4HexNac3-B,Hex4HexNac3-B; 1283.327: YY-Hex3HexNac3dHex1,Y-Hex3HexNac3dHex1; 1298.339: YY-Hex4HexNac3,Y-Hex4HexNac3; 1445.379: YY-Hex4HexNac3dHex1,Y-Hex4HexNac3dHex1; 1483.468: Y-Hex4HexNac4-B,Hex4HexNac4-B; 1485.554: YY-Hex3HexNac4dHex1,Y-Hex3HexNac4dHex1; 1501.435: YY-Hex4HexNac4,Y-Hex4HexNac4; 1647.492: YY-Hex4HexNac4dHex1,Y-Hex4HexNac4dHex1
17	1663.582	H5N4	1663.581	-0.0006	-0.3651	185.014: Y-Hex1-B,Hex1-B; 226.105: Y-HexNac1-B,HexNac1-B; 244.072: YY-HexNac1,Y-HexNac1; 347.099: Y-Hex2-B,Hex2-B; 366.101: YY-Hex2,Y-Hex2; 388.122: Y-Hex1HexNac1-B,Hex1HexNac1-B; 447.131: YY-HexNac2,Y-HexNac2; 509.15: Y-Hex3-B,Hex3-B; 550.159: Y-Hex2HexNac1-B,Hex2HexNac1-B; 568.22: YY-

						Hex2HexNac1,Y-Hex2HexNac1; 712.188: Y-Hex3HexNac1-B,Hex3HexNac1-B; 730.196: YY-Hex3HexNac1,Y-Hex3HexNac1; 753.183: Y-Hex2HexNac2-B,Hex2HexNac2-B; 771.164: YY-Hex2HexNac2,Y-Hex2HexNac2; 832.302: Y-Hex5-B,Hex5-B; 875.154: Y-Hex4HexNac1-B,Hex4HexNac1-B; 916.246: Y-Hex3HexNac2-B,Hex3HexNac2-B; 933.21: YY-Hex3HexNac2,Y-Hex3HexNac2; 975.248: YY-Hex2HexNac3,Y-Hex2HexNac3; 1077.25: Y-Hex4HexNac2-B,Hex4HexNac2-B; 1096.267: YY-Hex4HexNac2,Y-Hex4HexNac2; 1118.358: Y-Hex3HexNac3-B,Hex3HexNac3-B; 1136.282: YY-Hex3HexNac3,Y-Hex3HexNac3; 1239.285: Y-Hex5HexNac2-B,Hex5HexNac2-B; 1280.387: Y-Hex4HexNac3-B,Hex4HexNac3-B; 1298.314: YY-Hex4HexNac3,Y-Hex4HexNac3; 1442.362: Y-Hex5HexNac3-B,Hex5HexNac3-B; 1460.422: YY-Hex5HexNac3,Y-Hex5HexNac3; 1483.781: Y-Hex4HexNac4-B,Hex4HexNac4-B; 1501.436: YY-Hex4HexNac4,Y-Hex4HexNac4; 1663.493: YY-Hex5HexNac4,Y-Hex5HexNac4
18	1704.610	H4N5	1704.608	-0.0021	-1.2075	226.103: Y-HexNac1-B,HexNac1-B; 244.186: YY-HexNac1,Y-HexNac1; 388.097: Y-Hex1HexNac1-B,Hex1HexNac1-B; 447.251: YY-HexNac2,Y-HexNac2; 550.17: Y-Hex2HexNac1-B,Hex2HexNac1-B; 713.207: Y-Hex3HexNac1-B,Hex3HexNac1-B; 915.246: Y-Hex3HexNac2-B,Hex3HexNac2-B; 974.201: YY-Hex2HexNac3,Y-Hex2HexNac3; 1077.261: Y-Hex4HexNac2-B,Hex4HexNac2-B; 1119.28: Y-Hex3HexNac3-B,Hex3HexNac3-B; 1136.303: YY-Hex3HexNac3,Y-Hex3HexNac3; 1178.368: YY-Hex2HexNac4,Y-Hex2HexNac4; 1280.371: Y-Hex4HexNac3-B,Hex4HexNac3-B; 1298.353: YY-Hex4HexNac3,Y-Hex4HexNac3; 1321.379: Y-Hex3HexNac4-B,Hex3HexNac4-B; 1339.388: YY-Hex3HexNac4,Y-Hex3HexNac4; 1483.448: Y-Hex4HexNac4-B,Hex4HexNac4-B; 1501.439: YY-Hex4HexNac4,Y-Hex4HexNac4; 1524.368: Y-Hex3HexNac5-B,Hex3HexNac5-B; 1704.525: YY-Hex4HexNac5,Y-Hex4HexNac5
19	1743.583	H8N2	1743.581	-0.0019	-1.0795	388.091: Y-Hex1HexNac1-B,Hex1HexNac1-B; 550.14: Y-Hex2HexNac1-B,Hex2HexNac1-B; 671.182: Y-Hex4-B,Hex4-B; 689.255: YY-Hex4,Y-Hex4; 712.198: Y-Hex3HexNac1-B,Hex3HexNac1-B; 730.209: YY-Hex3HexNac1,Y-Hex3HexNac1; 833.217: Y-Hex5-B,Hex5-B; 851.191: YY-Hex5,Y-Hex5; 915.257: Y-Hex3HexNac2-B,Hex3HexNac2-B; 933.177: YY-Hex3HexNac2,Y-Hex3HexNac2; 995.242: Y-Hex6-B,Hex6-B; 1036.237: Y-Hex5HexNac1-B,Hex5HexNac1-B; 1077.301: Y-Hex4HexNac2-B,Hex4HexNac2-B; 1096.299: YY-Hex4HexNac2,Y-Hex4HexNac2; 1157.206: Y-Hex7-B,Hex7-B; 1198.247: Y-Hex6HexNac1-B,Hex6HexNac1-B; 1257.354: YY-Hex5HexNac2,Y-Hex5HexNac2; 1319.331: Y-Hex8-B,Hex8-B; 1337.36: YY-Hex8,Y-Hex8; 1361.383: Y-Hex7HexNac1-B,Hex7HexNac1-B; 1378.303: YY-Hex7HexNac1,Y-Hex7HexNac1; 1419.398: YY-Hex6HexNac2,Y-Hex6HexNac2; 1522.405: Y-Hex8HexNac1-B,Hex8HexNac1-B; 1540.46: YY-Hex8HexNac1,Y-Hex8HexNac1; 1581.46: YY-Hex7HexNac2,Y-Hex7HexNac2; 1743.507: YY-Hex8HexNac2,Y-Hex8HexNac2
20	1768.617	H6N3F1	1768.613	-0.0042	-2.4017	
21	1779.631	H5N3E1	1779.629	-0.0023	-1.2718	
22	1809.640	H5N4F1	1809.639	-0.0007	-0.3861	185.033: Y-Hex1-B,Hex1-B; 226.074: Y-HexNac1-B,HexNac1-B; 389.064: Y-Hex1HexNac1-B,Hex1HexNac1-B; 429.107: Y-HexNac2-B,HexNac2-B; 447.196: YY-HexNac2,Y-HexNac2; 509.211: Y-Hex3-B,Hex3-B; 550.149: Y-Hex2HexNac1-B,Hex2HexNac1-B; 568.239: YY-Hex2HexNac1,Y-Hex2HexNac1; 610.204: YY-Hex1HexNac2,Y-Hex1HexNac2; 650.239: YY-HexNac3,Y-HexNac3; 712.202: Y-Hex3HexNac1-B,Hex3HexNac1-B; 772.099: YY-Hex2HexNac2,Y-Hex2HexNac2; 874.234: Y-Hex4HexNac1-B,Hex4HexNac1-B; 915.264: Y-Hex3HexNac2-B,Hex3HexNac2-B; 933.243: YY-Hex3HexNac2,Y-Hex3HexNac2; 975.246: YY-Hex2HexNac3,Y-Hex2HexNac3; 1079.272: YY-Hex3HexNac2dHex1,Y-Hex3HexNac2dHex1; 1095.325: YY-Hex4HexNac2,Y-Hex4HexNac2; 1136.319: YY-Hex3HexNac3,Y-Hex3HexNac3; 1143.403: Y-Hex1HexNac4dHex1-B,Hex1HexNac4dHex1-B; 1239.32: Y-Hex5HexNac2-B,Hex5HexNac2-B; 1257.386: YY-Hex5HexNac2,Y-Hex5HexNac2; 1280.341: Y-Hex4HexNac3-B,Hex4HexNac3-B; 1282.352: YY-Hex3HexNac3dHex1,Y-Hex3HexNac3dHex1; 1298.382: YY-Hex4HexNac3,Y-Hex4HexNac3; 1321.703: Y-Hex3HexNac4-B,Hex3HexNac4-B; 1426.464: Y-Hex4HexNac3dHex1-B,Hex4HexNac3dHex1-B; 1442.404: Y-Hex5HexNac3-B,Hex5HexNac3-B; 1444.399: YY-Hex4HexNac3dHex1,Y-Hex4HexNac3dHex1; 1460.41: YY-Hex5HexNac3,Y-Hex5HexNac3; 1501.437: YY-Hex4HexNac4,Y-Hex4HexNac4; 1630.552: Y-Hex4HexNac4dHex1-B,Hex4HexNac4dHex1-B; 1645.493: Y-Hex5HexNac4-B,Hex5HexNac4-B; 1647.497: YY-Hex4HexNac4dHex1,Y-Hex4HexNac4dHex1; 1663.481: YY-Hex5HexNac4,Y-Hex5HexNac4; 1809.533: YY-Hex5HexNac4dHex1,Y-Hex5HexNac4dHex1
23	1820.658	H4N4E1	1820.655	-0.0027	-1.4908	

24	1825.630	H6N4	1825.634	0.0042	2.3093	
25	1836.650	H4N4Ge1	1836.650	0.0002	0.1091	
26	1850.669	H4N5F1	1850.666	-0.0031	-1.7018	185.047: Y-Hex1-B,Hex1-B; 226.078: Y-HexNac1-B,HexNac1-B; 388.1: Y-Hex1HexNac1-B,Hex1HexNac1-B; 429.179: Y-HexNac2-B,HexNac2-B; 447.089: YY-HexNac2,Y-HexNac2; 550.169: Y-Hex2HexNac1-B,Hex2HexNac1-B; 712.206: Y-Hex3HexNac1-B,Hex3HexNac1-B; 874.245: Y-Hex4HexNac1-B,Hex4HexNac1-B; 915.273: Y-Hex3HexNac2-B,Hex3HexNac2-B; 1077.269: Y-Hex4HexNac2-B,Hex4HexNac2-B; 1119.298: Y-Hex3HexNac3-B,Hex3HexNac3-B; 1137.384: YY-Hex3HexNac3,Y-Hex3HexNac3; 1280.341: Y-Hex4HexNac3-B,Hex4HexNac3-B; 1298.417: YY-Hex4HexNac3,Y-Hex4HexNac3; 1321.307: Y-Hex3HexNac4-B,Hex3HexNac4-B; 1340.404: YY-Hex3HexNac4,Y-Hex3HexNac4; 1444.403: YY-Hex4HexNac3dHex1,Y-Hex4HexNac3dHex1; 1483.439: Y-Hex4HexNac4-B,Hex4HexNac4-B; 1485.433: YY-Hex3HexNac4dHex1,Y-Hex3HexNac4dHex1; 1501.432: YY-Hex4HexNac4,Y-Hex4HexNac4; 1524.387: Y-Hex3HexNac5-B,Hex3HexNac5-B; 1647.521: YY-Hex4HexNac4dHex1,Y-Hex4HexNac4dHex1; 1704.543: YY-Hex4HexNac5,Y-Hex4HexNac5; 1850.559: YY-Hex4HexNac5dHex1,Y-Hex4HexNac5dHex1
27	1862.660	H4N4E1Ac1	1862.666	0.0059	3.1409	
28	1905.635	H9N2	1905.634	-0.0011	-0.5556	388.132: Y-Hex1HexNac1-B,Hex1HexNac1-B; 447.151: YY-HexNac2,Y-HexNac2; 509.19: Y-Hex3-B,Hex3-B; 550.272: Y-Hex2HexNac1-B,Hex2HexNac1-B; 671.167: Y-Hex4-B,Hex4-B; 712.193: Y-Hex3HexNac1-B,Hex3HexNac1-B; 771.255: YY-Hex2HexNac2,Y-Hex2HexNac2; 833.234: Y-Hex5-B,Hex5-B; 874.225: Y-Hex4HexNac1-B,Hex4HexNac1-B; 915.308: Y-Hex3HexNac2-B,Hex3HexNac2-B; 933.246: YY-Hex3HexNac2,Y-Hex3HexNac2; 1077.284: Y-Hex4HexNac2-B,Hex4HexNac2-B; 1095.354: YY-Hex4HexNac2,Y-Hex4HexNac2; 1257.336: YY-Hex5HexNac2,Y-Hex5HexNac2; 1319.342: Y-Hex8-B,Hex8-B; 1360.364: Y-Hex7HexNac1-B,Hex7HexNac1-B; 1419.391: YY-Hex6HexNac2,Y-Hex6HexNac2; 1481.386: Y-Hex9-B,Hex9-B; 1522.381: Y-Hex8HexNac1-B,Hex8HexNac1-B; 1540.381: YY-Hex8HexNac1,Y-Hex8HexNac1; 1581.466: YY-Hex7HexNac2,Y-Hex7HexNac2; 1684.477: Y-Hex9HexNac1-B,Hex9HexNac1-B; 1702.541: YY-Hex9HexNac1,Y-Hex9HexNac1; 1725.601: Y-Hex8HexNac2-B,Hex8HexNac2-B; 1743.572: YY-Hex8HexNac2,Y-Hex8HexNac2; 1905.539: YY-Hex9HexNac2,Y-Hex9HexNac2
29	1936.671	H5N4L1	1936.666	-0.0048	-2.4556	
30	1955.699	H5N4F2	1955.697	-0.0018	-0.9152	
31	1966.677	H4N4F1E1	1966.713	0.0362	18.4036	
32	1982.707	H5N4E1	1982.708	0.0011	0.5594	226.163: Y-HexNac1-B,HexNac1-B; 342.117: Y-Neu5Ac-Est1-B,Neu5Ac-Est1-B; 360.17: YY-Neu5Ac-Est1,Y-Neu5Ac-Est1; 388.145: Y-Hex1HexNac1-B,Hex1HexNac1-B; 428.571: Y-HexNac2-B,HexNac2-B; 447.128: YY-HexNac2,Y-HexNac2; 504.221: Y-Hex1Neu5Ac-Est1-B,Hex1Neu5Ac-Est1-B; 550.248: Y-Hex2HexNac1-B,Hex2HexNac1-B; 608.57: YY-Hex1HexNac2,Y-Hex1HexNac2; 707.268: Y-Hex1HexNac1Neu5Ac-Est1-B,Hex1HexNac1Neu5Ac-Est1-B; 712.28: Y-Hex3HexNac1-B,Hex3HexNac1-B; 771.279: YY-Hex2HexNac2,Y-Hex2HexNac2; 869.337: Y-Hex2HexNac1Neu5Ac-Est1-B,Hex2HexNac1Neu5Ac-Est1-B; 874.336: Y-Hex4HexNac1-B,Hex4HexNac1-B; 915.273: Y-Hex3HexNac2-B,Hex3HexNac2-B; 1078.334: Y-Hex4HexNac2-B,Hex4HexNac2-B; 1136.426: YY-Hex3HexNac3,Y-Hex3HexNac3; 1193.411: Y-Hex4HexNac1Neu5Ac-Est1-B,Hex4HexNac1Neu5Ac-Est1-B; 1280.46: Y-Hex4HexNac3-B,Hex4HexNac3-B; 1298.456: YY-Hex4HexNac3,Y-Hex4HexNac3; 1396.513: Y-Hex4HexNac2Neu5Ac-Est1-B,Hex4HexNac2Neu5Ac-Est1-B; 1442.423: Y-Hex5HexNac3-B,Hex5HexNac3-B; 1483.802: Y-Hex4HexNac4-B,Hex4HexNac4-B; 1501.54: YY-Hex4HexNac4,Y-Hex4HexNac4; 1558.586: Y-Hex5HexNac2Neu5Ac-Est1-B,Hex5HexNac2Neu5Ac-Est1-B; 1617.627: YY-Hex4HexNac3Neu5Ac-Est1,Y-Hex4HexNac3Neu5Ac-Est1; 1663.639: YY-Hex5HexNac4,Y-Hex5HexNac4; 1761.683: Y-Hex5HexNac3Neu5Ac-Est1-B,Hex5HexNac3Neu5Ac-Est1-B; 1779.81: YY-Hex5HexNac3Neu5Ac-Est1,Y-Hex5HexNac3Neu5Ac-Est1; 1820.73: YY-Hex4HexNac4Neu5Ac-Est1,Y-Hex4HexNac4Neu5Ac-Est1; 1982.751: YY-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1,Y-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1
33	1998.691	H5N4Ge1	1998.703	0.0120	6.0158	226.122: Y-HexNac1-B,HexNac1-B; 358.114: Y-Neu5Gc-Est1-B,Neu5Gc-Est1-B; 376.129: YY-Neu5Gc-Est1,Y-Neu5Gc-Est1; 388.095: Y-Hex1HexNac1-B,Hex1HexNac1-B; 429.136: Y-HexNac2-B,HexNac2-B; 447.184: YY-HexNac2,Y-HexNac2; 520.208: Y-Hex1Neu5Gc-Est1-B,Hex1Neu5Gc-Est1-B; 538.135: YY-Hex1Neu5Gc-Est1,Y-

						Hex1Neu5Gc-Est1, 550.191: Y-Hex2HexNAc1-B,Hex2HexNAc1-B, 561.166: Y-HexNAc1Neu5Gc-Est1-B,HexNAc1Neu5Gc-Est1-B, 568.17: YY-Hex2HexNAc1,Y-Hex2HexNAc1, 712.219: Y-Hex3HexNAc1-B,Hex3HexNAc1-B, 723.207: Y-Hex1HexNAc1Neu5Gc-Est1-B,Hex1HexNAc1Neu5Gc-Est1-B, 752.931: Y-Hex2HexNAc2-B,Hex2HexNAc2-B, 764.26: Y-HexNAc2Neu5Gc-Est1-B,HexNAc2Neu5Gc-Est1-B, 771.19: YY-Hex2HexNAc2,Y-Hex2HexNAc2, 874.271: Y-Hex4HexNAc1-B,Hex4HexNAc1-B, 885.188: Y-Hex2HexNAc1Neu5Gc-Est1-B,Hex2HexNAc1Neu5Gc-Est1-B, 915.232: Y-Hex3HexNAc2-B,Hex3HexNAc2-B, 933.293: YY-Hex3HexNAc2,Y-Hex3HexNAc2, 1077.291: Y-Hex4HexNAc2-B,Hex4HexNAc2-B, 1095.369: YY-Hex4HexNAc2,Y-Hex4HexNAc2, 1136.349: YY-Hex3HexNAc3,Y-Hex3HexNAc3, 1239.304: Y-Hex5HexNAc2-B,Hex5HexNAc2-B, 1257.31: YY-Hex5HexNAc2,Y-Hex5HexNAc2, 1280.34: Y-Hex4HexNAc3-B,Hex4HexNAc3-B, 1298.381: YY-Hex4HexNAc3,Y-Hex4HexNAc3, 1412.403: Y-Hex4HexNAc2Neu5Gc-Est1-B,Hex4HexNAc2Neu5Gc-Est1-B, 1442.313: Y-Hex5HexNAc3-B,Hex5HexNAc3-B, 1459.531: YY-Hex5HexNAc3,Y-Hex5HexNAc3, 1483.495: Y-Hex4HexNAc4-B,Hex4HexNAc4-B, 1501.466: YY-Hex4HexNAc4,Y-Hex4HexNAc4, 1574.426: Y-Hex5HexNAc2Neu5Gc-Est1-B,Hex5HexNAc2Neu5Gc-Est1-B, 1633.442: YY-Hex4HexNAc3Neu5Gc-Est1,Y-Hex4HexNAc3Neu5Gc-Est1, 1645.492: Y-Hex5HexNAc4-B,Hex5HexNAc4-B, 1663.536: YY-Hex5HexNAc4,Y-Hex5HexNAc4, 1777.49: Y-Hex5HexNAc3Neu5Gc-Est1-B,Hex5HexNAc3Neu5Gc-Est1-B, 1795.529: YY-Hex5HexNAc3Neu5Gc-Est1,Y-Hex5HexNAc3Neu5Gc-Est1, 1819.611: Y-Hex4HexNAc4Neu5Gc-Est1-B,Hex4HexNAc4Neu5Gc-Est1-B, 1836.603: YY-Hex4HexNAc4Neu5Gc-Est1,Y-Hex4HexNAc4Neu5Gc-Est1, 1998.575: YY-Hex5HexNAc4Neu5Gc-Est1,Y-Hex5HexNAc4Neu5Gc-Est1
34	2008.709	H4N4F1E1Ac1	2008.724	0.0148	7.3476	
35	2012.722	H5N5F1	2012.719	-0.0033	-1.6526	
36	2024.724	H5N4E1Ac1	2024.719	-0.0053	-2.6306	388.192: Y-Hex1HexNAc1-B,Hex1HexNAc1-B,Y-Ac1Hex2-B,Ac1Hex2-B, 488.226: YY-Ac1HexNAc2,Y-Ac1HexNAc2, 504.206: Y-Hex1Neu5Ac-Est1-B,Hex1Neu5Ac-Est1-B, 550.2: Y-Hex2HexNAc1-B,Hex2HexNAc1-B,Y-Ac1Hex3-B,Ac1Hex3-B, 562.243: YY-HexNAc1Neu5Ac-Est1,Y-HexNAc1Neu5Ac-Est1, 707.341: Y-Hex1HexNAc1Neu5Ac-Est1-B,Hex1HexNAc1Neu5Ac-Est1-B,Y-Ac1Hex2Neu5Ac-Est1-B,Ac1Hex2Neu5Ac-Est1-B, 712.341: Y-Hex3HexNAc1-B,Hex3HexNAc1-B,Y-Ac1Hex4-B,Ac1Hex4-B, 749.311: Y-Ac1Hex1HexNAc1Neu5Ac-Est1-B,Ac1Hex1HexNAc1Neu5Ac-Est1-B, 915.321: Y-Hex3HexNAc2-B,Hex3HexNAc2-B,Y-Ac1Hex4HexNAc1-B,Ac1Hex4HexNAc1-B, 917.248: Y-Ac1Hex4HexNAc1-B,Ac1Hex4HexNAc1-B, 933.381: YY-Hex3HexNAc2,Y-Hex3HexNAc2,YY-Ac1Hex4HexNAc1,Y-Ac1Hex4HexNAc1, 1078.438: Y-Ac1Hex5HexNAc1-B,Ac1Hex5HexNAc1-B, 1136.454: YY-Hex3HexNAc3,Y-Hex3HexNAc3,YY-Ac1Hex4HexNAc2,Y-Ac1Hex4HexNAc2, 1298.5: YY-Hex4HexNAc3,Y-Hex4HexNAc3,YY-Ac1Hex5HexNAc2,Y-Ac1Hex5HexNAc2, 1339.468: YY-Hex3HexNAc4,Y-Hex3HexNAc4,YY-Ac1Hex4HexNAc3,Y-Ac1Hex4HexNAc3, 1442.473: Y-Hex5HexNAc3-B,Hex5HexNAc3-B, 1501.545: YY-Hex4HexNAc4,Y-Hex4HexNAc4,YY-Ac1Hex5HexNAc3,Y-Ac1Hex5HexNAc3, 1524.616: Y-Ac1Hex4HexNAc4-B,Ac1Hex4HexNAc4-B, 1617.676: YY-Hex4HexNAc3Neu5Ac-Est1,Y-Hex4HexNAc3Neu5Ac-Est1,YY-Ac1Hex5HexNAc2Neu5Ac-Est1,Y-Ac1Hex5HexNAc2Neu5Ac-Est1, 1645.707: Y-Hex5HexNAc4-B,Hex5HexNAc4-B, 1663.637: YY-Hex5HexNAc4,Y-Hex5HexNAc4, 1761.799: Y-Hex5HexNAc3Neu5Ac-Est1-B,Hex5HexNAc3Neu5Ac-Est1-B, 1803.71: Y-Ac1Hex5HexNAc3Neu5Ac-Est1-B,Ac1Hex5HexNAc3Neu5Ac-Est1-B, 1820.795: YY-Hex4HexNAc4Neu5Ac-Est1,Y-Hex4HexNAc4Neu5Ac-Est1,YY-Ac1Hex5HexNAc3Neu5Ac-Est1,Y-Ac1Hex5HexNAc3Neu5Ac-Est1, 1861.8: YY-Ac1Hex4HexNAc4Neu5Ac-Est1,Y-Ac1Hex4HexNAc4Neu5Ac-Est1, 1964.764: Y-Hex5HexNAc4Neu5Ac-Est1-B,Hex5HexNAc4Neu5Ac-Est1-B, 2024.708: YY-Ac1Hex5HexNAc4Neu5Ac-Est1,Y-Ac1Hex5HexNAc4Neu5Ac-Est1
37	2028.716	H6N5	2028.714	-0.0024	-1.1887	388.141: Y-Hex1HexNAc1-B,Hex1HexNAc1-B, 550.184: Y-Hex2HexNAc1-B,Hex2HexNAc1-B, 712.252: Y-Hex3HexNAc1-B,Hex3HexNAc1-B, 933.405: YY-Hex3HexNAc2,Y-Hex3HexNAc2, 1077.389: Y-Hex4HexNAc2-B,Hex4HexNAc2-B, 1136.451: YY-Hex3HexNAc3,Y-Hex3HexNAc3, 1197.427: Y-Hex6HexNAc1-B,Hex6HexNAc1-B, 1239.387: Y-Hex5HexNAc2-B,Hex5HexNAc2-B, 1298.564: YY-Hex4HexNAc3,Y-Hex4HexNAc3, 1442.505: Y-Hex5HexNAc3-B,Hex5HexNAc3-B, 1501.556: YY-Hex4HexNAc4,Y-Hex4HexNAc4, 1524.606: Y-Hex3HexNAc5-B,Hex3HexNAc5-B, 1645.627: Y-Hex5HexNAc4-B,Hex5HexNAc4-B, 1663.636: YY-Hex5HexNAc4,Y-Hex5HexNAc4, 1807.741: Y-Hex6HexNAc4-B,Hex6HexNAc4-B, 1824.953: YY-Hex6HexNAc4,Y-Hex6HexNAc4, 1865.771: YY-Hex5HexNAc5,Y-Hex5HexNAc5, 2028.705: YY-Hex6HexNAc5,Y-Hex6HexNAc5



38	2040.721	H5N4Ge1Ac1	2040.714	-0.0074	-3.6318	
39	2067.711	H10N2	2067.687	-0.0242	11.7210	-
40	2128.768	H5N4F1E1	2128.766	-0.0020	-0.9311	168.15: Y-dHex1-B,dHex1-B; 186.174: YY-dHex1,Y-dHex1; 348.139: YY-Hex1dHex1,Y-Hex1dHex1; 389.166: YY-HexNac1dHex1,Y-HexNac1dHex1; 446.597: YY-HexNac2,Y-HexNac2; 503.252: Y-Hex1Neu5Ac-Est1-B,Hex1Neu5Ac-Est1-B; 707.236: Y-Hex1HexNac1Neu5Ac-Est1-B,Hex1HexNac1Neu5Ac-Est1-B; 869.308: Y-Hex2HexNac1Neu5Ac-Est1-B,Hex2HexNac1Neu5Ac-Est1-B; 1077.289: Y-Hex4HexNac2-B,Hex4HexNac2-B; 1079.31: YY-Hex3HexNac2dHex1,Y-Hex3HexNac2dHex1; 1239.349: Y-Hex5HexNac2-B,Hex5HexNac2-B; 1282.37: YY-Hex3HexNac3dHex1,Y-Hex3HexNac3dHex1; 1298.455: Y-Hex5Neu5Ac-Est1dHex1-B,Hex5Neu5Ac-Est1dHex1-B,YY-Hex4HexNac3,Y-Hex4HexNac3; 1444.441: YY-Hex4HexNac3dHex1,Y-Hex4HexNac3dHex1; 1558.505: Y-Hex5HexNac2Neu5Ac-Est1-B,Hex5HexNac2Neu5Ac-Est1-B; 1645.598: Y-Hex5HexNac4-B,Hex5HexNac4-B; 1647.624: YY-Hex4HexNac4dHex1,Y-Hex4HexNac4dHex1; 1663.571: YY-Hex5HexNac4,Y-Hex5HexNac4; 1761.646: Y-Hex5HexNac3Neu5Ac-Est1-B,Hex5HexNac3Neu5Ac-Est1-B; 1809.659: YY-Hex5HexNac4dHex1,Y-Hex5HexNac4dHex1; 1964.752: Y-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1-B,Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1-B; 1982.758: YY-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1,Y-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1; 2128.721: YY-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1dHex1,Y-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1dHex1
41	2144.763	H5N4F1Ge1	2144.761	-0.0021	-0.9639	168.143: Y-dHex1-B,dHex1-B, 388.165: Y-Hex1HexNac1-B,Hex1HexNac1-B, 510.216: YY-Hex2dHex1,Y-Hex2dHex1, 519.269: Y-Hex1Neu5Gc-Est1-B,Hex1Neu5Gc-Est1-B, 550.197: Y-Hex2HexNac1-B,Hex2HexNac1-B, 712.32: Y-Hex3HexNac1-B,Hex3HexNac1-B, 933.351: YY-Hex3HexNac2,Y-Hex3HexNac2, 1077.348: Y-Hex4HexNac2-B,Hex4HexNac2-B, 1079.323: YY-Hex3HexNac2dHex1,Y-Hex3HexNac2dHex1, 1282.457: YY-Hex3HexNac3dHex1,Y-Hex3HexNac3dHex1, 1298.535: YY-Hex4HexNac3,Y-Hex4HexNac3, 1444.52: YY-Hex4HexNac3dHex1,Y-Hex4HexNac3dHex1, 1460.501: YY-Hex5HexNac3,Y-Hex5HexNac3, 1558.542: Y-Hex4HexNac2Neu5Gc-Est1dHex1-B,Hex4HexNac2Neu5Gc-Est1dHex1-B, 1617.611: YY-Hex3HexNac3Neu5Gc-Est1dHex1,Y-Hex3HexNac3Neu5Gc-Est1dHex1, 1646.64: YY-Hex4HexNac4dHex1,Y-Hex4HexNac4dHex1, 1663.659: YY-Hex5HexNac4,Y-Hex5HexNac4, 1761.681: Y-Hex4HexNac3Neu5Gc-Est1dHex1-B,Hex4HexNac3Neu5Gc-Est1dHex1-B, 1779.728: YY-Hex4HexNac3Neu5Gc-Est1dHex1,Y-Hex4HexNac3Neu5Gc-Est1dHex1, 1809.715: YY-Hex5HexNac4dHex1,Y-Hex5HexNac4dHex1, 1964.792: Y-Hex4HexNac4Neu5Gc-Est1dHex1-B,Hex4HexNac4Neu5Gc-Est1dHex1-B, 1979.809: Y-Hex5HexNac4Neu5Gc-Est1-B,Hex5HexNac4Neu5Gc-Est1-B, 1982.807: YY-Hex4HexNac4Neu5Gc-Est1dHex1,Y-Hex4HexNac4Neu5Gc-Est1dHex1, 2144.723: YY-Hex5HexNac4Neu5Gc-Est1dHex1,Y-Hex5HexNac4Neu5Gc-Est1dHex1
42	2170.780	H5N4F1E1Ac1	2170.777	-0.0034	-1.5742	168.161: Y-dHex1-B,dHex1-B, 504.148: Y-Hex1Neu5Ac-Est1-B,Hex1Neu5Ac-Est1-B, 707.19: Y-Hex1HexNac1Neu5Ac-Est1-B,Hex1HexNac1Neu5Ac-Est1-B, 915.292: Y-Hex3HexNac2-B,Hex3HexNac2-B,Y-Ac1Hex4HexNac1-B,Ac1Hex4HexNac1-B, 1077.251: Y-Hex4HexNac2-B,Hex4HexNac2-B, 1282.316: Y-Ac1Hex5HexNac2-B,Ac1Hex5HexNac2-B,YY-Hex3HexNac3dHex1,Y-Hex3HexNac3dHex1, 1438.379: Y-Hex3HexNac3Neu5Ac-Est1-B,Hex3HexNac3Neu5Ac-Est1-B,Y-Ac1Hex4HexNac2Neu5Ac-Est1-B,Ac1Hex4HexNac2Neu5Ac-Est1-B, 1444.367: YY-Hex4HexNac3dHex1,Y-Hex4HexNac3dHex1, 1663.516: YY-Hex5HexNac4,Y-Hex5HexNac4, 1805.496: YY-Hex3HexNac4Neu5Ac-Est1dHex1,Y-Hex3HexNac4Neu5Ac-Est1dHex1,YY-Ac1Hex4HexNac3Neu5Ac-Est1dHex1,Y-Ac1Hex4HexNac3Neu5Ac-Est1dHex1, 1843.699: Y-Ac1Hex4HexNac4Neu5Ac-Est1-B,Ac1Hex4HexNac4Neu5Ac-Est1-B, 1982.761: YY-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1,Y-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1, 2009.593: YY-Ac1Hex4HexNac4Neu5Ac-Est1dHex1,Y-Ac1Hex4HexNac4Neu5Ac-Est1dHex1, 2153.673: Y-Ac1Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1dHex1-B,Ac1Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1dHex1-B, 2170.503: YY-Ac1Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1dHex1,Y-Ac1Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1dHex1
43	2186.775	H5N4F1Ge1Ac1	2186.771	-0.0035	-1.6018	168.156: Y-dHex1-B,dHex1-B, 186.178: YY-dHex1,Y-dHex1, 388.154: Y-Hex1HexNac1-B,Hex1HexNac1-B,Y-Ac1Hex2-B,Ac1Hex2-B, 447.182: YY-HexNac2,Y-HexNac2,YY-Ac1Hex1HexNac1,Y-Ac1Hex1HexNac1, 519.331: Y-Hex1Neu5Gc-Est1-B,Hex1Neu5Gc-Est1-B, 522.291: YY-Neu5Gc-Est1dHex1,Y-Neu5Gc-Est1dHex1, 689.257: YY-Hex4,Y-Hex4, 707.247: Y-HexNac1Neu5Gc-Est1dHex1-B,HexNac1Neu5Gc-Est1dHex1-B,Y-Ac1Hex1Neu5Gc-Est1dHex1-B,Ac1Hex1Neu5Gc-Est1dHex1-B, 712.268: Y-Hex3HexNac1-B,Hex3HexNac1-B,Y-Ac1Hex4-B,Ac1Hex4-B, 723.243: Y-Hex1HexNac1Neu5Gc-Est1-B,Hex1HexNac1Neu5Gc-Est1-B,Y-Ac1Hex2Neu5Gc-Est1-

						B,Ac1Hex2Neu5Gc-Est1-B, 765.215: Y-HexNac2Neu5Gc-Est1-B,HexNac2Neu5Gc-Est1-B,Y-Ac1Hex1HexNac1Neu5Gc-Est1-B,Ac1Hex1HexNac1Neu5Gc-Est1-B, 915.31: Y-Hex3HexNac2-B,Hex3HexNac2-B,Y-Ac1Hex4HexNac1-B,Ac1Hex4HexNac1-B, 1077.389: Y-Hex4HexNac2-B,Hex4HexNac2-B,Y-Ac1Hex5HexNac1-B,Ac1Hex5HexNac1-B, 1079.353: YY-Hex3HexNac2dHex1,Y-Hex3HexNac2dHex1, 1137.348: YY-Hex3HexNac3,Y-Hex3HexNac3,YY-Ac1Hex4HexNac2,Y-Ac1Hex4HexNac2, 1280.494: Y-Hex4HexNac3-B,Hex4HexNac3-B,Y-Ac1Hex5HexNac2-B,Ac1Hex5HexNac2-B, 1282.473: YY-Hex3HexNac3dHex1,Y-Hex3HexNac3dHex1,YY-Ac1Hex4HexNac2dHex1,Y-Ac1Hex4HexNac2dHex1, 1298.473: YY-Hex4HexNac3,Y-Hex4HexNac3,YY-Ac1Hex5HexNac2,Y-Ac1Hex5HexNac2, 1444.483: YY-Hex4HexNac3dHex1,Y-Hex4HexNac3dHex1, 1460.524: YY-Hex5HexNac3,Y-Hex5HexNac3, 1502.47: YY-Hex4HexNac4,Y-Hex4HexNac4,YY-Ac1Hex5HexNac3,Y-Ac1Hex5HexNac3, 1616.579: Y-Ac1Hex5HexNac2Neu5Gc-Est1-B,Ac1Hex5HexNac2Neu5Gc-Est1-B,YY-Hex3HexNac3Neu5Gc-Est1dHex1,Y-Hex3HexNac3Neu5Gc-Est1dHex1, 1647.652: YY-Hex4HexNac4dHex1,Y-Hex4HexNac4dHex1,YY-Ac1Hex5HexNac3dHex1,Y-Ac1Hex5HexNac3dHex1, 1663.692: YY-Hex5HexNac4,Y-Hex5HexNac4, 1809.69: YY-Hex5HexNac4dHex1,Y-Hex5HexNac4dHex1, 1821.675: YY-Ac1Hex4HexNac3Neu5Gc-Est1dHex1,Y-Ac1Hex4HexNac3Neu5Gc-Est1dHex1, 1843.791: Y-Ac1Hex3HexNac4Neu5Gc-Est1dHex1-B,Ac1Hex3HexNac4Neu5Gc-Est1dHex1-B, 1964.895: Y-Hex4HexNac4Neu5Gc-Est1dHex1-B,Hex4HexNac4Neu5Gc-Est1dHex1-B,Y-Ac1Hex5HexNac3Neu5Gc-Est1dHex1-B,Ac1Hex5HexNac3Neu5Gc-Est1dHex1-B, 1981.871: YY-Hex4HexNac4Neu5Gc-Est1dHex1,Y-Hex4HexNac4Neu5Gc-Est1dHex1, 1998.962: YY-Hex5HexNac4Neu5Gc-Est1,Y-Hex5HexNac4Neu5Gc-Est1, 2006.799: Y-Ac1Hex4HexNac4Neu5Gc-Est1dHex1-B,Ac1Hex4HexNac4Neu5Gc-Est1dHex1-B, 2024.827: YY-Ac1Hex4HexNac4Neu5Gc-Est1dHex1,Y-Ac1Hex4HexNac4Neu5Gc-Est1dHex1, 2040.762: YY-Ac1Hex5HexNac4Neu5Gc-Est1,Y-Ac1Hex5HexNac4Neu5Gc-Est1, 2186.691: YY-Ac1Hex5HexNac4Neu5Gc-Est1dHex1,Y-Ac1Hex5HexNac4Neu5Gc-Est1dHex1
44	2210.832	H3N6F1E1	2210.819	-0.0129	-5.8276	
45	2290.823	H5N4F2Ge1	2290.819	-0.0042	-1.8153	
46	2301.836	H5N4E2	2301.835	-0.0012	-0.5101	503.273: Y-Hex1Neu5Ac-Est1-B,Hex1Neu5Ac-Est1-B; 689.297: YY-Hex4,Y-Hex4; 707.224: Y-Hex1HexNac1Neu5Ac-Est1-B,Hex1HexNac1Neu5Ac-Est1-B; 1239.409: Y-Hex5HexNac2-B,Hex5HexNac2-B; 1618.532: YY-Hex4HexNac3Neu5Ac-Est1,Y-Hex4HexNac3Neu5Ac-Est1; 1982.839: YY-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1,Y-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1; 2301.727: YY-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est2,Y-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est2
47	2317.823	H6N5GI1	2317.793	-0.0296	12.7902	-
48	2332.829	H6N4F1E1Ac1	2332.829	0.0004	0.1741	
49	2343.844	H5N4E2Ac1	2343.845	0.0014	0.5933	
50	2347.841	H6N5E1	2347.840	-0.0007	-0.2960	504.152: Y-Hex1Neu5Ac-Est1-B,Hex1Neu5Ac-Est1-B; 550.265: Y-Hex2HexNac1-B,Hex2HexNac1-B; 689.234: YY-Hex4,Y-Hex4; 707.229: Y-Hex1HexNac1Neu5Ac-Est1-B,Hex1HexNac1Neu5Ac-Est1-B; 712.326: Y-Hex3HexNac1-B,Hex3HexNac1-B; 869.258: Y-Hex2HexNac1Neu5Ac-Est1-B,Hex2HexNac1Neu5Ac-Est1-B; 915.239: Y-Hex3HexNac2-B,Hex3HexNac2-B; 933.29: YY-Hex3HexNac2,Y-Hex3HexNac2; 1077.357: Y-Hex4HexNac2-B,Hex4HexNac2-B; 1136.381: YY-Hex3HexNac3,Y-Hex3HexNac3; 1239.414: Y-Hex5HexNac2-B,Hex5HexNac2-B; 1298.459: YY-Hex4HexNac3,Y-Hex4HexNac3; 1362.76: Y-Hex2HexNac5-B,Hex2HexNac5-B; 1442.415: Y-Hex5HexNac3-B,Hex5HexNac3-B; 1501.519: YY-Hex4HexNac4,Y-Hex4HexNac4; 1617.556: YY-Hex4HexNac3Neu5Ac-Est1,Y-Hex4HexNac3Neu5Ac-Est1; 1659.572: YY-Hex3HexNac4Neu5Ac-Est1,Y-Hex3HexNac4Neu5Ac-Est1; 1663.561: YY-Hex5HexNac4,Y-Hex5HexNac4; 1761.639: Y-Hex5HexNac3Neu5Ac-Est1-B,Hex5HexNac3Neu5Ac-Est1-B; 1820.666: YY-Hex4HexNac4Neu5Ac-Est1,Y-Hex4HexNac4Neu5Ac-Est1; 1866.676: YY-Hex5HexNac5,Y-Hex5HexNac5; 1923.683: Y-Hex6HexNac3Neu5Ac-Est1-B,Hex6HexNac3Neu5Ac-Est1-B; 1964.746: Y-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1-B,Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1-B; 1982.772: YY-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1,Y-Hex5HexNac4Neu5Ac-Est1; 2010.814: Y-Hex6HexNac5-B,Hex6HexNac5-B; 2028.766: YY-Hex6HexNac5,Y-Hex6HexNac5; 2126.803: Y-Hex6HexNac4Neu5Ac-Est1-B,Hex6HexNac4Neu5Ac-Est1-B; 2143.801: YY-Hex6HexNac4Neu5Ac-Est1,Y-Hex6HexNac4Neu5Ac-Est1; 2185.854: YY-

						Hex5HexNAc5Neu5Ac-Est1,Y-Hex5HexNAc5Neu5Ac-Est1; 2347.751: YY-Hex6HexNAc5Neu5Ac-Est1,Y-Hex6HexNAc5Neu5Ac-Est1
51	2359.827	H6N5G1Ac1	2359.804	-0.0231	-9.7806	
52	2385.858	H5N4E2Ac2	2385.856	-0.0020	-0.8571	388.126: Y-Hex1HexNAc1-B,Hex1HexNAc1-B,Y-Ac1Hex2-B,Ac1Hex2-B, 429.041: Y-HexNAc2-B,HexNAc2-B, 510.12: Y-Hex3-B,Hex3-B, 689.134: YY-Hex4,Y-Hex4, 723.234: Y-Hex1HexNAc1Neu5Gc-Est1-B,Hex1HexNAc1Neu5Gc-Est1-B,Y-Ac1Hex2Neu5Gc-Est1-B,Ac1Hex2Neu5Gc-Est1-B, 934.162: YY-Hex3HexNAc2,Y-Hex3HexNAc2,YY-Ac1Hex4HexNAc1,Y-Ac1Hex4HexNAc1, 1136.224: YY-Hex3HexNAc3,Y-Hex3HexNAc3, 1298.362: YY-Hex4HexNAc3,Y-Hex4HexNAc3, 1659.401: Y-Ac2Hex5HexNAc2Neu5Gc-Est1-B,Ac2Hex5HexNAc2Neu5Gc-Est1-B, 1862.505: Y-Ac2Hex5HexNAc3Neu5Gc-Est1-B,Ac2Hex5HexNAc3Neu5Gc-Est1-B, 2172.653: YY-Hex4HexNAc4Neu5Gc-Est2,Y-Hex4HexNAc4Neu5Gc-Est2,YY-Ac1Hex5HexNAc3Neu5Gc-Est2,Y-Ac1Hex5HexNAc3Neu5Gc-Est2
53	2393.846	H7N6	2393.846	-0.0002	-0.0901	
54	2401.849	H5N4F1E1L1	2401.851	0.0019	0.7785	
55	2447.892	H5N4F1E2	2447.893	0.0007	0.3001	
56	2479.869	H5N4F1Ge2	2479.883	0.0136	5.4696	
57	2488.949	H4N5F1E2	2488.919	-0.0297	11.9394	
58	2493.894	H6N5F1E1	2493.898	0.0042	1.6897	
59	2521.889	H5N4F1Ge2Ac1	2521.893	0.0041	1.6371	
60	2563.900	H5N4F1Ge2Ac2	2563.904	0.0037	1.4405	519.332: Y-Hex1Neu5Gc-Est1-B,Hex1Neu5Gc-Est1-B, 749.371: Y-Ac1HexNAc1Neu5Gc-Est1dHex1-B,Ac1HexNAc1Neu5Gc-Est1dHex1-B,Y-Ac2Hex1Neu5Gc-Est1dHex1-B,Ac2Hex1Neu5Gc-Est1dHex1-B, 764.998: Y-HexNAc2Neu5Gc-Est1-B,HexNAc2Neu5Gc-Est1-B,Y-Ac1Hex1HexNAc1Neu5Gc-Est1-B,Ac1Hex1HexNAc1Neu5Gc-Est1-B, 1659.671: YY-Ac1Hex3HexNAc3Neu5Gc-Est1dHex1,Y-Ac1Hex3HexNAc3Neu5Gc-Est1dHex1,YY-Ac2Hex4HexNAc2Neu5Gc-Est1dHex1,Y-Ac2Hex4HexNAc2Neu5Gc-Est1dHex1, 1805.641: YY-Hex3HexNAc3Neu5Gc-Est2,Y-Hex3HexNAc3Neu5Gc-Est2, 1822.629: YY-Ac1Hex4HexNAc3Neu5Gc-Est1dHex1,Y-Ac1Hex4HexNAc3Neu5Gc-Est1dHex1,YY-Ac2Hex5HexNAc2Neu5Gc-Est1dHex1,Y-Ac2Hex5HexNAc2Neu5Gc-Est1dHex1, 2024.77: YY-Ac1Hex4HexNAc4Neu5Gc-Est1dHex1,Y-Ac1Hex4HexNAc4Neu5Gc-Est1dHex1,YY-Ac2Hex5HexNAc3Neu5Gc-Est1dHex1,Y-Ac2Hex5HexNAc3Neu5Gc-Est1dHex1, 2186.893: YY-Ac1Hex5HexNAc4Neu5Gc-Est1dHex1,Y-Ac1Hex5HexNAc4Neu5Gc-Est1dHex1, 2504.797: Y-Ac1Hex5HexNAc4Neu5Gc-Est2dHex1-B,Ac1Hex5HexNAc4Neu5Gc-Est2dHex1-B, 2563.812: YY-Ac2Hex5HexNAc4Neu5Gc-Est2dHex1,Y-Ac2Hex5HexNAc4Neu5Gc-Est2dHex1, 2172.653: YY-Hex4HexNAc4Neu5Gc-Est2,Y-Hex4HexNAc4Neu5Gc-Est2,YY-Ac1Hex5HexNAc3Neu5Gc-Est2,Y-Ac1Hex5HexNAc3Neu5Gc-Est2
61	2666.970	H6N5E2	2666.967	-0.0030	-1.1167	
62	2712.972	H7N6E1	2712.973	0.0005	0.1847	503.279: Y-Hex1Neu5Ac-Est1-B,Hex1Neu5Ac-Est1-B; 707.176: Y-Hex1HexNAc1Neu5Ac-Est1-B,Hex1HexNAc1Neu5Ac-Est1-B; 1663.561: YY-Hex5HexNAc4,Y-Hex5HexNAc4; 2029.62: YY-Hex6HexNAc5,Y-Hex6HexNAc5; 2347.849: YY-Hex6HexNAc5Neu5Ac-Est1,Y-Hex6HexNAc5Neu5Ac-Est1; 2393.907: YY-Hex7HexNAc6,Y-Hex7HexNAc6; 2492.006: Y-Hex7HexNAc5Neu5Ac-Est1-B,Hex7HexNAc5Neu5Ac-Est1-B; 2712.888: YY-Hex7HexNAc6Neu5Ac-Est1,Y-Hex7HexNAc6Neu5Ac-Est1
63	2817.994	H8N5F1E1	2818.004	0.0099	3.4992	
64	2859.059	H7N6F1E1	2859.030	-0.0286	-9.9999	
65	2875.028	H8N6E1	2875.025	-0.0027	-0.9306	
66	3345.196	H10N6F1E1	3345.189	-0.0071	-2.1284	

Tablo Ek6. Her bir türe özgü tespit edilen *N*-glikanlar.

İnsan	Sığır	Manda	Keçi	Eşek
H5N3L1	H4N6F1	H6N5F1	H5N4GI1	H4N4E1Ac1
H4N3F1E1	H4N7	H5N6F1	H4N5Ge1	H5N4L1
H5N4E1L1	H5N4Ge1GI1	H4N6E1	H5N4F1L1	H4N4F1E1Ac1
H6N5L2	H5N6E1	H3N8F1E1	H7N3E1	H5N4E1Ac1
H6N5F2E1			H6N4Ge1	H6N5
H6N5F3E1			H5N5Ge1	H5N4Ge1Ac1
H7N5F2E1			H3N6F1Ge1	H5N4F1E1Ac1
H8N6F2			H5N4GI2	H5N4F1Ge1Ac1
H6N5F4E1			H4N4F1E1GI1	H6N4F1E1Ac1
H6N5E2L1			H5N4E1GI1	H5N4E2Ac1
H6N5E3			H4N4F1E2	H6N5GI1Ac1
H6N5F3E1L1			H6N4F1Ge1	H5N4E2Ac2
H6N5F1E2L1			H5N4F1L1GI1	H7N6
H6N5F3E2			H5N4F1GI2	H7N5GI1
H6N5F1E3			H5N4F1E1GI1	H5N4F1Ge2Ac1
H7N6F3E1			H6N5F1GI1	H5N4F1Ge2Ac2
H6N5F2E2L1			H4N5F1E2	H8N6E1
H7N6F4E1			H5N5E1Ge1	H10N6F1E1
H8N7F2E1			H5N4E2L1	
H7N6F3E2			H6N5L1GI1	
			H6N5E1L1	
			H5N5F1E1Ge1	
			H6N5E1Ge1	
			H6N5F1E1Ge1	
			H7N5E1Ge1	
			H6N5F1E2Ge1	
			H6N5F1E1Ge2	
			H7N5E1Ge2	
			H7N6F1E1Ge1	
			H7N6F1Ge2	
			H7N7E1Ge1	

Tablo Ek7. Türler arasında ortak belirlenen *N*-glikan tipleri. H: İnsan, B: Sığır, BF: Manda, G: Keçi, D: Eşek

H: İnsan, B: Sığır, BF: Manda, G: Keçi, D: Eşek														
HNB	HNBFB	HNBFBNG	HNBFBNGND	HNBFBND	HNG	HNGND	HND	BFB	BFBNG	BFBNGND	BFBND	BNG	BFNG	GND
H4N7E1	H4N5E1	H3N5F1	H3N3	H3N3F1	H5N5E2	H4N3E1	H6N5E2	H3N6E1	H3N6F1	H4N3	H5N4F2	H5N4F1GI1	H6N3F1E1	H4N4Ge1
	H5N4F2E1	H5N5	H5N2		H5N5F1E2			H4N7F1	H5N4Ge2	H3N4	H5N6F1L1	H5N4F1Ge1GI1	H6N6E1	H10N2
	H7N6F2E1	H6N3E1	H6N2					H4N6F1E1	H3N6F2E1	H6N3F1		H6N6F1E1		H6N4F1E1
		H4N5F1E1	H4N3F1					H4N7F1E1	H6N5F1Ge1	H5N4Ge1				H8N5F1E1
		H5N5E1	H5N3					H5N8F1	H5N6F1E1	H5N4F1Ge1				
		H5N5F1E1	H3N4F1					H5N8F1E1	H7N6F1Ge1	H3N6F1E1				
		H6N5F1E2	H4N4						H6N7F1E1	H6N5GI1				
			H7N2						H7N7E1	H7N6E1				
			H6N3							H7N6F1E1				
			H4N4F1											
			H5N4											
			H4N5											
			H8N2											
			H5N3E1											
			H5N4F1											
			H4N4E1											
			H6N4											
			H4N5F1											
			H9N2											
			H4N4F1E1											
			H5N4E1											
			H5N5F1											
			H5N4F1E1											
			H5N4E2											
			H6N5E1											
			H5N4F1E1L1											
			H5N4F1E2											
			H6N5F1E1											

Tablo Ek8. *N*-glikan tiplerine bağlı olarak belirlenen gruplar ve formülasyonu.

<i>N</i> -glycan Traits	Formula
High Mannose	(H4N2 + H5N2 + H6N2 + H7N2 + H8N2 + H9N2 + H10N2)
Fucosylation	(H3N3F1 + H4N3F1 + H3N4F1 + H5N3F1 + H4N4F1 + H3N5F1 + H4N3F1E1 + H6N3F1 + H5N4F1 + H4N5F1 + H3N6F1 + H5N4F2 + H4N4F1E1 + H4N4F1E1Ac1 + H5N5F1 + H4N6F1 + H6N3F1E1 + H5N4F1G1 + H5N4F1E1 + H4N5F1E1 + H5N4F1E1Ac1 + H6N5F1 + H5N4F1Ge1Ac1 + H3N6F1E1 + H5N6F1 + H4N7F1 + H5N4F2E1 + H4N4F1E2 + H5N4F2Ge1 + H6N4F1Ge1 + H5N5F1E1 + H6N4F1E1Ac1 + H3N6F2E1 + H5N4F1L1G1 + H4N6F1E1 + H5N4F1G1 + H5N4F1E1L1 + H5N4F1E1G1 + H5N4F1Ge1G1 + H5N4F1E2 + H6N5F1G1 + H5N4F1Ge2 + H4N5F1E2 + H6N5F1E1 + H6N5F1Ge1 + H5N4F1Ge2Ac1 + H5N6F1E1 + H5N4F1Ge2Ac2 + H4N7F1E1 + H3N8F1E1 + H5N8F1 + H6N5F2E1 + H5N5F1E2 + H6N6F1E1 + H6N5F3E1 + H7N5F2E1 + H6N5F1E2 + H8N5F1E1 + H6N5F1E1Ge1 + H8N6F2 + H7N6F1E1 + H7N6F1Ge1 + H6N7F1E1 + H6N5F4E1 + H5N8F1E1 + H7N6F2E1 + H6N5F3E1L1 + H6N5F1E2L1 + H6N5F3E2 + H6N5F1E3 + H6N5F1E2Ge1 + H7N6F3E1 + H6N5F1E1Ge2 + H7N6F1E1Ge1 + H7N6F1Ge2 + H6N5F2E2L1 + H7N6F4E1 + H10N6F1E1 + H8N7F2E1 + H7N6F3E2)
Galactosylation	(H3N3 + H3N3F1 + H4N3 + H4N3F1 + H4N4 + H4N3E2 + H4N4F1 + H5N4 + H4N3F1E1 + H5N4F1 + H4N4E1 + H4N4Ge1 + H4N4E1Ac1 + H5N5 + H5N4L1 + H5N4G1 + H5N4F2 + H4N4F1E1 + H5N4E1 + H5N4Ge1 + H4N4F1E1Ac1 + H5N5F1 + H5N4E1Ac1 + H6N5 + H5N4Ge1Ac1 + H5N4F1L1 + H5N4F1G1 + H5N4F1E1 + H5N4F1Ge1 + H5N4F1E1Ac1 + H5N5E1 + H5N4F1Ge1Ac1 + H5N5Ge1 + H5N4G1 + H5N4E1L1 + H5N4E1G1 + H5N4F2E1 + H4N4F1E2 + H5N4Ge1G1 + H5N4F2Ge1 + H5N4E2 + H6N5G1 + H5N5F1E1 + H5N4Ge2 + H5N4E2Ac1 + H6N5E1 + H6N5G1Ac1 + H5N4F1L1G1 + H5N4E2Ac2 + H5N4F1G1 + H7N6 + H5N4F1E1L1 + H5N4F1E1G1 + H5N4F1Ge1G1 + H5N4F1E2 + H6N5F1G1 + H5N4F1Ge2 + H6N5F1E1 + H5N5E2 + H6N5F1Ge1 + H5N5E1Ge1 + H5N4F1Ge2Ac1 + H6N6E1 + H5N4F1Ge2Ac2 + H5N4E2L1 + H6N5L1G1 + H6N5E1L1 + H6N5F2E1 + H5N5F1E2 + H6N5E2 + H6N5E1Ge1 + H6N6F1E1 + H7N6E1 + H6N5F3E1 + H6N5F1E2 + H6N5F1E1Ge1 + H7N6F1E1 + H7N6F1Ge1 + H7N7E1 + H6N5F4E1 + H6N5E2L1 + H6N5E3 + H7N6F2E1 + H6N5F3E1L1 + H6N5F1E2L1 + H6N5F3E2 + H6N5F1E3 + H6N5F1E2Ge1 + H7N6F3E1 + H6N5F1E1Ge2 + H7N6F1E1Ge1 + H7N6F1Ge2 + H6N5F2E2L1 + H7N7E1Ge1 + H7N6F4E1 + H8N7F2E1 + H7N6F3E2)
Hybrid	(H3N3 + H4N3 + H5N3 + H5N3F1 + H6N3 + H5N4 + H5N3L1 + H6N3F1 + H5N3E1 + H6N4 + H6N3E1 + H6N3F1E1 + H6N4Ge1 + H6N4F1Ge1 + H6N4F1E1Ac1)
Complex	(H3N3F1 + H3N4 + H4N3F1 + H3N4F1 + H4N4 + H3N5 + H4N3E2 + H4N4F1 + H3N5F1 + H4N5 + H4N3F1E1 + H5N4F1 + H4N4E1 + H4N4Ge1 + H4N5F1 + H4N4E1Ac1 + H5N5 + H3N6F1 + H5N4L1 + H5N4G1 + H5N4F2 + H4N4F1E1 + H5N4E1 + H5N4Ge1 + H4N4F1E1Ac1 + H5N5F1 + H4N5E1 + H5N4E1Ac1 + H6N5 + H4N5Ge1 + H5N4Ge1Ac1 + H4N6F1 + H3N6E1 + H5N4F1L1 + H5N4F1G1 + H7N3E1 + H4N7 + H5N4F1E1 + H5N4F1Ge1 + H4N5F1E1 + H5N4F1E1Ac1 + H6N5F1 + H5N5E1 + H5N4F1Ge1Ac1 + H5N5Ge1 + H3N6F1E1 + H5N6F1 + H4N6E1 + H5N4G1 + H5N4E1L1 + H4N7F1 + H5N4E1G1 + H5N4F2E1 + H4N4F1E2 + H5N4Ge1G1 + H5N4F2Ge1 + H5N4E2 + H6N5G1 + H5N5F1E1 + H5N4Ge2 + H5N4E2Ac1 + H6N5E1 + H3N6F2E1 + H6N5G1Ac1 + H5N4F1L1G1 + H4N6F1E1 + H5N4E2Ac2 + H5N4F1G1 + H5N6E1 + H7N6 + H5N4F1E1L1 + H5N4F1E1G1 + H4N7E1 + H5N4F1Ge1G1 + H5N4F1E2 + H6N5F1G1 + H5N4F1Ge2 + H4N5F1E2 + H6N5F1E1 + H5N5E2 + H6N5F1Ge1 + H5N5E1Ge1 + H5N4F1Ge2Ac1 + H5N6F1E1 + H6N6E1 + H5N4F1Ge2Ac2 + H5N4E2L1 + H4N7F1E1 + H6N5L1G1 + H3N8F1E1 + H6N5E1L1 + H5N8F1 + H6N5F2E1 + H5N5F1E2 + H6N5E2 + H6N5E1Ge1 + H6N6F1E1 + H7N6E1 + H6N5F3E1 + H7N5F2E1 + H6N5F1E2 + H8N5F1E1 + H6N5F1E1Ge1 + H7N5E1Ge1 + H8N6F2 + H7N6F1E1 + H7N6F1Ge1 + H6N7F1E1 + H7N7E1 + H6N5F4E1 + H6N5E2L1 + H5N8F1E1 + H6N5E3 + H7N6F2E1 + H6N5F3E1L1 + H6N5F1E2L1 + H6N5F3E2 + H6N5F1E3 + H6N5F1E2Ge1 + H7N6F3E1 + H6N5F1E1Ge2 + H7N5E1Ge2 + H7N6F1E1Ge1 + H7N6F1Ge2 + H6N5F2E2L1 + H7N7E1Ge1 + H7N6F4E1 + H10N6F1E1 + H8N7F2E1 + H7N6F3E2)
Total Sialylation	(H4N3E2 + H4N3F1E1 + H5N3E1 + H4N4E1 + H4N4Ge1 + H6N3E1 + H5N4G1 + H4N4F1E1 + H5N4E1 + H5N4Ge1 + H4N5E1 + H5N4E1Ac1 + H4N5Ge1 + H5N4Ge1Ac1 + H3N6E1 + H6N3F1E1 + H5N4F1G1 + H7N3E1 + H5N4F1E1 + H5N4F1Ge1 + H6N4Ge1 + H4N5F1E1 + H5N4F1E1Ac1 + H5N4F1Ge1Ac1 + H5N5Ge1 + H3N6F1E1 + H4N6E1 + H5N4G1 + H5N4E1L1 + H5N4E1G1 + H5N4F2E1 + H4N4F1E2 + H5N4Ge1G1 + H5N4F2Ge1 + H5N4E2 + H6N4F1Ge1 + H6N5G1 + H5N5F1E1 + H6N4F1E1Ac1 + H5N4Ge2 + H5N4E2Ac1 + H6N5E1 + H3N6F2E1 + H6N5G1Ac1 + H5N4F1L1G1 + H4N6F1E1 + H5N4E2Ac2 +

	H5N4F1GI2 + H5N6E1 + H5N4F1E1L1 + H5N4F1E1GI1 + H4N7E1 + H5N4F1Ge1GI1 + H5N4F1E2 + H6N5F1GI1 + H5N4F1Ge2 + H4N5F1E2 + H6N5F1E1 + H5N5E2 + H6N5F1Ge1 + H5N5E1Ge1 + H5N4F1Ge2Ac1 + H5N6F1E1 + H6N6E1 + H5N4F1Ge2Ac2 + H5N4E2L1 + H4N7F1E1 + H6N5L1GI1 + H3N8F1E1 + H6N5E1L1 + H6N5F2E1 + H5N5F1E2 + H6N5E2 + H6N5E1Ge1 + H6N6F1E1 + H7N6E1 + H6N5F3E1 + H7N5F2E1 + H6N5F1E2 + H8N5F1E1 + H6N5F1E1Ge1 + H7N5E1Ge1 + H7N6F1E1 + H7N6F1Ge1 + H6N7F1E1 + H7N7E1 + H6N5F4E1 + H6N5E2L1 + H5N8F1E1 + H6N5E3 + H7N6F2E1 + H6N5F3E1L1 + H6N5F1E2L1 + H6N5F3E2 + H6N5F1E3 + H6N5F1E2Ge1 + H7N6F3E1 + H6N5F1E1Ge2 + H7N5E1Ge2 + H7N6F1E1Ge1 + H7N6F1Ge2 + H6N5F2E2L1 + H7N7E1Ge1 + H7N6F4E1 + H10N6F1E1 + H8N7F2E1 + H7N6F3E2)
a2,6 Sialylation (NeuAc), E	(H4N3E2 + H4N3F1E1 + H5N3E1 + H4N4E1 + H6N3E1 + H4N4F1E1 + H5N4E1 + H4N5E1 + H5N4E1Ac1 + H3N6E1 + H6N3F1E1 + H7N3E1 + H5N4F1E1 + H4N5F1E1 + H5N4F1E1Ac1 + H3N6F1E1 + H4N6E1 + H5N4E1L1 + H5N4E1GI1 + H5N4F2E1 + H4N4F1E2 + H5N4E2 + H5N5F1E1 + H6N4F1E1Ac1 + H5N4E2Ac1 + H6N5E1 + H3N6F2E1 + H4N6F1E1 + H5N4F1E1L1 + H5N4F1E1GI1 + H4N7E1 + H5N4F1E2 + H4N5F1E2 + H6N5F1E1 + H5N5E2 + H5N6F1E1 + H5N4E2L1 + H4N7F1E1 + H3N8F1E1 + H6N5F2E1 + H5N5F1E2 + H6N5E2 + H6N5E1Ge1 + H6N6F1E1 + H7N6E1 + H6N5F3E1 + H7N5F2E1 + H6N5F1E2 + H8N5F1E1 + H6N5F1E1Ge1 + H7N6F1E1 + H6N7F1E1 + H7N7E1 + H6N5F4E1 + H6N5E2L1 + H5N8F1E1 + H6N5E3 + H7N6F2E1 + H6N5F3E1L1 + H6N5F1E2L1 + H6N5F3E2 + H6N5F1E3 + H6N5F1E2Ge1 + H7N6F3E1 + H6N5F1E1Ge2 + H7N5E1Ge2 + H7N6F1E1Ge1 + H6N5F2E2L1 + H7N7E1Ge1 + H7N6F4E1 + H10N6F1E1 + H8N7F2E1 + H7N6F3E2)
a2,3 Sialylation (NeuAc), L	(H5N4E1L1 + H5N4F1L1GI1 + H5N4F1E1L1 + H5N4E2L1 + H6N5E1L1 + H6N5F3E1L1 + H6N5F1E2L1 + H6N5F2E2L1 +)
a2,6 Sialylation (NeuGc), Ge	(H4N4Ge1 + H5N4Ge1 + H4N5Ge1 + H5N4Ge1Ac1 + H5N4F1Ge1 + H6N4Ge1 + H5N4F1Ge1Ac1 + H5N5Ge1 + H5N4Ge1GI1 + H5N4F2Ge1 + H6N4F1Ge1 + H5N4Ge2 + H5N4F1Ge1GI1 + H5N4F1Ge2 + H6N5F1Ge1 + H5N5E1Ge1 + H5N4F1Ge2Ac1 + H5N4F1Ge2Ac2 + H6N5E1Ge1 + H6N5F1E1Ge1 + H7N5E1Ge1 + H7N6F1Ge1 + H6N5F1E2Ge1 + H6N5F1E1Ge2 + H7N5E1Ge2 + H7N6F1E1Ge1 + H7N6F1Ge2 + H7N7E1Ge1)
a2,3 Sialylation (NeuGc), GI	(H5N4GI1 + H5N4GI2 + H5N4E1GI1 + H5N4Ge1GI1 + H6N5GI1Ac1 + H5N4F1L1GI1 + H5N4F1GI2 + H5N4F1E1GI1 + H5N4F1Ge1GI1 + H6N5F1GI1 + H6N5L1GI1)
%Diantennary	(H3N4 + H3N4F1 + H4N4 + H3N5 + H4N4F1 + H5N4 + H3N5F1 + H4N5 + H4N3F1E1 + H5N4F1 + H4N4E1 + H4N4Ge1 + H4N5F1 + H4N4E1Ac1 + H5N5 + H5N4L1 + H5N4GI1 + H5N4F2 + H4N4F1E1 + H5N4E1 + H5N4Ge1 + H4N4F1E1Ac1 + H5N5F1 + H4N5E1 + H5N4E1Ac1 + H4N5Ge1 + H5N4Ge1Ac1 + H5N4F1L1 + H5N4F1GI1 + H5N4F1E1 + H5N4F1Ge1 + H4N5F1E1 + H5N4F1E1Ac1 + H5N5E1 + H5N4F1Ge1Ac1 + H5N5Ge1 + H5N4GI2 + H5N4E1L1 + H5N4E1GI1 + H5N4F2E1 + H4N4F1E2 + H5N4Ge1GI1 + H5N4F2Ge1 + H5N4E2 + H5N5F1E1 + H5N4Ge2 + H5N4E2Ac1 + H5N4F1L1GI1 + H5N4E2Ac2 + H5N4F1GI2 + H5N4F1E1L1 + H5N4F1E1GI1 + H5N4F1Ge1GI1 + H5N4F1E2 + H5N4F1Ge2 + H4N5F1E2 + H5N5E2 + H5N5E1Ge1 + H5N4F1Ge2Ac1 + H5N4F1Ge2Ac2 + H5N4E2L1 + H5N5F1E2)
%Tri+antennary	(H6N5 + H6N5F1 + H6N5GI1 + H6N5E1 + H6N5GI1Ac1 + H6N5F1GI1 + H6N5F1E1 + H6N5F1Ge1 + H6N5L1GI1 + H6N5E1L1 + H6N5F2E1 + H6N5E2 + H6N5E1Ge1 + H6N5F3E1 + H6N5F1E2 + H6N5F1E1Ge1 + H6N5F4E1 + H6N5E2L1 + H6N5E3 + H6N5F3E1L1 + H6N5F1E2L1 + H6N5F3E2 + H6N5F1E3 + H6N5F1E2Ge1 + H6N5F1E1Ge2 + H6N5F2E2L1)
% Acetylation (Ac)	(H4N4E1Ac1 + H4N4F1E1Ac1 + H5N4E1Ac1 + H5N4Ge1Ac1 + H5N4F1E1Ac1 + H5N4F1Ge1Ac1 + H6N4F1E1Ac1 + H5N4E2Ac1 + H6N5GI1Ac1 + H5N4E2Ac2 + H5N4F1Ge2Ac1 + H5N4F1Ge2Ac2)

Tablo Ek9. N-glikan gruplarının göreceli bollukları.

N-glycan Traits	Human		Bovine		Buffalo		Goat		Donkey	
	Rel. Abn. %	SD	Rel. Abn. %	SD	Rel. Abn. %	SD	Rel. Abn. %	SD	Rel. Abn. %	SD
High Mannose	7.23	1.18	13.53	2.89	16.67	0.45	5.87	0.82	9.83	2.63
Fucosylation	62.72	10.18	50.63	6.35	54.43	3.64	46.43	5.09	40.39	14.60
Galactosylation	67.84	11.54	46.41	6.19	43.49	2.84	72.16	8.19	72.21	26.23

Hybrid	11.61	1.50	11.67	1.60	11.32	1.03	9.17	1.42	13.72	4.23
Complex	81.15	12.21	74.79	8.57	72.00	4.52	84.32	8.64	76.44	27.77
Total Sialylation	70.76	11.41	52.98	5.80	50.62	3.26	80.29	8.54	54.43	20.38
a2,6 Sialylation (NeuAc), E	65.16	10.75	42.33	4.67	44.16	2.97	39.00	3.83	34.86	10.53
a2,3 Sialylation (NeuAc), L	5.60	0.67	1.00	0.16	1.05	0.07	4.44	0.50	1.14	0.24
a2,6 Sialylation (NeuGc), Ge	0.00	0.00	7.52	0.76	5.41	0.23	28.24	3.57	17.31	9.41
a2,3 Sialylation (NeuGc), Gl	0.00	0.00	2.14	0.22	0.00	0.00	8.62	0.64	1.11	0.21
%Diantennary	58.81	8.48	43.86	5.51	37.63	2.30	54.73	5.48	62.93	22.91
%Tri+antennary	14.01	2.20	7.04	0.80	9.59	0.60	14.46	1.79	8.25	2.40
% Acetylation (Ac)	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	16.06	3.85

Tablo Ek10. Anne sütü üzerine gerçekleştirilen glikoproteomik analizler sonucu tespit edilen deamide olmuş peptitlerin listesi.

	Proteins	Position in Protein	Localization	Score	N	Position in Peptide	Deamidation (N) Probabilities	Charge	Mass error [ppm]
1	sp O00391 QSOX1_HUMAN	130	1.00	53.97	1	1	N(1)GSGAVFPVAGADVQTLR	2	1.699
2	sp O14773 TPP1_HUMAN	443	1.00	41.20	1	15	FLSSSPHLPPSSYFN(1)ASGR	3	0.268
3	sp O60568 PLOC3_HUMAN	63	1.00	45.16		6	SAEFFN(1)YTVR	2	1.729
4	sp O60603 TLR2_HUMAN	442	1.00	75.11	1	3	YLN(1)LSSTR	2	-0.064
5	sp O75882 ATRN_HUMAN	416	1.00	100.48	1	6	IDSTGN(1)VTNELR	2	0.049
6	sp P00450 CERU_HUMAN	138	1.00	87.57	1	10	EHEGAIYPDN(1)TTDFQR	3	-0.354
7	sp P00734 THRB_HUMAN	121	1.00	111.28	1	4	GHVN(1)ITR	2	1.018
8	sp P00738 HPT_HUMAN	241	1.00	68.04	1	6	VVLHPN(1)YSQVDIGLIK	3	0.718
9	sp P01009 A1AT_HUMAN	107	0.99	111.82	1	14	ADTHDEILEGLN(0.006)FN(0.994)LTEIPEAQIHEGFQELLR	4	0.269
10	sp P01009 A1AT_HUMAN	271	1.00	52.92	1;2	4	YLG(1)ATAIFFLPDEGKLQHLN(1)ELTHDIITK	4	0.668
11	sp P01011 AACT_HUMAN	106	1.00	40.76	1	5	GLKFN(1)LTETSEAEIHQSFGHLLR	4	0.333
12	sp P01011 AACT_HUMAN	127	1.00	62.14	1;2	3	TLN(1)QSSDELQLSMGN(1)AMFVK	2	-1.092
13	sp P01011 AACT_HUMAN	186	1.00	53.57	1;2	8	LIN(1)DYVKN(1)GTR	3	-2.197
14	sp P01011 AACT_HUMAN	271	1.00	57.48	1	4	YTGN(1)ASALFILPDQDKMEEVEAMLLPETLKR	4	-0.919
15	sp P01019 ANGT_HUMAN	170	1.00	41.91	1	13	LQAILGVPWKDN(1)CTSR	4	0.473
16	sp P01024 CO3_HUMAN	85	1.00	108.17	1;2	12	TVLTPATN(1)HMG(1)VTFTIPANR	2	-2.092
17	sp P01033 TIMP1_HUMAN	53	1.00	103.91	1	8	FVGTPEVN(1)QTTLYQR	2	-0.379

18	sp P01033 TIMP1_HUMAN	101	1.00	55.31	1	3	SHN(1)RSEEFLLIAGK	3	-0.650
19	sp P01042 KNG1_HUMAN	294	0.98	44.43	1	6	LN(0.109)AEN(0.915)N(0.976)ATFYFK	2	-1.443
20	sp P01133 EGF_HUMAN	104	1.00	86.09	1	4	VFLN(1)GSR	2	0.618
21	sp P01591 IGJ_HUMAN	71	1.00	58.17	1;2; 3	10	IIVPLN(1)N(1)REN(1)ISDPTSPLR	2	0.061
22	sp P01833 PIGR_HUMAN	90	1.00	50.65	2;3; 4	9	AN(1)LTN(1)FPEN(1)GTFVFN(1)IAQLSQDDSGR	2	1.621
23	sp P01833 PIGR_HUMAN	135	1.00	66.29	1	18	GLSFDVSLEVSQGPGLLN(1)DTK	2	2.476
24	sp P01833 PIGR_HUMAN	186	0.89	87.93	1	19	QIGLYPVLVIDSSGYVN(0.114)PN(0.886)YTGR	2	-1.862
25	sp P01833 PIGR_HUMAN	421	1.00	51.31	1;2	9	LSLLEPGN(1)GTFVILN(1)QLTSR	3	0.806
26	sp P01833 PIGR_HUMAN	469	1.00	93.01	1;2	4	VPGN(1)VTAVLGETLKVCHFPCK	4	-0.111
27	sp P01833 PIGR_HUMAN	499	1.00	57.01	1;2	6	YWCKWN(1)N(1)TGCQALPSQDEGPSK	3	0.757
28	sp P01857 IGHG1_HUMAN	180	1.00	78.40	1	9	TKPREEQYN(1)STYR	3	-0.440
29	sp P01859 IGHG2_HUMAN	176	1.00	179.19	1	9	TKPREEQFN(1)STFR	2	0.521
30	sp P01871 IGHM_HUMAN	209	1.00	99.96	1	7	GLTFQQN(1)ASSMCVPDQDTAIR	3	-0.613
31	sp P01871 IGHM_HUMAN	439	1.00	49.53	1	9	STGKPTLYN(1)VSLVMSDAGTCY	3	0.716
32	sp P01876 IGHA1_HUMAN	340	1.00	43.16	1	13	TIDRLAGKPTHVN(1)VSVMMAEVDGTCY	4	-0.292
33	sp P01876 IGHA1_HUMAN;sp P01877 IGHA2_HUMAN	144;131	1.00	285.65	1	13	PALEDLLLGSEAN(1)LTCTLTGLR	2	-1.376
34	sp P01877 IGHA2_HUMAN	92	1.00	77.58	1	4	HYTN(1)PSQDVTVPVPPPPPCCHPR	3	-0.899
35	sp P01877 IGHA2_HUMAN	205	1.00	40.35	1	6	TPLTN(1)ITK	2	-0.397
36	sp P01880 IGHD_HUMAN	367	1.00	67.04	1	4	TLLN(1)ASR	2	-0.089
37	sp P01903 DRA_HUMAN	143	1.00	56.40	1	7	FTPPVVN(1)VTWLR	2	0.837
38	sp P02749 APOH_HUMAN	162	1.00	46.48	1;2	8	VYKPSAGN(1)N(1)SLYR	3	0.631
39	sp P02749 APOH_HUMAN	253	1.00	46.89	1	3	LGN(1)WSAMPSCK	2	-0.753
40	sp P02750 A2GL_HUMAN	186	1.00	85.38	1	8	LPPGLLN(1)FTLLR	2	1.124
41	sp P02750 A2GL_HUMAN	325	1.00	42.11	1	5	MFSQN(1)DTR	2	0.575
42	sp P02751 FINC_HUMAN	1007	1.00	48.63	1	11	LDAPTN(0.001)LQFVN(0.999)ETDSTVLVR	2	0.264
43	sp P02765 FETUA_HUMAN	156	1.00	89.40	1	12	VCQDCPLLAPLN(1)DTR	2	-1.171
44	sp P02788 TRFL_HUMAN	156	1.00	62.20	1;2	16	TAGWN(1)VPIGTLRPFLN(1)WTGPPEIEAAVAR	2	2.384
45	sp P02788 TRFL_HUMAN	497	1.00	79.51	1;2	13	TAGWN(1)IPMGLLFN(1)QTGSK	3	2.918

46	sp P02788 TRFL_HUMAN	642	1.00	73.28	1	1	N(1)GSDCPDKFCLFQSETK	3	0.097
47	sp P02790 HEMO_HUMAN	453	1.00	105.86	1	7	ALPQPQN(1)VTSLLGCTH	2	0.380
48	sp P04062 GLCM_HUMAN	309	1.00	54.60	1	8	DLGPTLAN(1)STHHNVR	3	-0.091
49	sp P04114 APOB_HUMAN	1523	1.00	40.59	1	2	FN(1)SSYLQGTNQITGR	2	-0.455
50	sp P04114 APOB_HUMAN	3465	1.00	51.09	1	4	YDFN(1)SSMLYSTAK	2	-1.426
51	sp P05090 APOD_HUMAN	98	1.00	49.62	1	16	ADGTVN(0.002)QIEGEATPVN(0.998)LTEPAKLEVK	3	-2.350
52	sp P05155 IC1_HUMAN	238	1.00	49.10	1	5	DTFVN(1)ASR	2	0.220
53	sp P05156 CFAI_HUMAN	103	0.50	44.31	1	4	FLN(0.5)N(0.5)GTCTAEGK	2	-0.452
54	sp P05362 ICAM1_HUMAN	145	1.00	43.25	1	2	AN(1)LTVVLLR	2	0.057
55	sp P05997 CO5A2_HUMAN	1400	1.00	55.55	1	5	EASQN(1)ITYICK	2	-2.402
56	sp P06858 LIPL_HUMAN	70	1.00	48.18	1	26	TPEDTAEDTCHLIPGVAESVATCHFN(1)HSSK	5	-0.879
57	sp P07339 CATD_HUMAN	263	1.00	93.60	1	7	GSLSYLN(1)VTR	2	-0.477
58	sp P07602 SAP_HUMAN	80	1.00	86.86	1	13	DVVTAGDMLKDN(1)ATEEEILVYLEK	3	1.172
59	sp P07602 SAP_HUMAN	215	1.00	51.82	1	2	TN(1)STFVQALVEHVKEECDR	4	-1.201
60	sp P07602 SAP_HUMAN	426	1.00	45.92	1	5	N(0.001)LEKN(0.999)STKQEILAALEK	2	-0.443
61	sp P07996 TSP1_HUMAN;CON Q28194	1067	1.00	83.00	1	3	VVN(1)STTGPGELHR	2	0.079
62	sp P08571 CD14_HUMAN	151	1.00	101.97	1	3	LRN(1)VSWATGR	3	0.031
63	sp P08571 CD14_HUMAN	282	1.00	45.78	2	11	CMWSSALN(1)SLN(1)LSFAGLEQVPK	3	0.188
64	sp P0C0L4 CO4A_HUMAN;sp P 0C0L5 CO4B_HUMAN	226	1.00	55.59	1	8	FSDGLESN(1)SSTQFEVKK	3	-0.917
65	sp P0C0L4 CO4A_HUMAN;sp P 0C0L5 CO4B_HUMAN	1328	1.00	169.09	1	3	GLN(1)VTLSSSTGR	2	-0.581
66	sp P10909 CLUS_HUMAN	86	1.00	45.14	1	7	KKEDALN(1)ETR	2	1.951
67	sp P10909 CLUS_HUMAN	103	1.00	74.06	1	9	LKELPGVCN(1)ETMMALWEECKPCLK	4	-0.315
68	sp P10909 CLUS_HUMAN	354	1.00	65.47	1;2; 3	3	MLN(1)TSSLLEQLN(1)EQFN(1)WVSR	3	-1.098
69	sp P10909 CLUS_HUMAN	374	1.00	170.72	1	3	LAN(1)LTQGEDQYYLR	2	-0.482
70	sp P10909 CLUS_HUMAN	291	1.00	97.60	1	2	HN(1)STGCLR	2	-0.901
71	sp P11047 LAMC1_HUMAN	649	0.50	40.00	1	3	LLN(0.5)N(0.5)LTSIK	2	1.426
72	sp P11047 LAMC1_HUMAN	650	0.86	60.44	1	4	LLN(0.145)N(0.855)LTSIK	2	1.442
73	sp P11279 LAMP1_HUMAN	103	1.00	43.31	1	7	GHTLTN(1)FTR	3	-0.363

74	sp P12821 ACE_HUMAN	445	1.00	61.35	1	3	VTN(1)DTESDINYLLK	2	-3.019
75	sp P12821 ACE_HUMAN	714	1.00	93.49	1	9	KFDVNQLQN(1)TTIKR	3	0.550
76	sp P13671 CO6_HUMAN	324	1.00	52.68	1	3	VLN(1)FTTK	2	-0.063
77	sp P15144 AMPN_HUMAN	128	1.00	40.59	1	3	KLN(1)YTLSQGHR	3	-0.576
78	sp P15144 AMPN_HUMAN	234	1.00	56.23	1	4	AEFN(1)ITLIHPK	3	-0.840
79	sp P15328 FOLR1_HUMAN	161	1.00	66.69	1	3	GWN(1)WTSGFNK	2	-0.498
80	sp P15509 CSF2R_HUMAN	195	1.00	111.74	1	6	NYFLVN(1)GTSR	2	0.287
81	sp P16278 BGAL_HUMAN	464	1.00	45.37	1	7	NNVITLN(1)ITGK	2	-0.486
82	sp P16671 CD36_HUMAN	220	1.00	54.26	2	7	VFN(1)GKDN(1)ISK	3	-0.145
83	sp P16671 CD36_HUMAN	321	1.00	73.46	1	5	IISKN(1)CTSYGVLDISK	3	-0.153
84	sp P16671 CD36_HUMAN	417	1.00	84.51	1;2	10	N(1)YIVPILWLN(1)ETGTIGDEK	2	-0.475
85	sp P19440 GGT1_HUMAN	511	1.00	59.61	1;2	8	LHN(1)QLLPN(1)VTTVER	3	0.482
86	sp P20061 TCO1_HUMAN	216	1.00	71.15	1	8	ADEGSLKN(1)ISYTK	2	0.785
87	sp P20061 TCO1_HUMAN	369	1.00	59.54	1	2	MN(1)DTIFGFTMEER	2	-0.075
88	sp P22079 PERL_HUMAN	358	1.00	59.19	1	9	KPSPCEFIN(1)TTAR	3	0.171
89	sp P22897 MRC1_HUMAN	104	1.00	46.16	1	5	WECKN(1)DTLLGIK	2	-0.703
90	sp P22897 MRC1_HUMAN	1205	1.00	63.76	1	5	TAHCN(1)ESFYFLCKR	4	-1.387
91	sp P23280 CAH6_HUMAN	67	0.98	42.36	2	3	GLN(0.977)MTGYETQAGEFPMVN(0.164)N(0.859)GHTVQIS LPSTMR	3	1.762
92	sp P23280 CAH6_HUMAN	83	0.88	49.97	2	19	GLN(0.92)MTGYETQAGEFPMVN(0.204)N(0.876)GHTVQISL PSTMR	3	2.520
93	sp P23280 CAH6_HUMAN	256	1.00	74.94	1	10	LENSLLDHRN(1)K	3	0.026
94	sp P24821 TENA_HUMAN	1018	1.00	54.37	1	4	YRLN(1)YSLPTGQWVGVLPR	3	-0.478
95	sp P24821 TENA_HUMAN	1093	1.00	46.66	1	2	LN(1)WTAADQAYEHFIIQVQEANKVEAAR	4	-1.569
96	sp P24821 TENA_HUMAN	1119	1.00	59.31	1	6	VEAARN(1)LTVPGLSLR	3	0.774
97	sp P24821 TENA_HUMAN	1392	1.00	123.80	1	6	VEAAQN(1)LTLPGLSLR	2	0.936
98	sp P24821 TENA_HUMAN	1485	1.00	89.55	1	8	LLETVEYN(1)ISGAER	2	-0.810
99	sp P25311 ZA2G_HUMAN	109	1.00	82.01	1;2	7	DIVEYYN(1)DSN(1)GSHVLQGR	3	-1.743
100	sp P43251 BTD_HUMAN	119	1.00	92.99	1	16	DVQIIVFPEDGIHGFN(1)FTR	3	-0.070
101	sp P43652 AFAM_HUMAN	33	0.87	46.16	1	6	DIEN(0.135)FN(0.865)STQK	2	1.180

102	sp P43652 AFAM_HUMAN	402	1.00	45.16	1	7	YAEDKFN(1)ETTEK	2	0.573
103	sp P47710 CASA1_HUMAN	29	1.00	166.24	1	3	LQN(1)PSESSEPIPLESR	2	0.303
104	sp P47710 CASA1_HUMAN	69	1.00	43.55	1;2	1	N(1)ESTQN(1)CVVAEPEKMESSISSSSEMSLSK	3	2.510
105	sp P47989 XDH_HUMAN	705	0.50	55.91	1	1	N(0.5)N(0.5)SFYGPCLK	2	-1.146
106	sp P49327 FAS_HUMAN	2463	1.00	57.16	1	14	TGGAYGEDLGADYN(1)LSQVCDGK	2	0.354
107	sp P53634 CATC_HUMAN	53	1.00	44.31	1	3	DVN(1)CSVMGPQEK	2	-2.676
108	sp P54802 ANAG_HUMAN	261	1.00	49.42	1	6	VFPQVN(1)VTK	2	-1.021
109	sp P55058 PLTP_HUMAN	64	1.00	70.10	1	7	EGHFFYN(1)ISEVK	2	-1.750
110	sp P55058 PLTP_HUMAN	143	1.00	53.68	1	3	VSN(1)VSCQASVSR	2	-0.602
111	sp P55058 PLTP_HUMAN	398	1.00	49.97	1	4	IYSN(1)HSALESALIPQAPLK	3	0.522
112	sp P60709 ACTB_HUMAN	12	1.00	88.19	1	11	DDIAALVVDN(1)GSGMCK	2	1.758
113	sp P80188 NGAL_HUMAN	85	1.00	65.31	1	3	SYN(1)VTSVLFR	2	0.883
114	sp Q02809 PLOD1_HUMAN	197	1.00	47.60		4	EQIN(1)ITLDHR	2	-1.387
115	sp Q08380 LG3BP_HUMAN	69	1.00	111.06	1	6	ALGFEN(1)ATQALGR	2	-1.069
116	sp Q08380 LG3BP_HUMAN	125	1.00	46.82	1	8	DAGVVCTN(1)ETR	2	0.028
117	sp Q08380 LG3BP_HUMAN	398	1.00	78.10	1	5	YKGLN(1)LTEDTYKPR	2	0.655
118	sp Q08380 LG3BP_HUMAN	551	1.00	150.81	1	10	AAIPSALDTN(1)SSK	2	0.125
119	sp Q08380 LG3BP_HUMAN	580	1.00	90.15	1	10	TVIRPFYLTN(1)SSGVD	2	-0.066
120	sp Q08431 MFGM_HUMAN	325	1.00	93.96	1	5	VAYSN(1)DSANWTEYQDPR	2	-0.422
121	sp Q13410 BT1A1_HUMAN	55	1.00	168.22	1	4	LSPN(1)ASAEHLELR	2	-0.102
122	sp Q13410 BT1A1_HUMAN	215	1.00	50.88	1	6	DTSKN(0.999)VSCYIQN(0.001)LLLGQEK	3	0.091
123	sp Q13510 ASAH1_HUMAN	259	1.00	52.79		5	TVLEN(1)STSYEEAK	2	0.526
124	sp Q5JPE7 NOMO2_HUMAN	618	1.00	45.16	1	7	ENVGIYN(1)LSK	2	0.384
125	sp Q6UX06 OLFM4_HUMAN	136	1.00	73.98	1	3	LLN(1)LTVR	2	-0.437
126	sp Q6WN34 CRDL2_HUMAN	114	1.00	41.76	1	5	SCQHN(1)GTMYQHGEIFSAHELFPSPR	5	-1.157
127	sp Q86SQ4 AGRG6_HUMAN	143	1.00	79.12	1	3	GFN(1)ASYIR	2	-0.217
128	sp Q8IWU5 SULF2_HUMAN	171	1.00	129.40	1	3	FYN(1)YTLCR	2	-2.355
129	sp Q8NB4 GOLM1_HUMAN	109	1.00	45.16	1	6	AVLVN(1)N(1)ITTGER	2	1.960
130	sp Q99102 MUC4_HUMAN	1685	1.00	52.48	1	1	N(1)ASIGLHTR	2	0.352

131	sp Q99102 MUC4_HUMAN	1809	1.00	77.68	1	3	VGN(1)SSLEVAGCK	2	0.334
132	sp Q99102 MUC4_HUMAN	2049	1.00	90.11	1	6	DVTALN(1)VSTLK	2	0.499
133	sp Q99523 SORT_HUMAN	162	0.99	161.63	1	7	DITDLN(0.995)N(0.005)TFIR	2	0.607
134	sp Q99538 LGMN_HUMAN	167	1.00	40.73	1	3	DLN(1)ETIHYMYK	3	-0.226
135	sp Q9H173 SIL1_HUMAN	193	1.00	111.52	1	6	LINKFN(1)SSSSSLEEK	2	-1.502
136	sp Q9NRA1 PDGFC_HUMAN	55	1.00	48.11	1	7	IITVSTN(1)GSIHSPR	3	2.150
137	sp Q9UN76 S6A14_HUMAN	302	1.00	46.84	1	11	GISYYIGAQSN(1)FTK	2	0.496
138	sp Q9Y4L1 HYOU1_HUMAN	515	1.00	120.12	1	6	VFGSQN(1)LTTVK	2	-0.080
139	sp Q9Y4L1 HYOU1_HUMAN	931	1.00	66.26	1	6	AEPPLN(1)ASASDQGEK	2	-0.986

Tablo Ek11. Anne sütü glikoproteomik analizleri sonucu tespit edilen glikopeptitlerin listesi.

	Protein	Modified Peptide	Observed Modifications	Glycosylation Regio	Charge	Retention	Observed M/Z	Calculated M/Z	Delta Mass	Expectation	Protein Start	Protein End	Best Score with Delta Mass	Best Score with out Delta Mass
1	sp P01011 AAT_HUMAN	LINDYVKN[1883]GTR	dHex(1)Hex(5)HexNAc(4)(1768.639500)	Asn186	3	2578.727	1021.118	1021.117	-0.0009	0.004712	178	189	18.80732	18.80188
2	sp P01009 A1AT_HUMAN	YLGN[1737]ATAIFFLPDEGK	Hex(5)HexNAc(4)(1622.581600)	Asn271	3	6412.566	1126.83	1126.83	0.0004	6.98E-06	267	283	25.17377	28.12417
3	sp P01009 A1AT_HUMAN	YLGN[2028]ATAIFFLPDEGK	Hex(5)HexNAc(4)NeuAc(1)(1913.677000)	Asn271	3	7642.51	1223.864	1223.862	-0.0016	0.001976	267	283	12.31703	12.31703
4	sp P01009 A1AT_HUMAN	YLGN[2319]ATAIFFLPDEGK	Hex(5)HexNAc(4)NeuAc(2)(2204.772400)	Asn271	3	8449.312	1320.897	1320.894	-0.0032	0.002095	267	283	12.21502	12.21502
5	sp Q13410 BT1A1_HUMAN	LSPN[1883]ASAEHLELR	dHex(1)Hex(5)HexNAc(4)(1768.639500)	Asn55	3	3061.965	1069.135	1069.134	-0.0005	4.08E-05	51	64	29.54384	31.05725
6	sp Q13410 BT1A1_HUMAN	LSPN[2029]ASAEHLELR	dHex(2)Hex(5)HexNAc(4)(1914.697400)	Asn55	3	3035.335	1117.821	1117.82	-0.0003	0.000159	51	64	23.18353	25.6985

7	sp Q13410 BT1 A1_HUMAN	LSPN[2174]ASAEHLELR	dHex(1)Hex(5)HexNAc(4)Ne uAc(1)(2059.734900)	Asn55	3	3706. 842	1166. 168	1166. 166	- 0.0 016	2.31E- 06	51	64	31.0 4364	31.0 4364
8	sp Q13410 BT1 A1_HUMAN	LSPN[2465]ASAEHLELR	dHex(1)Hex(5)HexNAc(4)Ne uAc(2)(2350.830300)	Asn55	3	4562. 1	1263. 199	1263. 198	- 0.0 012	0.0008 65	51	64	18.4 0867	20.7 5247
9	sp Q13410 BT1 A1_HUMAN	N[1737]VSCYIQNLLLGQEK	Hex(5)HexNAc(4)(1622.5816 00)	Asn215	3	6139. 747	1134. 504	1134. 502	- 0.0 016	0.0018 46	214	229	18.4 3551	18.4 3551
10	sp P10909 CLU S_HUMAN	HN[1737]STGCLR	Hex(5)HexNAc(4)(1622.5816 00)	Asn291	3	1446. 435	856.3 445	856.3 443	- 0.0 002	1.36E- 06	289	297	22.5 4413	26.9 6318
11	sp P10909 CLU S_HUMAN	HN[1883]STGCLR	dHex(1)Hex(5)HexNAc(4)(17 68.639500)	Asn291	3	1446. 332	905.0 306	905.0 302	- 0.0 004	6.91E- 07	289	297	27.0 0388	34.1 4381
12	sp P10909 CLU S_HUMAN	LAN[1883]LTQGEDQYYLR	dHex(1)Hex(5)HexNAc(4)(17 68.639500)	Asn374	3	4316. 06	1151. 498	1151. 496	- 0.0 018	2.39E- 06	371	385	25.5 6281	28.9 9012
13	sp P10909 CLU S_HUMAN	LAN[2029]LTQGEDQYYLR	dHex(2)Hex(5)HexNAc(4)(19 14.697400)	Asn374	3	4285. 211	1200. 183	1200. 182	- 0.0 015	0.0046 51	371	385	8.34 3456	10.8 3003
14	sp P10909 CLU S_HUMAN	LAN[2174]LTQGEDQYYLR	dHex(1)Hex(5)HexNAc(4)Ne uAc(1)(2059.734900)	Asn374	3	5244. 585	1248. 53	1248. 528	- 0.0 021	3.07E- 05	371	385	25.5 5192	25.5 5192
15	sp P01024 CO3 _HUMAN	TVLTPATNHMG[N1330]VTFTI PANR	Hex(5)HexNAc(2)(1216.4228 00)	Asn85	3	4602. 866	1157. 869	1157. 866	- 0.0 03	0.0013 53	73	94	15.9 7916	17.9 7566
16	sp P01024 CO3 _HUMAN	TVLTPATNHMG[N1493]VTFTI PANR	Hex(6)HexNAc(2)(1378.4756 00)	Asn85	3	4595. 149	1211. 885	1211. 883	- 0.0 011	1.79E- 11	73	94	47.9 5737	50.4 9003
17	sp P01024 CO3 _HUMAN	TVLTPATNHMG[N1655]VTFTI PANR	Hex(7)HexNAc(2)(1540.5285 00)	Asn85	3	4573. 748	1265. 902	1265. 901	- 0.0 013	1.11E- 10	73	94	36.3 484	46.3 2388
18	sp P01024 CO3 _HUMAN	TVLTPATNHMG[N1817]VTFTI PANR	Hex(8)HexNAc(2)(1702.5813 00)	Asn85	3	4545. 349	1319. 919	1319. 919	- 0.0 006	0.0010 11	73	94	17.4 8135	15.5 0168
19	sp Q08380 LG3 BP_HUMAN	AAIPSALDTN[1883]SSK	dHex(1)Hex(5)HexNAc(4)(17 68.639500)	Asn551	3	3114. 009	1015. 105	1015. 104	- 0.0 007	0.0016 07	541	554	13.3 689	19.6 7614

20	sp P19440 GGT1_HUMAN	LHNQLLPN[1737]VTTVER	Hex(5)HexNAc(4)(1622.581600)	Asn511	3	3687.614	1086.168	1086.166	-0.0018	0.006894	503	517	16.14631	14.57568
21	sp P00738 HPT_HUMAN	VVLHPN[1737]YSQVDIGLIK	Hex(5)HexNAc(4)(1622.581600)	Asn241	3	4680.831	1139.87	1139.869	-0.0011	0.00877	235	251	15.53835	16.7281
22	sp P00738 HPT_HUMAN	VVLHPN[2028]YSQVDIGLIK	Hex(5)HexNAc(4)NeuAc(1)(1913.677000)	Asn241	3	5391.796	1236.902	1236.901	-0.0012	0.032359	235	251	14.46077	14.34637
23	sp P01876 IGHA1_HUMAN	LAGKPTHVN[1330]VSVVM[147]AEVDGTCY	Hex(5)HexNAc(2)(1216.422800)	Asn340	3	4167.189	1193.859	1193.858	-0.0011	0.000204	331	353	16.26054	14.79547
24	sp P01876 IGHA1_HUMAN	LAGKPTHVN[1330]VSVVMAEVDGTCY	Hex(5)HexNAc(2)(1216.422800)	Asn340	3	4920.939	1188.528	1188.527	-0.0011	6.00E-14	331	353	60.41325	55.06082
25	sp P01876 IGHA1_HUMAN	LAGKPTHVN[1477]VSVVM[147]AEVDGTCY	dHex(1)Hex(5)HexNAc(2)(1362.480700)	Asn340	3	4919.075	1242.545	1242.544	-0.0004	0.00988	331	353	9.521404	9.521404
26	sp P01876 IGHA1_HUMAN	LAGKPTHVN[1493]VSVVMAEVDGTCY	Hex(6)HexNAc(2)(1378.475600)	Asn340	3	4903.548	1242.545	1242.544	-0.0011	7.00E-14	331	353	61.13898	53.07642
27	sp P01876 IGHA1_HUMAN	LAGKPTHVN[1616]VSVVMAEVDGTCY	Hex(3)HexNAc(5)(1501.555300)	Asn340	3	4949.385	1283.572	1283.571	-0.0009	2.08E-05	331	353	25.23028	23.32189
28	sp P01876 IGHA1_HUMAN	LAGKPTHVN[1639]VSVVM[147]AEVDGTCY	dHex(1)Hex(6)HexNAc(2)(1524.533600)	Asn340	3	4872.533	1296.56	1296.562	0.0021	0.003986	331	353	11.09825	9.479748
29	sp P01876 IGHA1_HUMAN	LAGKPTHVN[1655]VSVVMAEVDGTCY	Hex(7)HexNAc(2)(1540.528500)	Asn340	3	4892.816	1296.563	1296.562	-0.0011	1.40E-05	331	353	20.9111	18.8416
30	sp P01876 IGHA1_HUMAN	LAGKPTHVN[1762]VSVVMAEVDGTCY	dHex(1)Hex(3)HexNAc(5)(1647.613200)	Asn340	3	4968.677	1332.258	1332.257	-0.0013	7.24E-07	331	353	31.95961	34.0607
31	sp P01876 IGHA1_HUMAN	LAGKPTHVN[1778]VSVVMAEVDGTCY	Hex(4)HexNAc(5)(1663.608100)	Asn340	3	4916.28	1337.589	1337.588	-0.001	0.000482	331	353	21.76771	21.63261
32	sp P01876 IGHA1_HUMAN	LAGKPTHVN[1817]VSVVMAEVDGTCY	Hex(8)HexNAc(2)(1702.581300)	Asn340	3	4878.402	1350.578	1350.579	0.0012	0.001178	331	353	13.21589	11.73028
33	sp P01876 IGHA1_HUMAN	LAGKPTHVN[1908]VSVVM[147]AEVDGTCY	dHex(2)Hex(3)HexNAc(5)(1793.671100)	Asn340	3	4914.503	1386.276	1386.274	-0.0013	0.000762	331	353	14.90561	19.97271
34	sp P01876 IGHA1_HUMAN	LAGKPTHVN[1924]VSVVMAEVDGTCY	dHex(1)Hex(4)HexNAc(5)(1809.666000)	Asn340	3	4918.512	1386.276	1386.274	-0.0012	1.60E-06	331	353	31.68283	27.40562

35	sp P01877 IGHA2_HUMAN	LSLHRPALEDLLLGSEAN[1330]LTCTLTGLR	Hex(5)HexNAc(2)(1216.422800)	Asn131	3	6993.11	1394.011	1394.012	0.001	3.16E-10	113	140	46.49977	41.19134
36	sp P01877 IGHA2_HUMAN	LSLHRPALEDLLLGSEAN[1493]LTCTLTGLR	Hex(6)HexNAc(2)(1378.475600)	Asn131	3	6934.833	1448.029	1448.029	0.005	5.94E-10	113	140	45.40573	37.83833
37	sp P01877 IGHA2_HUMAN	LSLHRPALEDLLLGSEAN[1616]LTCTLTGLR	Hex(3)HexNAc(5)(1501.555300)	Asn131	3	6991.775	1489.055	1489.056	0.005	7.20E-10	113	140	43.07044	37.97156
38	sp P01877 IGHA2_HUMAN	LSLHRPALEDLLLGSEAN[1655]LTCTLTGLR	Hex(7)HexNAc(2)(1540.528500)	Asn131	3	6912.063	1502.047	1502.047	0.003	9.22E-10	113	140	42.64109	40.13407
39	sp P01877 IGHA2_HUMAN	LSLHRPALEDLLLGSEAN[1696]LTCTLTGLR	Hex(6)HexNAc(3)(1581.555000)	Asn131	3	6927.177	1515.719	1515.723	0.033	7.01E-07	113	140	32.11658	29.74567
40	sp P01877 IGHA2_HUMAN	LSLHRPALEDLLLGSEAN[1737]LTCTLTGLR	Hex(5)HexNAc(4)(1622.581600)	Asn131	3	6956.769	1529.4	1529.398	-0.0022	1.27E-05	113	140	21.09113	21.09113
41	sp P01877 IGHA2_HUMAN	LSLHRPALEDLLLGSEAN[1778]LTCTLTGLR	Hex(4)HexNAc(5)(1663.608100)	Asn131	3	6936.684	1543.07	1543.074	0.035	2.28E-08	113	140	38.06541	35.70634
42	sp P01877 IGHA2_HUMAN	LSLHRPALEDLLLGSEAN[1817]LTCTLTGLR	Hex(8)HexNAc(2)(1702.581300)	Asn131	3	6896.919	1556.064	1556.065	0.001	2.14E-08	113	140	32.18278	29.91605
43	sp P01877 IGHA2_HUMAN	LSLHRPALEDLLLGSEAN[1979]LTCTLTGLR	Hex(9)HexNAc(2)(1864.634100)	Asn131	3	6886.525	1610.083	1610.082	-0.0006	8.76E-08	113	140	29.73057	27.54945
44	sp P01877 IGHA2_HUMAN	MAGKPTHVN[1355]VSVVMAEVDGTCY	dHex(1)Hex(3)HexNAc(3)(1241.454500)	Asn327	3	6013.196	1202.862	1202.856	-0.0058	0.007337	318	340	10.03849	10.03849
45	sp P01877 IGHA2_HUMAN	TPLTAN[1152]ITK	dHex(1)Hex(3)HexNAc(2)(1038.375100)	Asn205	2	2711.614	998.9691	998.9696	0.0005	0.001137	199	208	11.6558	13.27778
46	sp P01877 IGHA2_HUMAN	TPLTAN[1355]ITK	dHex(1)Hex(3)HexNAc(3)(1241.454500)	Asn205	2	2685.921	1100.515	1100.509	-0.0052	0.006095	199	208	14.32765	17.36086
47	sp P01877 IGHA2_HUMAN	TPLTAN[1413]ITK	Hex(3)HexNAc(4)(1298.475900)	Asn205	2	2695.558	1129.02	1129.02	0.0004	8.18E-06	199	208	19.02737	26.84831
48	sp P01877 IGHA2_HUMAN	TPLTAN[1518]ITK	dHex(1)Hex(4)HexNAc(3)(1403.507300)	Asn205	2	2677.943	1181.536	1181.536	0	0.081236	199	208	10.67943	11.86151
49	sp P01877 IGHA2_HUMAN	TPLTAN[1559]ITK	dHex(1)Hex(3)HexNAc(4)(1444.533800)	Asn205	2	2713.699	1202.05	1202.049	-0.0009	2.27E-08	199	208	32.45603	39.07933
50	sp P01877 IGHA2_HUMAN	TPLTAN[1616]ITK	Hex(3)HexNAc(5)(1501.555300)	Asn205	3	2713.816	820.7093	820.7088	-0.0005	4.64E-08	199	208	22.05178	35.83437
51	sp P01877 IGHA2_HUMAN	TPLTAN[1721]ITK	dHex(1)Hex(4)HexNAc(4)(1606.586600)	Asn205	2	2663.575	1283.078	1283.075	-0.0021	3.57E-07	199	208	29.46851	34.28904
52	sp P01877 IGHA2_HUMAN	TPLTAN[1762]ITK	dHex(1)Hex(3)HexNAc(5)(1647.613200)	Asn205	2	2743.262	1303.59	1303.589	-0.0014	5.64E-08	199	208	29.25053	38.49609
53	sp P01877 IGHA2_HUMAN	TPLTAN[1778]ITK	Hex(4)HexNAc(5)(1663.608100)	Asn205	3	2694.12	874.7272	874.7265	-0.0007	0.000142	199	208	17.17782	22.8937

54	sp P01877 IGHA2_HUMAN	TPLTAN[1883]ITK	dHex(1)Hex(5)HexNAc(4)(1768.639500)	Asn205	3	2643.417	909.7377	909.7369	-0.0008	6.56E-05	199	208	17.78305	23.23322
55	sp P01877 IGHA2_HUMAN	TPLTAN[1924]ITK	dHex(1)Hex(4)HexNAc(5)(1809.666000)	Asn205	3	2730.651	923.4127	923.4125	-0.0002	1.44E-07	199	208	29.11887	35.8635
56	sp P01877 IGHA2_HUMAN	TPLTAN[2012]ITK	dHex(1)Hex(4)HexNAc(4)NeuAc(1)(1897.682100)	Asn205	2	3500.978	1428.624	1428.623	-0.0012	0.00031	199	208	14.32364	15.53216
57	sp P01877 IGHA2_HUMAN	TPLTAN[2086]ITK	dHex(1)Hex(5)HexNAc(5)(1971.718800)	Asn205	3	2679.958	977.4305	977.43	-0.0005	1.23E-06	199	208	25.8292	32.14385
58	sp P01877 IGHA2_HUMAN	TPLTAN[2174]ITK	dHex(1)Hex(5)HexNAc(4)NeuAc(1)(2059.734900)	Asn205	3	3455.629	1006.769	1006.769	-0.0007	4.15E-05	199	208	19.29897	25.02989
59	sp P01877 IGHA2_HUMAN	TPLTAN[463]ITK	HexNAc(1)dHex(1)(349.137200)	Asn205	2	2810.902	654.3515	654.3507	-0.0008	0.048753	199	208	12.7482	12.58954
60	sp P01859 IGHG2_HUMAN	EEQFN[1559]STFR	dHex(1)Hex(3)HexNAc(4)(1444.533800)	Asn176	3	3119.309	868.0231	868.0235	0.0004	0.088257	171	180	13.71703	13.71703
61	sp P01871 IGHM_HUMAN	GLTFQQN[1762]ASSMCVPDQDTAIR	dHex(1)Hex(3)HexNAc(5)(1647.613200)	Asn209	3	4856.961	1329.568	1329.568	-0.0004	0.019033	202	223	8.382994	8.382994
62	sp P01871 IGHM_HUMAN	YKN[1518]NSDISSTR	dHex(1)Hex(4)HexNAc(3)(1403.507300)	Asn46	3	1452.8	896.7122	896.7132	0.001	0.017348	43	54	8.543413	8.543413
63	sp P01871 IGHM_HUMAN	YKN[1762]NSDISSTR	dHex(1)Hex(3)HexNAc(5)(1647.613200)	Asn46	3	1495.588	978.0819	978.0818	-1.00E-04	0.000178	43	54	14.38206	16.4992
64	sp P01591 IGJ_HUMAN	EN[1371]ISDPTSPLR	Hex(4)HexNAc(3)(1257.449400)	Asn71	2	3608.801	1243.538	1243.537	-0.0016	0.00646	69	80	16.2593	16.2593
65	sp P01591 IGJ_HUMAN	EN[1575]ISDPTSPLR	Hex(4)HexNAc(4)(1460.528700)	Asn71	3	3573.127	897.0533	897.0533	0	0.038994	69	80	14.13679	14.13679
66	sp P01591 IGJ_HUMAN	EN[1616]ISDPTSPLR	Hex(3)HexNAc(5)(1501.555300)	Asn71	3	3639.321	910.7301	910.7288	-0.0013	0.020079	69	80	14.09941	15.28969
67	sp P01591 IGJ_HUMAN	EN[1680]ISDPTSPLR	dHex(1)Hex(5)HexNAc(3)(1565.560100)	Asn71	3	3609.509	932.0649	932.0637	-0.0012	0.070024	69	80	12.11993	12.11993
68	sp P01591 IGJ_HUMAN	EN[1737]ISDPTSPLR	Hex(5)HexNAc(4)(1622.581600)	Asn71	3	3550.648	951.0711	951.0709	-0.0002	0.002497	69	80	20.71342	20.91063

69	sp P01591 IGJ_HUMAN	EN[1762]ISDPTSPLR	dHex(1)Hex(3)HexNAc(5)(1647.613200)	Asn71	3	3672.204	959.4151	959.4148	-0.0003	0.016769	69	80	8.602263	8.602263
70	sp P01591 IGJ_HUMAN	EN[1778]ISDPTSPLR	Hex(4)HexNAc(5)(1663.608100)	Asn71	3	3623.788	964.7472	964.7464	-0.0008	0.007392	69	80	16.02579	16.02579
71	sp P01591 IGJ_HUMAN	EN[1924]ISDPTSPLR	dHex(1)Hex(4)HexNAc(5)(1809.666000)	Asn71	3	3628.716	1013.433	1013.432	-0.0003	0.042194	69	80	10.1422	13.9996
72	sp P01591 IGJ_HUMAN	EN[2028]ISDPTSPLR	Hex(5)HexNAc(4)NeuAc(1)(1913.677000)	Asn71	3	4580.613	1048.103	1048.103	-1.00E-04	0.011201	69	80	16.30367	16.30367
73	sp P01591 IGJ_HUMAN	IIVPLNNREN[1355]ISDPTSPLR	dHex(1)Hex(3)HexNAc(3)(1241.454500)	Asn71	3	4696.941	1130.551	1130.549	-0.0019	0.07236	61	80	9.062777	7.557993
74	sp P01591 IGJ_HUMAN	IIVPLNNREN[1371]ISDPTSPLR	Hex(4)HexNAc(3)(1257.449400)	Asn71	3	4673.678	1135.88	1135.88	1.00E-04	0.141906	61	80	8.892877	7.933143
75	sp P01591 IGJ_HUMAN	IIVPLNNREN[1518]ISDPTSPLR	dHex(1)Hex(4)HexNAc(3)(1403.507300)	Asn71	3	4686.479	1184.567	1184.566	-0.0002	0.001061	61	80	21.39753	20.93417
76	sp P01591 IGJ_HUMAN	IIVPLNNREN[1534]ISDPTSPLR	Hex(5)HexNAc(3)(1419.502200)	Asn71	3	4665.904	1189.899	1189.898	-0.0006	0.01875	61	80	8.408598	6.572822
77	sp P01591 IGJ_HUMAN	IIVPLNNREN[1575]ISDPTSPLR	Hex(4)HexNAc(4)(1460.528700)	Asn71	3	4660.782	1203.576	1203.573	-0.0029	0.023618	61	80	12.00749	11.34325
78	sp P01591 IGJ_HUMAN	IIVPLNNREN[1616]ISDPTSPLR	Hex(3)HexNAc(5)(1501.555300)	Asn71	3	4679.61	1217.25	1217.249	-0.0013	0.091306	61	80	10.65814	8.67629
79	sp P01591 IGJ_HUMAN	IIVPLNNREN[1680]ISDPTSPLR	dHex(1)Hex(5)HexNAc(3)(1565.560100)	Asn71	3	4657.884	1238.585	1238.584	-0.0008	5.31E-05	61	80	23.6004	23.27825
80	sp P01591 IGJ_HUMAN	IIVPLNNREN[1721]ISDPTSPLR	dHex(1)Hex(4)HexNAc(4)(1606.586600)	Asn71	3	4632.01	1252.26	1252.259	-0.0006	0.205707	61	80	7.247157	6.462343
81	sp P01591 IGJ_HUMAN	IIVPLNNREN[1737]ISDPTSPLR	Hex(5)HexNAc(4)(1622.581600)	Asn71	3	4637.861	1257.592	1257.591	-0.0007	0.000998	61	80	19.50318	17.40113
82	sp P01591 IGJ_HUMAN	IIVPLNNREN[1762]ISDPTSPLR	dHex(1)Hex(3)HexNAc(5)(1647.613200)	Asn71	3	4695.505	1265.938	1265.935	-0.0028	0.084528	61	80	8.79249	6.470691
83	sp P01591 IGJ_HUMAN	IIVPLNNREN[1778]ISDPTSPLR	Hex(4)HexNAc(5)(1663.608100)	Asn71	3	4673.573	1271.268	1271.267	-0.0012	0.007023	61	80	14.11424	12.93445

84	sp P01591 IGJ_HUMAN	IIVPLNNREN[1809]ISDPTSPLR	dHex(1)Hex(4)HexNAc(3)NeuAc(1)(1694.602700)	Asn71	3	5391.46	1281.6	1281.598	- 0.0 017	0.0019 62	61	80	16.3 2996	16.0 6142
85	sp P01591 IGJ_HUMAN	IIVPLNNREN[1883]ISDPTSPLR	dHex(1)Hex(5)HexNAc(4)(17 68.639500)	Asn71	3	4655.468	1306.278	1306.277	- 0.0 011	0.0030 06	61	80	17.5 8838	17.0 9608
86	sp P01591 IGJ_HUMAN	IIVPLNNREN[1924]ISDPTSPLR	dHex(1)Hex(4)HexNAc(5)(18 09.666000)	Asn71	3	4639.175	1319.953	1319.953	- 0.0 006	0.1776 23	61	80	8.50 2226	7.86 0898
87	sp P01591 IGJ_HUMAN	IIVPLNNREN[1971]ISDPTSPLR	dHex(1)Hex(5)HexNAc(3)NeuAc(1)(1856.655500)	Asn71	3	5358.162	1335.616	1335.616	- 0.0 002	0.0104 41	61	80	13.4 2544	11.9 6133
88	sp P01591 IGJ_HUMAN	IIVPLNNREN[2028]ISDPTSPLR	Hex(5)HexNAc(4)NeuAc(1)(1 913.677000)	Asn71	3	5338.391	1354.624	1354.623	- 0.0 015	0.0040 97	61	80	14.0 505	11.4 2563
89	sp P01591 IGJ_HUMAN	IIVPLNNREN[2174]ISDPTSPLR	dHex(1)Hex(5)HexNAc(4)NeuAc(1)(2059.734900)	Asn71	3	5325.637	1403.311	1403.309	- 0.0 018	0.0164 34	61	80	11.6 3765	11.2 5258
90	sp Q08431 MFG M_HUMAN	FELLGCELNGCANPLGLKN[1 330]NSIPDK	Hex(5)HexNAc(2)(1216.4228 00)	Asn238	3	5881.702	1330.603	1330.601	- 0.0 021	0.0039 67	219	244	11.1 0654	11.1 0654
91	sp Q08431 MFG M_HUMAN	N[1330]NSIPDKQITASSSYK	Hex(5)HexNAc(2)(1216.4228 00)	Asn238	3	2481.678	990.4 386	990.4 378	- 0.0 008	5.23E- 07	237	253	30.4 219	33.6 2508
92	sp Q08431 MFG M_HUMAN	N[1493]NSIPDKQITASSSYK	Hex(6)HexNAc(2)(1378.4756 00)	Asn238	3	2447.706	1044.455	1044.456	0.0 002	1.20E- 06	237	253	28.2 9487	31.1 8321
93	sp Q08431 MFG M_HUMAN	N[1534]NSIPDKQITASSSYK	Hex(5)HexNAc(3)(1419.5022 00)	Asn238	3	2469.882	1058.132	1058.131	- 0.0 007	0.0057 11	237	253	5.00 9582	10.4 7373
94	sp Q08431 MFG M_HUMAN	N[1655]NSIPDKQITASSSYK	Hex(7)HexNAc(2)(1540.5285 00)	Asn238	3	2432.32	1098.474	1098.473	- 0.0 007	0.0002 66	237	253	10.2 592	15.8 0278
95	sp P02788 TRF L_HUMAN	N[1883]GSDCPDKFCLFQSET K	dHex(1)Hex(5)HexNAc(4)(17 68.639500)	Asn642	3	4168.53	1267.843	1267.843	- 0.0 004	8.91E- 06	641	658	21.3 0838	28.7 0134
96	sp P02788 TRF L_HUMAN	N[2029]GSDCPDKFCLFQSET K	dHex(2)Hex(5)HexNAc(4)(19 14.697400)	Asn642	3	4126.894	1316.529	1316.529	- 0.0 007	0.0018 18	641	658	12.4 6203	12.4 6203
97	sp P02788 TRF L_HUMAN	N[2174]GSDCPDKFCLFQSET K	dHex(1)Hex(5)HexNAc(4)NeuAc(1)(2059.734900)	Asn642	3	5072.925	1364.874	1364.875	0.0 004	0.0637 9	641	658	14.2 8194	14.2 8194
98	sp P02788 TRF L_HUMAN	TAGWNIPM[147]GLLFN[1924] QTGSK	dHex(1)Hex(4)HexNAc(5)(18 09.666000)	Asn497	3	4757.593	1307.563	1307.562	- 0.0 015	0.1090 81	484	503	13.3 4905	11.7 1542

99	sp P02788 TRF L_HUMAN	TAGWNIPMGLLFN[1330]QTG SCK	Hex(5)HexNAc(2)(1216.4228 00)	Asn497	3	6754. 423	1104. 484	1104. 482	- 0.0 016	1.54E- 10	484	503	48.7 5591	48.4 9645
100	sp P02788 TRF L_HUMAN	TAGWNIPMGLLFN[1371]QTG SCK	Hex(4)HexNAc(3)(1257.4494 00)	Asn497	3	6764. 485	1118. 158	1118. 158	1.0 0E- 04	1.93E- 05	484	503	22.0 5725	26.3 5943
101	sp P02788 TRF L_HUMAN	TAGWNIPMGLLFN[1518]QTG SCK	dHex(1)Hex(4)HexNAc(3)(14 03.507300)	Asn497	3	6691. 703	1166. 84	1166. 844	0.0 038	2.24E- 05	484	503	22.8 8448	25.1 012
102	sp P02788 TRF L_HUMAN	TAGWNIPMGLLFN[1534]QTG SCK	Hex(5)HexNAc(3)(1419.5022 00)	Asn497	3	6713. 417	1172. 177	1172. 176	- 0.0 01	0.0002 66	484	503	20.7 9922	20.7 1318
103	sp P02788 TRF L_HUMAN	TAGWNIPMGLLFN[1575]QTG SCK	Hex(4)HexNAc(4)(1460.5287 00)	Asn497	3	6716. 655	1185. 852	1185. 851	- 0.0 008	0.0017 61	484	503	10.8 8577	12.5 1745
104	sp P02788 TRF L_HUMAN	TAGWNIPMGLLFN[1696]QTG SCK	Hex(6)HexNAc(3)(1581.5550 00)	Asn497	3	6681. 538	1226. 193	1226. 193	0	0.0004 3	484	503	16.8 6387	20.9 6566
105	sp P02788 TRF L_HUMAN	TAGWNIPMGLLFN[1721]QTG SCK	dHex(1)Hex(4)HexNAc(4)(16 06.586600)	Asn497	3	6655. 474	1234. 538	1234. 537	- 0.0 009	2.72E- 06	484	503	25.0 2053	29.7 6425
106	sp P02788 TRF L_HUMAN	TAGWNIPMGLLFN[1737]QTG SCK	Hex(5)HexNAc(4)(1622.5816 00)	Asn497	3	6678. 65	1239. 868	1239. 869	0.0 002	4.31E- 08	484	503	40.9 6143	40.9 0353
107	sp P02788 TRF L_HUMAN	TAGWNIPMGLLFN[1809]QTG SCK	dHex(1)Hex(4)HexNAc(3)Ne uAc(1)(1694.602700)	Asn497	3	6485. 718	1263. 879	1263. 876	- 0.0 03	0.0040 9	484	503	14.0 2841	16.0 5313
108	sp P02788 TRF L_HUMAN	TAGWNIPMGLLFN[1883]QTG SCK	dHex(1)Hex(5)HexNAc(4)(17 68.639500)	Asn497	3	6603. 592	1288. 556	1288. 555	- 0.0 013	2.67E- 09	484	503	44.7 9678	44.7 5821
109	sp P02788 TRF L_HUMAN	TAGWNIPMGLLFN[2012]QTG SCK	dHex(1)Hex(4)HexNAc(4)Ne uAc(1)(1897.682100)	Asn497	3	7825. 021	1331. 57	1331. 569	- 0.0 012	0.0009 85	484	503	13.5 2662	13.3 7318
110	sp P02788 TRF L_HUMAN	TAGWNIPMGLLFN[2028]QTG SCK	Hex(5)HexNAc(4)NeuAc(1)(1 913.677000)	Asn497	3	7860. 258	1336. 901	1336. 9	- 1.0 0E- 04	0.0004 98	484	503	22.7 1246	22.6 7953
111	sp P02788 TRF L_HUMAN	TAGWNIPMGLLFN[2029]QTG SCK	dHex(2)Hex(5)HexNAc(4)(19 14.697400)	Asn497	3	6577. 718	1337. 242	1337. 241	- 0.0 014	0.0002 46	484	503	22.6 5479	24.9 3642
112	sp P02788 TRF L_HUMAN	TAGWNIPMGLLFN[2174]QTG SCK	dHex(1)Hex(5)HexNAc(4)Ne uAc(1)(2059.734900)	Asn497	3	7770. 726	1385. 588	1385. 586	- 0.0 014	3.87E- 07	484	503	37.1 5155	34.5 1176
113	sp P02788 TRF L_HUMAN	PFLN[1639]WTGPPEPIEAABA R	dHex(1)Hex(6)HexNAc(2)(15 24.533600)	Asn156	3	5369. 318	1163. 854	1163. 857	0.0 025	0.0761 2	152	170	10.0 4479	11.9 7447
114	sp P02788 TRF L_HUMAN	PFLN[1883]WTGPPEPIEAABA R	dHex(1)Hex(5)HexNAc(4)(17 68.639500)	Asn156	3	6247. 345	1245. 226	1245. 226	- 1.0 0E- 04	0.0016 28	152	170	12.6 5378	12.6 5378
115	sp P02788 TRF L_HUMAN	RTAGWNVPIGTLRPFLN[1883]WTGPPEPIEAABAR	dHex(1)Hex(5)HexNAc(4)(17 68.639500)	Asn156	3	6694. 117	1719. 153	1719. 155	0.0 02	0.0001	139	170	21.4 9285	21.4 9285

116	sp P02788 TRF L_HUMAN	TAGWNVPIGTLRPFLN[1883] WTGPPEIEAAVAR	dHex(1)Hex(5)HexNAc(4)(17 68.639500)	Asn156	3	7271. 005	1667. 124	1667. 122	- 0.0 026	2.10E- 08	140	170	40.2 1483	40.2 1483
117	sp P02788 TRF L_HUMAN	TAGWNVPIGTLRPFLN[2029] WTGPPEIEAAVAR	dHex(2)Hex(5)HexNAc(4)(19 14.697400)	Asn156	3	7236. 14	1715. 807	1715. 808	0.0 01	3.18E- 07	140	170	32.8 1526	35.4 8822
118	sp P02788 TRF L_HUMAN	TAGWNVPIGTLRPFLN[2174] WTGPPEIEAAVAR	dHex(1)Hex(5)HexNAc(4)Ne uAc(1)(2059.734900)	Asn156	3	8019. 869	1764. 153	1764. 153	0.0 006	1.11E- 06	140	170	32.3 2487	32.3 2487
119	sp P02750 A2G L_HUMAN	KLPPGLLAN[1883]FTLLR	dHex(1)Hex(5)HexNAc(4)(17 68.639500)	Asn186	3	5538. 976	1107. 873	1107. 87	- 0.0 023	0.0199 87	177	191	14.1 3867	16.2 9713
120	sp P11279 LAM P1_HUMAN	GHTLTLN[1330]FTR	Hex(5)HexNAc(2)(1216.4228 00)	Asn103	3	3238. 684	792.6 873	792.6 864	- 0.0 009	0.1277 91	96	106	11.0 7419	11.0 7419
121	sp P22897 MRC 1_HUMAN	TAHCN[1883]ESFYFLCK	dHex(1)Hex(5)HexNAc(4)(17 68.639500)	Asn120 5	3	3652. 465	1149. 125	1149. 125	- 0.0 004	0.0003 29	120 0	121 3	14.3 3244	15.4 2999
122	sp P22897 MRC 1_HUMAN	WECKN[1883]DTLLGIK	dHex(1)Hex(5)HexNAc(4)(17 68.639500)	Asn104	3	3685. 747	1082. 471	1082. 469	- 0.0 021	0.0003 85	99	111	15.1 5868	12.1 618
123	sp P08571 CD1 4_HUMAN	LRN[1330]VSWATGR	Hex(5)HexNAc(2)(1216.4228 00)	Asn151	3	2389. 056	792.6 909	792.6 901	- 0.0 008	0.1034 55	148	158	10.4 4186	10.4 4186
124	sp P08571 CD1 4_HUMAN	LRN[1737]VSWATGR	Hex(5)HexNAc(4)(1622.5816 00)	Asn151	3	2407. 813	928.0 766	928.0 764	- 0.0 002	0.0016 33	148	158	16.6 4809	16.6 4809
125	sp P08571 CD1 4_HUMAN	N[1330]VSWATGR	Hex(5)HexNAc(2)(1216.4228 00)	Asn151	2	2443. 732	1053. 939	1053. 939	0.0 002	0.0043 6	150	158	17.6 3792	18.9 4219
126	sp P01833 PIGR _HUMAN	IIEGEPNLKVPGN[1883]VTAV LGETLK	dHex(1)Hex(5)HexNAc(4)(17 68.639500)	Asn469	3	5781. 701	1387. 336	1387. 334	- 0.0 015	5.71E- 12	456	479	49.7 9969	55.4 7414
127	sp P01833 PIGR _HUMAN	IIEGEPNLKVPGN[2029]VTAV LGETLK	dHex(2)Hex(5)HexNAc(4)(19 14.697400)	Asn469	3	5756. 784	1436. 021	1436. 021	- 1.0 0E- 04	7.42E- 09	456	479	40.9 0631	41.0 1999
128	sp P01833 PIGR _HUMAN	IIEGEPNLKVPGN[2174]VTAV LGETLK	dHex(1)Hex(5)HexNAc(4)Ne uAc(1)(2059.734900)	Asn469	3	6485. 17	1484. 365	1484. 366	0.0 014	4.11E- 06	456	479	29.0 444	26.5 201
129	sp P01833 PIGR _HUMAN	LSLLEEPGN[1883]GTFTVILN QLTSR	dHex(1)Hex(5)HexNAc(4)(17 68.639500)	Asn421	3	7720. 402	1390. 985	1390. 982	- 0.0 025	3.25E- 09	412	434	40.4 4573	41.4 548

130	sp P01833 PIGR_HUMAN	QIGLYPVLVIDSSGYVNP[1737]YTGR	Hex(5)HexNAc(4)(1622.581600)	Asn186	3	8283.791	1383.301	1383.3	- 0.0015	0.01761	167	190	13.51752	4.525542
131	sp P01833 PIGR_HUMAN	QIGLYPVLVIDSSGYVNP[1883]YTGR	dHex(1)Hex(5)HexNAc(4)(1768.639500)	Asn186	3	8281.196	1431.986	1431.986	- 0.0003	0.000611	167	190	20.35597	7.238031
132	sp P01833 PIGR_HUMAN	VPGN[1883]VTAVLGETLK	dHex(1)Hex(5)HexNAc(4)(1768.639500)	Asn469	2	4783.096	1583.726	1583.723	- 0.0027	0.00234	465	479	12.09158	18.02309
133	sp P01833 PIGR_HUMAN	VPGN[2029]VTAVLGETLK	dHex(2)Hex(5)HexNAc(4)(1914.697400)	Asn469	3	4750.492	1104.839	1104.837	- 0.0021	0.009204	465	479	12.14744	15.64483
134	sp P01833 PIGR_HUMAN	VPGN[2174]VTAVLGETLK	dHex(1)Hex(5)HexNAc(4)NeuAc(1)(2059.734900)	Asn469	3	5791.428	1153.183	1153.183	- 0.0002	0.000437	465	479	13.99891	19.93704
135	sp P01833 PIGR_HUMAN	WN[1330]NTGCQALPSQDEG PSK	Hex(5)HexNAc(2)(1216.422800)	Asn499	3	3242.405	1069.103	1069.105	0.0015	4.65E-06	497	515	27.63998	27.83279
136	sp P01833 PIGR_HUMAN	WN[1371]NTGCQALPSQDEG PSK	Hex(4)HexNAc(3)(1257.449400)	Asn499	3	3258.947	1082.78	1082.78	- 0.0002	0.02174	497	515	8.151604	8.151604
137	sp P01833 PIGR_HUMAN	WN[1534]NTGCQALPSQDEG PSK	Hex(5)HexNAc(3)(1419.502200)	Asn499	3	3233.818	1136.799	1136.798	- 0.0007	0.002397	497	515	15.98171	15.98171
138	sp P01833 PIGR_HUMAN	WN[1737]NTGCQALPSQDEG PSK	Hex(5)HexNAc(4)(1622.581600)	Asn499	3	3230.201	1204.491	1204.491	- 1.00E-04	1.01E-06	497	515	32.03133	32.48772
139	sp P01833 PIGR_HUMAN	WN[2028]NTGCQALPSQDEG PSK	Hex(5)HexNAc(4)NeuAc(1)(1913.677000)	Asn499	3	4003.353	1301.524	1301.523	- 0.0012	0.008227	497	515	13.83985	13.83985
140	sp P02787 TRF_E_HUMAN	CGLVPVLAENYN[2086]K	dHex(1)Hex(5)HexNAc(5)(1971.718800)	Asn432	3	5244.124	1150.16	1150.162	0.0018	0.303389	420	433	9.572155	9.572155
141	sp P24821 TEN_A_HUMAN	LN[1330]YSLPTGQWVGVLPR	Hex(5)HexNAc(2)(1216.422800)	Asn1018	3	6202.865	1048.826	1048.825	- 0.0007	3.99E-11	1016	1033	45.63805	48.09613
142	sp P24821 TEN_A_HUMAN	LN[1493]YSLPTGQWVGVLPR	Hex(6)HexNAc(2)(1378.475600)	Asn1018	3	6187.318	1102.841	1102.843	0.0024	2.06E-10	1016	1033	46.24186	44.8522
143	sp P24821 TEN_A_HUMAN	LN[1655]YSLPTGQWVGVLPR	Hex(7)HexNAc(2)(1540.528500)	Asn1018	3	6146.419	1156.86	1156.861	0.0007	0.000456	1016	1033	20.54434	20.86619
144	sp P24821 TEN_A_HUMAN	LN[1817]YSLPTGQWVGVLPR	Hex(8)HexNAc(2)(1702.581300)	Asn1018	3	6131.419	1210.878	1210.878	0.0001	1.82E-07	1016	1033	34.45639	34.44615
145	sp P24821 TEN_A_HUMAN	N[1721]LTVPGSLR	dHex(1)Hex(4)HexNAc(4)(1606.586600)	Asn1261	3	3401.161	855.0509	855.0512	0.0003	0.125386	1118	1127	12.10753	12.10753

146	sp P24821 TEN A_HUMAN	N[1883]LTPVGSRL	dHex(1)Hex(5)HexNAc(4)(17 68.639500)	Asn126 1	3	3386. 752	909.0 699	909.0 688	- 0.0 011	1.01E- 05	111 8	112 7	25.8 1524	28.4 7578
147	sp P24821 TEN A_HUMAN	N[2174]LTPVGSRL	dHex(1)Hex(5)HexNAc(4)Ne uAc(1)(2059.734900)	Asn126 1	2	4361. 813	1508. 649	1508. 647	- 0.0 019	0.0063 31	111 8	112 7	16.2 947	16.2 947

Tablo Ek12. İnsan sütü glikoproteinlerine ait tespit edilen N-glikopeptitlerin göreceli bollukları.

	protein	peptide	glycan	glycosylation regio	exp1 %	exp2 %	avg. %	sd
1	sp P02788 TRFL_HUM AN	TAGWNVPIGTLRPFLN[1883]WTGPPEPI EAAVAR	dHex(1)Hex(5)HexNAc(4)(1768.639500)	Asn156	75.64	76.43	76.03	0.40
2	sp P02788 TRFL_HUM AN	TAGWNVPIGTLRPFLN[2174]WTGPPEPI EAAVAR	dHex(1)Hex(5)HexNAc(4)NeuAc(1)(2059.7 34900)	Asn156	24.36	23.57	23.97	0.40
1	sp P02788 TRFL_HUM AN	TAGWNIPMGLLFN[1330]QTGSCK	Hex(5)HexNAc(2)(1216.422800)	Asn497	5.41	5.09	5.25	0.16
2	sp P02788 TRFL_HUM AN	TAGWNIPMGLLFN[1371]QTGSCK	Hex(4)HexNAc(3)(1257.449400)	Asn497	2.31	1.34	1.83	0.48
3	sp P02788 TRFL_HUM AN	TAGWNIPMGLLFN[1721]QTGSCK	dHex(1)Hex(4)HexNAc(4)(1606.586600)	Asn497	3.16	3.40	3.28	0.12
4	sp P02788 TRFL_HUM AN	TAGWNIPMGLLFN[1737]QTGSCK	Hex(5)HexNAc(4)(1622.581600)	Asn497	12.28	11.76	12.02	0.26
5	sp P02788 TRFL_HUM AN	TAGWNIPMGLLFN[1883]QTGSCK	dHex(1)Hex(5)HexNAc(4)(1768.639500)	Asn497	59.37	54.70	57.04	2.33
6	sp P02788 TRFL_HUM AN	TAGWNIPMGLLFN[2028]QTGSCK	Hex(5)HexNAc(4)NeuAc(1)(1913.677000)	Asn497	2.90	3.61	3.26	0.36
7	sp P02788 TRFL_HUM AN	TAGWNIPMGLLFN[2174]QTGSCK	dHex(1)Hex(5)HexNAc(4)NeuAc(1)(2059.7 34900)	Asn497	14.56	20.08	17.32	2.76
1	sp P02788 TRFL_HUM AN	N[2029]GSDCPDKFCLFQSETK	dHex(2)Hex(5)HexNAc(4)(1914.697400)	Asn642	61.98	60.99	61.48	0.49
2	sp P02788 TRFL_HUM AN	N[2174]GSDCPDKFCLFQSETK	dHex(1)Hex(5)HexNAc(4)NeuAc(1)(2059.7 34900)	Asn642	38.02	39.01	38.52	0.49
1	sp P01876 IGHA1_HU MAN	LAGKPETHVN[1330]VSVVMAEVDGTCY	Hex(5)HexNAc(2)(1216.422800)	Asn340	36.57	32.78	34.67	1.90
2	sp P01876 IGHA1_HU MAN	LAGKPETHVN[1493]VSVVMAEVDGTCY	Hex(6)HexNAc(2)(1378.475600)	Asn340	18.65	21.59	20.12	1.47
3	sp P01876 IGHA1_HU MAN	LAGKPETHVN[1616]VSVVMAEVDGTCY	Hex(3)HexNAc(5)(1501.555300)	Asn340	5.41	5.33	5.37	0.04

4	sp P01876 IGHA1_HUMAN	LAGKPTHVN[1655]VSVVMAEVDGTCY	Hex(7)HexNAc(2)(1540.528500)	Asn340	3.41	2.76	3.08	0.33
5	sp P01876 IGHA1_HUMAN	LAGKPTHVN[1762]VSVVMAEVDGTCY	dHex(1)Hex(3)HexNAc(5)(1647.613200)	Asn340	15.59	15.58	15.59	0.00
6	sp P01876 IGHA1_HUMAN	LAGKPTHVN[1778]VSVVMAEVDGTCY	Hex(4)HexNAc(5)(1663.608100)	Asn340	5.87	6.05	5.96	0.09
7	sp P01876 IGHA1_HUMAN	LAGKPTHVN[1817]VSVVMAEVDGTCY	Hex(8)HexNAc(2)(1702.581300)	Asn340	2.27	1.84	2.06	0.21
8	sp P01876 IGHA1_HUMAN	LAGKPTHVN[1924]VSVVMAEVDGTCY	dHex(1)Hex(4)HexNAc(5)(1809.666000)	Asn340	12.22	14.07	13.15	0.92
1	sp P01877 IGHA2_HUMAN	LSLHRPALEDLLLGSEAN[1330]LTCTLTGLR	Hex(5)HexNAc(2)(1216.422800)	Asn131	7.12	8.25	7.69	0.56
2	sp P01877 IGHA2_HUMAN	LSLHRPALEDLLLGSEAN[1493]LTCTLTGLR	Hex(6)HexNAc(2)(1378.475600)	Asn131	8.38	8.16	8.27	0.11
3	sp P01877 IGHA2_HUMAN	LSLHRPALEDLLLGSEAN[1616]LTCTLTGLR	Hex(3)HexNAc(5)(1501.555300)	Asn131	58.84	55.78	57.31	1.53
4	sp P01877 IGHA2_HUMAN	LSLHRPALEDLLLGSEAN[1655]LTCTLTGLR	Hex(7)HexNAc(2)(1540.528500)	Asn131	8.80	7.66	8.23	0.57
5	sp P01877 IGHA2_HUMAN	LSLHRPALEDLLLGSEAN[1778]LTCTLTGLR	Hex(4)HexNAc(5)(1663.608100)	Asn131	11.37	9.04	10.21	1.16
6	sp P01877 IGHA2_HUMAN	LSLHRPALEDLLLGSEAN[1817]LTCTLTGLR	Hex(8)HexNAc(2)(1702.581300)	Asn131	4.93	6.99	5.96	1.03
7	sp P01877 IGHA2_HUMAN	LSLHRPALEDLLLGSEAN[1979]LTCTLTGLR	Hex(9)HexNAc(2)(1864.634100)	Asn131	0.55	4.11	2.33	1.78
1	sp P01877 IGHA2_HUMAN	TPLTAN[1152]ITK	dHex(1)Hex(3)HexNAc(2)(1038.375100)	Asn205	0.13	0.17	0.15	0.02
2	sp P01877 IGHA2_HUMAN	TPLTAN[1355]ITK	dHex(1)Hex(3)HexNAc(3)(1241.454500)	Asn205	0.25	0.21	0.23	0.02
3	sp P01877 IGHA2_HUMAN	TPLTAN[1616]ITK	Hex(3)HexNAc(5)(1501.555300)	Asn205	2.87	2.83	2.85	0.02
4	sp P01877 IGHA2_HUMAN	TPLTAN[1721]ITK	dHex(1)Hex(4)HexNAc(4)(1606.586600)	Asn205	1.41	2.56	1.99	0.57
5	sp P01877 IGHA2_HUMAN	TPLTAN[1762]ITK	dHex(1)Hex(3)HexNAc(5)(1647.613200)	Asn205	69.87	69.44	69.65	0.22
6	sp P01877 IGHA2_HUMAN	TPLTAN[1778]ITK	Hex(4)HexNAc(5)(1663.608100)	Asn205	1.09	1.15	1.12	0.03
7	sp P01877 IGHA2_HUMAN	TPLTAN[1883]ITK	dHex(1)Hex(5)HexNAc(4)(1768.639500)	Asn205	1.66	1.59	1.63	0.04
8	sp P01877 IGHA2_HUMAN	TPLTAN[1924]ITK	dHex(1)Hex(4)HexNAc(5)(1809.666000)	Asn205	12.26	10.33	11.30	0.97

9	sp P01877 IGHA2_HUMAN	TPLTAN[2012]ITK	dHex(1)Hex(4)HexNAc(4)NeuAc(1)(1897.682100)	Asn205	0.24	0.59	0.41	0.17
10	sp P01877 IGHA2_HUMAN	TPLTAN[2086]ITK	dHex(1)Hex(5)HexNAc(5)(1971.718800)	Asn205	9.53	10.21	9.87	0.34
11	sp P01877 IGHA2_HUMAN	TPLTAN[2174]ITK	dHex(1)Hex(5)HexNAc(4)NeuAc(1)(2059.734900)	Asn205	0.68	0.93	0.80	0.13
1	sp P01591 IGJ_HUMAN	IIVPLNNREN[1518]ISDPTSPLR	dHex(1)Hex(4)HexNAc(3)(1403.507300)	Asn71	9.75	8.74	9.24	0.50
2	sp P01591 IGJ_HUMAN	IIVPLNNREN[1534]ISDPTSPLR	Hex(5)HexNAc(3)(1419.502200)	Asn71	1.01	1.86	1.44	0.42
3	sp P01591 IGJ_HUMAN	IIVPLNNREN[1575]ISDPTSPLR	Hex(4)HexNAc(4)(1460.528700)	Asn71	1.95	1.93	1.94	0.01
4	sp P01591 IGJ_HUMAN	IIVPLNNREN[1680]ISDPTSPLR	dHex(1)Hex(5)HexNAc(3)(1565.560100)	Asn71	22.30	19.66	20.98	1.32
5	sp P01591 IGJ_HUMAN	IIVPLNNREN[1737]ISDPTSPLR	Hex(5)HexNAc(4)(1622.581600)	Asn71	19.02	16.93	17.97	1.05
6	sp P01591 IGJ_HUMAN	IIVPLNNREN[1762]ISDPTSPLR	dHex(1)Hex(3)HexNAc(5)(1647.613200)	Asn71	3.51	3.75	3.63	0.12
7	sp P01591 IGJ_HUMAN	IIVPLNNREN[1778]ISDPTSPLR	Hex(4)HexNAc(5)(1663.608100)	Asn71	17.05	17.84	17.45	0.39
8	sp P01591 IGJ_HUMAN	IIVPLNNREN[1924]ISDPTSPLR	dHex(1)Hex(4)HexNAc(5)(1809.666000)	Asn71	11.71	11.88	11.79	0.08
9	sp P01591 IGJ_HUMAN	IIVPLNNREN[1971]ISDPTSPLR	dHex(1)Hex(5)HexNAc(3)NeuAc(1)(1856.655500)	Asn71	3.79	5.69	4.74	0.95
10	sp P01591 IGJ_HUMAN	IIVPLNNREN[2028]ISDPTSPLR	Hex(5)HexNAc(4)NeuAc(1)(1913.677000)	Asn71	5.03	5.74	5.39	0.36
11	sp P01591 IGJ_HUMAN	IIVPLNNREN[2174]ISDPTSPLR	dHex(1)Hex(5)HexNAc(4)NeuAc(1)(2059.734900)	Asn71	4.86	5.99	5.43	0.56

Tablo Ek13. İnsan sütü glikoproteinlerine ait tespit edilen potansiyel O-glikopeptitlerin listesi.

	Protein Name	Sequence (unformatted)	Mods (variable)	Glycans	PE P 2D	PE P 1D	Lo g Pro bl	S c o r e	z	Ob s. m/ z	Ca lc. m/ z	p p m e rr .	Ob s. M H	Ca lc. M H	Sc an Ti me
1	>sp P01876 IGHA1_HUMAN Ig alpha-1 chain C region OS=Homo sapiens GN=IGHA1 PE=1 SV=2	K.HYTNPSQDVTVP[+58.00548]PVPST{+1460.52879}PPT PSPSTPPTPSPSC[+58.00548]C[+58.00548]HPR.L	T18(OGlycan 1460.5288)	/ 4 4 0 0 0 0	5.60E-14	2.00E-12	13.25	53.65	4	1400.603	1400.848	4.26	55.99391	56.00371	61.0122

2	>sp P01876 IGHA1_HUMAN Ig chain C region OS=Homo sapiens GN=IGHA1 PE=1 SV=2	K.HYTNPQDVTVP[+58.00548]PVPS{+291.09542}TPPT PSPSTPPT[+1371.51749]PSP SC[+58.00548]C[+58.00548]H PR.L	S17(OGlycan 291.0954); T29(OGlycan 1371.5175)	/	HexNAc(3)Hex(2)Fuc(3); 0 0 0 1 0 0	5.4 0E - 12	1.9 0E - 10	11. 27	4 3 6. 9	4 4	14 51. 12 8	14 51. 36 9	6 . 3 6	58 01. 48 8	58 02. 45 5	58 .0 84
3	>sp P01876 IGHA1_HUMAN Ig chain C region OS=Homo sapiens GN=IGHA1 PE=1 SV=2	K.HYTNPQDVTVP[+58.00548]PVPSTPPTPS{+1460.52879}PSTPPTPSPSC[+58.00548]C[+58.00548]HPR.L	S23(OGlycan 1460.5288)	/	4 4 0 0 0 0	9.5 0E - 12	3.4 0E - 10	11. 02	4 5 1. 9	5 4	11 20. 68 4	11 20. 88 7	3 . 3 3	55 99. 38 8	56 00. 37 1	61 .0 69 2
4	>sp P01876 IGHA1_HUMAN Ig chain C region OS=Homo sapiens GN=IGHA1 PE=1 SV=2	K.HYTNPQDVTVP[+58.00548]PVPS{+291.09542}T[+1168.43812]PPTPSPSTPPTSP SC[+58.00548]C[+58.00548]H PR.L	S17(OGlycan 291.0954); T18(OGlycan 1168.4381)	/	HexNAc(2)Hex(2)Fuc(3); 0 0 0 1 0 0	3.8 0E - 11	1.4 0E - 09	10. 42	4 5 0. 2	4 4	14 00. 36 1	14 00. 59 9	9 . 1 7	55 98. 42 4	55 99. 37 6	59 .3 18 8
5	>sp Q6WN34 CRDL2_HUMAN Chordin-like protein 2 OS=Homo sapiens GN=CHRD2 PE=1 SV=1	R.GPGTAPTGLS[+730.26439]APLSFIPR.H	S11(OGlycan 730.2644)	/	HexNAc(2)Hex(2)	4.4 0E - 12	1.6 0E - 10	11. 36	4 8 0. 5	2 2	12 83. 63 9	12 83. 63 7	1 . 9	25 66. 27 6	25 66. 26 6	80 .7 27 2
6	>sp Q6WN34 CRDL2_HUMAN Chordin-like protein 2 OS=Homo sapiens GN=CHRD2 PE=1 SV=1	R.VLVHTSVS[+730.26439]PS PDNLR.R	S8(OGlycan / 730.2644)	/	HexNAc(2)Hex(2)	3.7 0E - 16	1.3 0E - 14	15. 44	7 4 6. 9	3 3	78 4.3 83 7	78 4.3 83 1	0 . 7 4	23 51. 13 7	23 51. 13 5	47 .5 19 4
7	>sp Q6WN34 CRDL2_HUMAN Chordin-like protein 2 OS=Homo sapiens GN=CHRD2 PE=1 SV=1	R.VLVHTSVS[+146.05791]PS [730.26439]PDNLR.R	S8(OGlycan 146.0579); S10(OGlycan 730.2644)	/	HexNAc(2)Hex(2); 0 0 1 0 0 0	6.8 0E - 12	2.4 0E - 10	11. 17	5 2 0. 5	3 3	83 3.0 70 8	83 3.0 69 1	2 . 0 2	24 97. 19 8	24 97. 19 3	46 .5 57 5
8	>sp Q6WN34 CRDL2_HUMAN Chordin-like protein 2 OS=Homo sapiens GN=CHRD2 PE=1 SV=1	R.VLVHTS[+365.13220]VS[+365.13220]PSPDNLR.F	S6(OGlycan 365.1322); S8(OGlycan / 365.1322)	/	HexNAc(1)Hex(1); 1 1 0 0 0 0	9.3 0E - 12	3.3 0E - 10	11. 03	5 1 0. 7	4 4	62 7.5 64 9	62 7.5 64 4	0 . 7 5	25 07. 23 8	25 07. 23 6	43 .2 07 8
9	>sp Q6WN34 CRDL2_HUMAN Chordin-like protein 2 OS=Homo sapiens GN=CHRD2 PE=1 SV=1	R.VLVHTSVS[+1095.39659]P SPDNLR.R	S8(OGlycan 1095.3966)	/	HexNAc(3)Hex(3)	1.0 0E - 11	3.6 0E - 10	11. 9	4 7 9. 9	3 3	90 6.0 94 2	90 6.0 93 8	0 . 4	27 16. 26 8	27 16. 26 7	45 .8 74
10	>sp Q6WN34 CRDL2_HUMAN Chordin-like protein 2 OS=Homo sapiens GN=CHRD2 PE=1 SV=1	R.VLVHT[+730.26439]SVSPS PDNLR.R	T5(OGlycan / 730.2644)	/	HexNAc(2)Hex(2)	1.4 0E - 11	4.9 0E - 10	10. 87	4 8 3. 4	3 3	78 4.3 82 7	78 4.3 83 1	- 0 . 5 8	23 51. 13 3	23 51. 13 5	47 .1 72 4
11	>sp Q6WN34 CRDL2_HUMAN Chordin-like protein 2 OS=Homo sapiens GN=CHRD2 PE=1 SV=1	R.VLVHTSVSPS[+730.26439]PDNLR.F	S10(OGlycan 730.2644)	/	HexNAc(2)Hex(2)	4.0 0E - 11	1.4 0E - 09	10. 39	4 3 8. 7	3 3	83 6.4 17 3	83 6.4 16 8	0 . 5 4	25 07. 23 7	25 07. 23 6	43 .2 06 4
12	>sp P22897 MRC1_HUMAN Macrophage mannose receptor 1 OS=Homo sapiens GN=MRC1 PE=1 SV=1	R.SDPSLTNPPAT[+365.13220]IQT[+365.13220]DGFVK.Y	T11(OGlycan 365.1322); T14(OGlycan 365.1322)	/	HexNAc(1)Hex(1); 1 1 0 0 0 0	1.7 0E - 11	5.9 0E - 10	10. 78	5 2 9. 2	3 3	90 6.7 61 7	90 6.7 58 7	3 . 3 1	27 18. 27 1	27 18. 26 2	70 .0 81 7

13	>sp P22897 MRC1_HUMAN Macrophage mannose receptor 1 OS=Homo sapiens GN=MRC1 PE=1 SV=1	R.SDPSLTNPPAT[+511.1901 0]IQT{+365.13220}DGFVK.Y	T11(OGlycan / 511.1901); T14(OGlycan / 365.1322)	HexNAc(1)Hex(1)Fuc(1); 1 1 0 0 0 0	2.4 0E - 11	8.6 0E - 10	10. 62	5 4 5. 9	3 5	95 5.4 43 7	95 5.4 44 7	- 1 0 1	28 64. 31 7	28 64. 31 9	69 .2 88 5
14	>sp P22897 MRC1_HUMAN Macrophage mannose receptor 1 OS=Homo sapiens GN=MRC1 PE=1 SV=1	K.RS[+365.13220]DEIPAT{+365.13220}EPPQLPGR.C	S2(OGlycan / 365.1322); T8(OGlycan / 365.1322)	HexNAc(1)Hex(1); 1 1 0 0 0 0	5.4 0E - 18	1.9 0E - 16	17. 27	8 0 6. 1	3 0 6. 1	83 1.7 29 1	83 1.7 29 1	0 0 0 4	24 93. 17 3	24 93. 17 3	48 .2 25 4
15	>sp P22897 MRC1_HUMAN Macrophage mannose receptor 1 OS=Homo sapiens GN=MRC1 PE=1 SV=1	K.RSDEIPAT[+876.32230]EPQLPGR.C	T8(OGlycan / 876.3223)	HexNAc(2)Hex(2)Fuc(1)	4.8 0E - 12	1.7 0E - 10	11. 32	5 5 8. 3	3 5 3	88 0.4 16 5	88 0.4 15 1	1 . 7 1	26 39. 23 5	26 39. 23 1	47 .7 27 4
16	>sp P22897 MRC1_HUMAN Macrophage mannose receptor 1 OS=Homo sapiens GN=MRC1 PE=1 SV=1	K.RS{+365.13220}DEIPATEPQLPGR.C	S2(OGlycan / 365.1322)	1 1 0 0 0 0	2.3 0E - 11	8.4 0E - 10	10. 63	4 1 7. 6	3 3	71 0.0 18 3	71 0.0 18 3	- 0 0 7	21 28. 04	21 28. 04	51 .2 16 3
17	>sp P22897 MRC1_HUMAN Macrophage mannose receptor 1 OS=Homo sapiens GN=MRC1 PE=1 SV=1	R.SDEIPAT[+730.26439]EPPQLPGR.C	T7(OGlycan / 730.2644)	HexNAc(2)Hex(2)	6.4 0E - 17	2.3 0E - 15	16. 19	7 6 0. 3	3 3	77 9.6 96 4	77 9.6 95 4	1 . 3 1	23 37. 07 5	23 37. 07 2	55 .7 19 5
18	>sp P22897 MRC1_HUMAN Macrophage mannose receptor 1 OS=Homo sapiens GN=MRC1 PE=1 SV=1	R.S{+511.19011}DEIPAT[+365.13220]EPPQLPGR.C	S1(OGlycan / 511.1901); T7(OGlycan / 365.1322)	HexNAc(1)Hex(1); 1 1 1 0 0 0	5.9 0E - 16	2.1 0E - 14	15. 23	7 3 0. 9	3 3	82 8.3 83 6	82 8.3 81 3	2 . 7 1	24 83. 13 6	24 83. 12 9	55 .0 26 4
19	>sp P22897 MRC1_HUMAN Macrophage mannose receptor 1 OS=Homo sapiens GN=MRC1 PE=1 SV=1	R.SDEIPAT{+365.13220}EPPQLPGR.C	T7(OGlycan / 365.1322)	1 1 0 0 0 0	2.7 0E - 15	9.5 0E - 14	14. 58	6 8 4. 7	2 2	98 6.4 76 3	98 6.4 73 3	2 . 7 3	19 71. 94 5	19 71. 93 9	59 .6 19 6
20	>sp P22897 MRC1_HUMAN Macrophage mannose receptor 1 OS=Homo sapiens GN=MRC1 PE=1 SV=1	R.S[+365.13220]DEIPAT{+365.13220}EPPQLPGR.C	S1(OGlycan / 365.1322); T7(OGlycan / 365.1322)	HexNAc(1)Hex(1); 1 1 0 0 0 0	2.7 0E - 14	9.5 0E - 13	13. 58	6 3 2. 8	2 2	11 69. 04 3	11 69. 03 9	2 . 8 8	23 37. 07 8	23 37. 07 2	55 .5 00 1

Tablo Ek14. İnek sütü üzerine gerçekleştirilen glikoproteomik analizler sonucu tespit edilen deamide olmuş peptitlerin listesi.

	Proteins	Localiza tion prob	Score for localiza tion	Number of Deamida tion (N)	Positi on in pepti de	Deamidation (N) Probabilities	Char ge	Mas s erro r [pp m]
1	P00711;sp P00711 LALBA_BOVIN	1.00	51.61	1;2;3	12	DDQN(1)PHSSN(1)ICN(1)ISCDK	3	- 0.21
2	Q1RMK2	1.00	84.21	2	2	FN(1)N(1)STVSSER	2	- 1.06
3	Q1RMK2	1.00	43.25	1	3	HLN(1)DTFSAR	2	- 2.54
4	Q1RMK2	1.00	127.71	1	9	STGKPTLYN(1)VSLVLSDTASTCY	2	- 0.52
5	sp A0JNP2 SG1D_BOVIN	1.00	75.29	1	4	ILLN(1)CTVTDVK	2	1.10
6	sp P01030 CO4_BOVIN	1.00	73.99	1	3	GLN(1)VTLSSLGR	2	- 0.04
7	sp P01030 CO4_BOVIN	1.00	77.68	1	2	LN(1)ISTDDLPLGR	2	0.50
8	sp P02702 FOLR1_BOVIN	1.00	63.28	1	3	GWN(1)WTSGYNQCPVK	2	0.55
9	sp P02702 FOLR1_BOVIN	1.00	51.93	1	7	NACCSVN(1)TSIEAHK	2	- 0.73
10	sp P08037 B4GT1_BOVIN	1.00	77.06	1	10	GVAPPPPLQN(1)SSKPR	2	- 1.03
11	sp P11151 LIPL_BOVIN	1.00	62.57	1;2	26	TPEDTAEDTCHLIPGVTESVAN(1)CHF N(1)HSSK	5	0.31
12	sp P12763 FETUA_BOVIN	1.00	52.69	1	12	LCPDCPLLAPLN(1)DSR	2	0.92
13	sp P17690 APOH_BOVIN	1.00	41.64	1	10	VCPFAGILEN(1)GTVR	3	- 0.58
14	sp P17697 CLUS_BOVIN	1.00	93.37	1	3	MLN(1)TSALLK	2	- 0.96
15	sp P18892 BT1A1_BOVIN	1.00	61.96	1	4	LSPN(1)VSAK	2	0.16
16	sp P21214 TGFB2_BOVIN	1.00	40.43	1	23	LTSPPEDYPEEVPPEVISIYN(1)STR	3	0.93
17	sp P26201 CD36_BOVIN	1.00	73.02	1;2	11	HN(1)YIVPILWLN(1)ETGTIGDEK	2	3.57
18	sp P26201 CD36_BOVIN	1.00	41.69	1	1	N(1)CTLYGVLDIGK	2	- 0.10
19	sp P26201 CD36_BOVIN	1.00	53.87	1;2	16	QFWIFDVQN(1)PDEVTVN(1)SSK	2	1.37
20	sp P26779 SAP_BOVIN	1.00	48.11	1	2	TN(1)STFVEALVDHAK	3	- 0.27

21	sp P34955 A1AT_BOVIN	1.00	88.56	1	5	GLGFN(1)LTEAEAEIHK	3	0.04
22	sp P41361 ANT3_BOVIN	1.00	47.20	1	9	LTIN(0.001)QWISN(0.999)KTEGR	3	-0.30
23	sp P80025 PERL_BOVIN	1.00	77.63	1	6	DTTLTN(1)VTDPDLTALSWEVGCGAPVPLVK	3	2.41
24	sp P80025 PERL_BOVIN	1.00	182.71	1	9	KPSPCEFIN(1)TTAR	2	0.11
25	sp P80195 GLCM1_BOVIN	1.00	138.28	1	1	N(1)ATLGSEETTEHTPSDASTTEGK	3	-0.60
26	sp P80209 CATD_BOVIN	1.00	40.35	1	7	GSLMFHN(1)VTR	2	-0.42
27	sp P81265 PIGR_BOVIN	1.00	51.53	1;2	2	AN(1)LTN(1)FPESGTFVVDISLTHK	4	-1.92
28	sp P81265 PIGR_BOVIN	1.00	88.50	1	1	N(1)VTAWLGEPLK	2	-1.52
29	sp Q28194 Q28194_BOVIN	1.00	52.56	1	3	VVN(1)STTGPGEHLR	3	1.49
30	sp Q3KUS7 Q3KUS7_BOVIN	1.00	81.87	1	5	AAYYN(1)LSDEISFR	2	-0.99
31	sp Q3SZV7 Q3KUS7_BOVIN	1.00	91.94	1	9	FDPVTGEVN(1)STYPR	2	0.98
32	sp Q95121 PEDF_BOVIN	1.00	61.35		4	VTQN(1)LTLIEESLTSEFIHDIDR	3	-1.76
33	sp Q9MZ06 FGFP1_BOVIN	1.00	67.03	1	3	LVN(1)STLIR	2	0.13
34	sp Q9TTE1 SPA31_BOVIN	1.00	62.00	1	2	FN(1)LTEIQEK	2	1.08
35	tr A5D9E9 A5D9E9_BOVIN	1.00	63.28	2	8	SLLN(1)GAFN(1)YTTR	2	0.38
36	tr C7FE01 C7FE01_BOVIN;tr B9VPZ5 B9VPZ5_BOVIN;sp P24627 TRFL_BOVIN;tr Q6LBN7 Q6LBN7_BOVIN	1.00	55.78	3	22	CLAEDVGDAFVKN(1)DTVWEN(1)TN(1)GESTADWAK	3	-0.21
37	tr Q3ZCL0 Q3ZCL0_BOVIN	1.00	91.94	1;2;3	4	MQWN(1)TTAAANAQNWANK	2	-0.80

Tablo Ek15. İnek sütü glikoproteinlerine ait tespit edilen N-glikopeptitlerin listesi.

	Protein	Modified Peptide	Observed Modifications	Glycosylation Regio	Charge	Retention	Observed M/Z	Calculated M/Z	Delta Mass	Expectation	Protein Start	Protein End
1	sp A0JNP2 SG1D_BOVIN	ILLN[1965]CTVTDVK	dHex(1)Hex(3)HexNAc(6)(1850.692600)	Asn87	2	2000.114	1130.501	1130.502	0.0003	5.92E-05	51	59
2	sp A0JNP2 SG1D_BOVIN	ILLN[1413]CTVTDVK	Hex(3)HexNAc(4)(1298.475900)	Asn87	3	4501.349	1023.452	1023.449	-0.0030	0.008531	467	478

3	sp A0JNP2 SG1D_BOVIN	ILLN[1819]CTVTDVK	Hex(3)HexNAc(6)(1704.634700)	Asn87	2	1997.309	1232.041	1232.041	0.0000	0.004487	51	59
4	sp A0JNP2 SG1D_BOVIN	ILLN[1371]CTVTDVK	Hex(4)HexNAc(3)(1257.449400)	Asn87	4	5572.372	1070.237	1070.236	-0.0009	1.08E-07	81	103
5	sp A0JNP2 SG1D_BOVIN	ILLN[1575]CTVTDVK	Hex(4)HexNAc(4)(1460.528700)	Asn87	3	1991.015	889.3904	889.3898	-0.0006	0.012345	51	59
6	sp A0JNP2 SG1D_BOVIN	ILLN[1778]CTVTDVK	Hex(4)HexNAc(5)(1663.608100)	Asn87	3	5165.673	1068.466	1068.465	-0.0006	0.09231	320	332
7	sp A0JNP2 SG1D_BOVIN	ILLN[1330]CTVTDVK	Hex(5)HexNAc(2)(1216.422800)	Asn87	3	4747.404	1026.795	1026.793	-0.0015	4.97E-06	467	478
8	sp A0JNP2 SG1D_BOVIN	ILLN[1534]CTVTDVK	Hex(5)HexNAc(3)(1419.502200)	Asn87	3	3901.868	1042.8	1042.802	0.0012	0.001606	83	94
9	sp A0JNP2 SG1D_BOVIN	ILLN[1737]CTVTDVK	Hex(5)HexNAc(4)(1622.581600)	Asn87	2	1972.15	1109.988	1109.988	0.0001	4.70E-05	51	59
10	sp A0JNP2 SG1D_BOVIN	ILLN[1493]CTVTDVK	Hex(6)HexNAc(2)(1378.475600)	Asn87	3	4646.175	974.7679	974.7635	-0.0004	0.020324	467	478
11	sp A0JNP2 SG1D_BOVIN	ILLN[1696]CTVTDVK	Hex(6)HexNAc(3)(1581.555000)	Asn87	2	1974.04	1211.527	1211.528	0.0006	0.001543	51	59
12	sp A0JNP2 SG1D_BOVIN	ILLN[1655]CTVTDVK	Hex(7)HexNAc(2)(1540.528500)	Asn87	3	4778.887	945.4256	945.4247	-0.0009	0.000517	467	478
13	sp A0JNP2 SG1D_BOVIN	ILLN[1817]CTVTDVK	Hex(8)HexNAc(2)(1702.581300)	Asn87	4	5584.414	1009.21	1009.21	0.0000	0.000126	81	103
14	sp P18892 BT1A1_BOVIN	LSPN[1559]VSAK	dHex(1)Hex(3)HexNAc(4)(1444.533800)	Asn55	3	1977.486	875.7144	875.7142	-0.0002	6.35E-05	51	59
15	sp P18892 BT1A1_BOVIN	LSPN[1762]VSAK	dHex(1)Hex(3)HexNAc(5)(1647.613200)	Asn55	4	2460.061	1043.933	1043.934	0.0010	0.00103	94	117
16	sp P18892 BT1A1_BOVIN	LSPN[1965]VSAK	dHex(1)Hex(3)HexNAc(6)(1850.692600)	Asn55	3	5158.03	1054.79	1054.79	-0.0007	2.61E-05	320	332
17	sp P18892 BT1A1_BOVIN	LSPN[1518]VSAK	dHex(1)Hex(4)HexNAc(3)(1403.507300)	Asn55	3	4722.735	1013.12	1013.118	-0.0016	0.093756	467	478
18	sp P18892 BT1A1_BOVIN	LSPN[1721]VSAK	dHex(1)Hex(4)HexNAc(4)(1606.586600)	Asn55	4	5579.294	1049.723	1049.723	0.0001	2.21E-05	81	103
19	sp P18892 BT1A1_BOVIN	LSPN[1924]VSAK	dHex(1)Hex(4)HexNAc(5)(1809.666000)	Asn55	3	1965.258	862.0384	862.0387	0.0003	0.011515	51	59
20	sp P18892 BT1A1_BOVIN	LSPN[1883]VSAK	dHex(1)Hex(5)HexNAc(4)(1768.639500)	Asn55	4	2471.801	1033.677	1033.677	0.0007	0.017338	94	117

21	sp P18892 BT1A1_BOVIN	LSPN[2174]VSAK	dHex(1)Hex(5)HexNAc(4)NeuAc(1) (2059.734900)	Asn55	3	5188. 899	1041. 115	1041. 114	- 0.001 4	1.00E- 06	320	332
22	sp P18892 BT1A1_BOVIN	LSPN[1413]VSAK	Hex(3)HexNAc(4)(1298.475900)	Asn55	3	4770. 692	999.4 426	999.4 423	- 0.000 3	3.80E- 08	467	478
23	sp P18892 BT1A1_BOVIN	LSPN[1819]VSAK	Hex(3)HexNAc(6)(1704.634700)	Asn55	4	2969. 228	1106. 452	1106. 451	- 0.000 9	0.0006 38	94	117
24	sp P18892 BT1A1_BOVIN	LSPN[1371]VSAK	Hex(4)HexNAc(3)(1257.449400)	Asn55	3	2531. 129	959.0 713	959.0 705	- 0.000 8	0.0016 74	51	59
25	sp P18892 BT1A1_BOVIN	LSPN[1575]VSAK	Hex(4)HexNAc(4)(1460.528700)	Asn55	3	5174. 845	1027. 44	1027. 438	- 0.001 6	0.0012 99	320	332
26	sp P18892 BT1A1_BOVIN	LSPN[1534]VSAK	Hex(5)HexNAc(3)(1419.502200)	Asn55	3	5195. 531	1006. 782	1006. 782	- 0.000 1	7.41E- 06	198	213
27	sp P18892 BT1A1_BOVIN	LSPN[1737]VSAK	Hex(5)HexNAc(4)(1622.581600)	Asn55	3	4859. 535	842.7 205	842.7 211	0.000 6	0.0079 48	467	478
28	sp P24627 TRFL_BOVIN	ADRDQYELLCLN[1493]N SR	Hex(6)HexNAc(2)(1378.475600)	Asn252	4	5594. 961	1033. 722	1033. 722	0.000 0	4.11E- 05	81	103
29	sp P24627 TRFL_BOVIN	ADRDQYELLCLN[1655]N SR	Hex(7)HexNAc(2)(1540.528500)	Asn252	3	5132. 054	1142. 169	1142. 168	- 0.000 7	0.0005 8	198	213
30	sp P24627 TRFL_BOVIN	ADRDQYELLCLN[1817]N SR	Hex(8)HexNAc(2)(1702.581300)	Asn252	2	3963. 348	1267. 079	1267. 077	- 0.001 8	0.0001 61	83	94
31	sp P24627 TRFL_BOVIN	ADRDQYELLCLN[1979]N SR	Hex(9)HexNAc(2)(1864.634100)	Asn252	2	1955. 904	1138. 499	1138. 499	0.000 0	0.0011 16	51	59
32	sp P24627 TRFL_BOVIN	DQYELLCLN[1493]NSR	Hex(6)HexNAc(2)(1378.475600)	Asn252	3	1976. 048	840.7 042	840.7 037	- 0.000 5	0.0071 33	51	59
33	sp P24627 TRFL_BOVIN	DQYELLCLN[1655]NSR	Hex(7)HexNAc(2)(1540.528500)	Asn252	3	4788. 653	978.1 084	978.1 074	- 0.001 0	1.76E- 07	467	478
34	sp P24627 TRFL_BOVIN	DQYELLCLN[1817]NSR	Hex(8)HexNAc(2)(1702.581300)	Asn252	4	5620. 839	972.6 957	972.6 952	- 0.000 5	7.08E- 05	81	103
35	sp P24627 TRFL_BOVIN	DQYELLCLN[1979]NSR	Hex(9)HexNAc(2)(1864.634100)	Asn252	3	3919. 347	912.7 486	912.7 47	- 0.001 6	0.0043 73	83	94
36	sp P24627 TRFL_BOVIN	ETTVFENLPEKADRDQYE LLCLN[1493]NSR	Hex(6)HexNAc(2)(1378.475600)	Asn252	2	3907. 485	1490. 669	1490. 67	0.001 4	0.0005 79	83	94

37	sp P24627 TRFL_BOVIN	ETTVFENLPEKADRDQYE LLCLN[1655]NSR	Hex(7)HexNAc(2)(1540.528500)	Asn252	2	1962. 407	1036. 963	1036. 959	- 0.003 8	0.0111 11	51	59
38	sp P24627 TRFL_BOVIN	ETTVFENLPEKADRDQYE LLCLN[1817]NSR	Hex(8)HexNAc(2)(1702.581300)	Asn252	2	2904. 875	1188. 551	1188. 549	- 0.001 7	0.0074 77	152	160
39	sp P24627 TRFL_BOVIN	ETTVFENLPEKADRDQYE LLCLN[1979]NSR	Hex(9)HexNAc(2)(1864.634100)	Asn252	3	5151. 716	1060. 803	1060. 799	- 0.003 4	0.0053 43	198	213
40	sp P26201 CD36_BOVIN	N[1965]CTLYGVLDIGK	dHex(1)Hex(3)HexNAc(6)(1850.69 2600)	Asn321	3	4754. 956	964.4 323	964.4 319	- 0.000 4	0.0003 76	467	478
41	sp P26201 CD36_BOVIN	N[1924]CTLYGVLDIGK	dHex(1)Hex(4)HexNAc(5)(1809.66 6000)	Asn321	2	2878. 361	1066. 497	1066. 496	- 0.001 1	0.0032 47	152	160
42	sp P26201 CD36_BOVIN	N[1883]CTLYGVLDIGK	dHex(1)Hex(5)HexNAc(4)(1768.63 9500)	Asn321	2	3934. 287	1246. 564	1246. 564	- 0.000 4	0.0001 36	83	94
43	sp P26201 CD36_BOVIN	N[1842]CTLYGVLDIGK	dHex(1)Hex(6)HexNAc(3)(1727.61 2900)	Asn321	3	2869. 593	913.0 628	913.0 633	0.000 5	7.06E- 07	349	362
44	sp P26201 CD36_BOVIN	N[1819]CTLYGVLDIGK	Hex(3)HexNAc(6)(1704.634700)	Asn321	3	4192. 858	1046. 106	1046. 106	0.000 2	6.03E- 07	61	78
45	sp P26201 CD36_BOVIN	N[1575]CTLYGVLDIGK	Hex(4)HexNAc(4)(1460.528700)	Asn321	3	5218. 283	924.7 351	924.7 348	- 0.000 3	0.0006 3	320	332
46	sp P26201 CD36_BOVIN	N[1534]CTLYGVLDIGK	Hex(5)HexNAc(3)(1419.502200)	Asn321	2	3928. 636	1348. 104	1348. 104	- 0.000 1	0.0002 46	83	94
47	sp P26201 CD36_BOVIN	N[1737]CTLYGVLDIGK	Hex(5)HexNAc(4)(1622.581600)	Asn321	2	1944. 373	1117. 985	1117. 986	0.000 5	0.0009 51	51	59
48	sp P26201 CD36_BOVIN	N[1696]CTLYGVLDIGK	Hex(6)HexNAc(3)(1581.555000)	Asn321	4	5616. 03	1013. 209	1013. 208	- 0.000 3	0.0012 19	81	103
49	sp P26201 CD36_BOVIN	HNYIVPILWLN[1817]ETG TIGDEK	Hex(8)HexNAc(2)(1702.581300)	Asn417	2	3893. 401	1449. 644	1449. 643	- 0.000 6	1.88E- 09	83	94
50	sp P26201 CD36_BOVIN	HNYIVPILWLN[1979]ETG TIGDEK	Hex(9)HexNAc(2)(1864.634100)	Asn417	3	1948. 649	813.3 526	813.3 527	0.000 1	0.0020 61	51	59
51	sp P26201 CD36_BOVIN	HNYIVPILWLN[1979]ETG TIGDEKAEMFR	Hex(9)HexNAc(2)(1864.634100)	Asn417	3	2858. 286	846.7 186	846.7 194	0.000 8	0.0205 59	152	160
52	sp P80025 PERL_BOVIN	IVGYLDEEGVLDQN[1413] R	Hex(3)HexNAc(4)(1298.475900)	Asn212	3	5189. 361	992.4 303	992.4 28	- 0.002 3	0.0066 76	320	332

53	sp P80025 PERL_BOVIN	IVGYLDEEGVLDQN[1819]R	Hex(3)HexNAc(6)(1704.634700)	Asn212	3	4790.312	950.7571	950.7564	-0.0007	7.48E-10	467	478
54	sp P80025 PERL_BOVIN	IVGYLDEEGVLDQN[1575]R	Hex(4)HexNAc(4)(1460.528700)	Asn212	3	4179.671	1082.454	1082.456	0.0013	0.001073	240	255
55	sp P80025 PERL_BOVIN	KPSPCEFIN[1330]TTAR	Hex(5)HexNAc(2)(1216.422800)	Asn358	3	5109.311	968.4019	968.4004	-0.0015	1.10E-05	243	255
56	sp P80025 PERL_BOVIN	KPSPCEFIN[1493]TTAR	Hex(6)HexNAc(2)(1378.475600)	Asn358	2	3726.801	1327.596	1327.594	-0.0016	0.000721	220	232
57	sp P80025 PERL_BOVIN	KPSPCEFIN[1655]TTAR	Hex(7)HexNAc(2)(1540.528500)	Asn358	2	3885.711	1327.588	1327.59	0.0023	0.001308	83	94
58	sp P80195 GLCM1_BOVIN	N[1924]ATLGSEETTEHTP SDASTTEGK	dHex(1)Hex(4)HexNAc(5)(1809.666000)	Asn95	3	2834.498	967.0817	967.0809	-0.0008	8.74E-08	349	362
59	sp P80195 GLCM1_BOVIN	N[1883]ATLGSEETTEHTP SDASTTEGK	dHex(1)Hex(5)HexNAc(4)(1768.639500)	Asn95	2	2866.015	1147.522	1147.523	0.0001	3.52E-06	152	160
60	sp P80195 GLCM1_BOVIN	N[2174]ATLGSEETTEHTP SDASTTEGK	dHex(1)Hex(5)HexNAc(4)NeuAc(1)(2059.734900)	Asn95	3	4165.308	1100.122	1100.124	0.0017	0.000127	61	78
61	sp P81265 PIGR_BOVIN	AN[1575]LTNFPESGTFVV DISHLTHK	Hex(4)HexNAc(4)(1460.528700)	Asn83	3	5051.7	1076.436	1076.436	-0.0006	2.69E-09	243	255
62	sp P81265 PIGR_BOVIN	AN[1721]LTNFPESGTFVV DISHLTHK	dHex(1)Hex(4)HexNAc(4)(1606.586600)	Asn83	3	4163.081	1136.474	1136.473	-0.0008	6.19E-12	240	255
63	sp P81265 PIGR_BOVIN	AN[1737]LTNFPESGTFVV DISHLTHK	Hex(5)HexNAc(4)(1622.581600)	Asn83	3	3669.587	993.4339	993.4338	-0.0001	2.47E-10	220	232
64	sp P81265 PIGR_BOVIN	AN[1778]LTNFPESGTFVV DISHLTHK	Hex(4)HexNAc(5)(1663.608100)	Asn83	3	3431.015	1122.493	1122.492	-0.0012	0.000309	216	232
65	sp P81265 PIGR_BOVIN	AN[1819]LTNFPESGTFVV DISHLTHK	Hex(3)HexNAc(6)(1704.634700)	Asn83	2	3861.318	1408.618	1408.617	-0.0013	0.017896	83	94
66	sp P81265 PIGR_BOVIN	AN[1883]LTNFPESGTFVV DISHLTHK	dHex(1)Hex(5)HexNAc(4)(1768.639500)	Asn83	4	5452.203	1174.516	1174.515	-0.0010	1.41E-06	229	255
67	sp P81265 PIGR_BOVIN	AN[1924]LTNFPESGTFVV DISHLTHK	dHex(1)Hex(4)HexNAc(5)(1809.666000)	Asn83	3	2836.684	1021.099	1021.099	0.0000	0.003857	349	362
68	sp P81265 PIGR_BOVIN	AN[1965]LTNFPESGTFVV DISHLTHK	dHex(1)Hex(3)HexNAc(6)(1850.692600)	Asn83	3	3897.909	953.0882	953.0891	0.0009	0.000146	83	94

69	sp P81265 PIGR_BOVIN	N[1413]VTAWLGEPLK	Hex(3)HexNAc(4)(1298.475900)	Asn468	2	3686.854	1408.621	1408.621	- 0.0006	0.00157	220	232
70	sp P81265 PIGR_BOVIN	N[1493]VTAWLGEPLK	Hex(6)HexNAc(2)(1378.475600)	Asn468	3	4142.429	1208.16	1208.159	- 0.0012	2.44E-08	61	78
71	sp P81265 PIGR_BOVIN	N[1575]VTAWLGEPLK	Hex(4)HexNAc(4)(1460.528700)	Asn468	4	5442.375	1215.03	1215.029	- 0.0010	6.51E-09	229	255
72	sp P81265 PIGR_BOVIN	N[1696]VTAWLGEPLK	Hex(6)HexNAc(3)(1581.555000)	Asn468	3	4124.229	1244.508	1244.508	0.0002	1.25E-09	240	255
73	sp P81265 PIGR_BOVIN	N[1721]VTAWLGEPLK	dHex(1)Hex(4)HexNAc(4)(1606.586600)	Asn468	3	4758.868	1004.774	1004.774	0.0000	1.36E-05	467	478
74	sp P81265 PIGR_BOVIN	N[1737]VTAWLGEPLK	Hex(5)HexNAc(4)(1622.581600)	Asn468	2	3847.606	1489.643	1489.643	0.0002	4.39E-10	83	94
75	sp P81265 PIGR_BOVIN	N[1778]VTAWLGEPLK	Hex(4)HexNAc(5)(1663.608100)	Asn468	3	6521.078	1338.931	1338.929	- 0.0018	9.89E-05	406	426
76	sp P81265 PIGR_BOVIN	N[1809]VTAWLGEPLK	dHex(1)Hex(4)HexNAc(3)NeuAc(1)(1694.602700)	Asn468	3	5201.515	978.7559	978.7525	- 0.0034	0.000637	320	332
77	sp P81265 PIGR_BOVIN	N[1819]VTAWLGEPLK	Hex(3)HexNAc(6)(1704.634700)	Asn468	3	4151.944	1190.491	1190.491	- 0.0007	2.93E-11	240	255
78	sp P81265 PIGR_BOVIN	N[1883]VTAWLGEPLK	dHex(1)Hex(5)HexNAc(4)(1768.639500)	Asn468	3	3428.077	1068.475	1068.475	- 0.0006	0.001627	216	232
79	sp P81265 PIGR_BOVIN	N[1899]VTAWLGEPLK	Hex(6)HexNAc(4)(1784.634400)	Asn468	3	5028.573	1130.454	1130.453	- 0.0009	1.33E-06	243	255
80	sp P81265 PIGR_BOVIN	N[1924]VTAWLGEPLK	dHex(1)Hex(4)HexNAc(5)(1809.666000)	Asn468	3	5081.829	1022.418	1022.418	- 0.0003	1.37E-07	243	255
81	sp P81265 PIGR_BOVIN	N[1965]VTAWLGEPLK	dHex(1)Hex(3)HexNAc(6)(1850.692600)	Asn468	3	4800.464	937.0796	937.0808	0.0012	0.000808	467	478
82	sp Q95114 MFGM_BOVIN	IFIGNVN[1493]NSGLK	Hex(6)HexNAc(2)(1378.475600)	Asn227	4	5405.096	1255.542	1255.542	- 0.0003	0.000181	229	255
83	sp Q95114 MFGM_BOVIN	IFIGNVN[1655]NSGLK	Hex(7)HexNAc(2)(1540.528500)	Asn227	3	6497.769	1392.949	1392.947	- 0.0019	9.51E-09	406	426
84	sp Q95114 MFGM_BOVIN	IFIGNVN[1817]NSGLK	Hex(8)HexNAc(2)(1702.581300)	Asn227	4	6640.038	1203.535	1203.534	- 0.0005	0.000342	406	431
85	sp Q95114 MFGM_BOVIN	IFIGNVN[1979]NSGLK	Hex(9)HexNAc(2)(1864.634100)	Asn227	3	3652.657	1047.451	1047.451	0.0000	0.001039	220	232

86	sp Q95114 MFGM_BOVIN	SGDKIFIGNVN[1655]NSG LK	Hex(7)HexNAc(2)(1540.528500)	Asn227	2	2020.823	582.804	582.8033	-0.0007	0.005044	51	59
87	sp Q95114 MFGM_BOVIN	SGDKIFIGNVN[1817]NSG LK	Hex(8)HexNAc(2)(1702.581300)	Asn227	2	4190.721	739.8917	739.8922	0.0005	0.142397	83	94
88	sp Q9MZ06 FGFP1_BOVIN	LVN[1575]STLIR	Hex(4)HexNAc(4)(1460.528700)	Asn155	3	5563.094	1022.745	1022.418	-0.3272	0.020583	243	255
89	sp Q9MZ06 FGFP1_BOVIN	LVN[1330]STLIR	Hex(5)HexNAc(2)(1216.422800)	Asn155	3	5514.826	1076.764	1076.436	-0.3282	0.000669	243	255
90	sp Q9MZ06 FGFP1_BOVIN	LVN[1737]STLIR	Hex(5)HexNAc(4)(1622.581600)	Asn155	2	5553.875	864.3988	864.3988	0.0000	0.002371	243	255
91	sp Q9MZ06 FGFP1_BOVIN	LVN[1493]STLIR	Hex(6)HexNAc(2)(1378.475600)	Asn155	3	4125.805	993.7609	993.4338	-0.3271	0.021392	220	232
92	tr Q3ZCL0 Q3ZCL0_BOVIN	MQWN[1330]TTAAANAQ NWANK	Hex(5)HexNAc(2)(1216.422800)	Asn65	3	2534.38	972.7465	972.746	-0.0005	0.000137	51	59
93	tr Q3ZCL0 Q3ZCL0_BOVIN	MQWN[1493]TTAAANAQ NWANK	Hex(6)HexNAc(2)(1378.475600)	Asn65	3	2552.64	986.4224	986.4216	-0.0008	0.000191	51	59
94	tr Q3ZCL0 Q3ZCL0_BOVIN	MQWN[1817]TTAAANAQ NWANK	Hex(8)HexNAc(2)(1702.581300)	Asn65	3	4138.506	1213.831	1213.491	-0.3400	0.000136	61	78

Tablo Ek16. İnek sütü glikoproteinlerine ait tespit edilen N-glikopeptitlerin göreceli bollukları.

	Protein	Modified Peptide	Glycans	Glycosylation Regio	exp1	exp2	avg	sd
1	sp A0JNP2 SG1D_BOVIN	ILLN[1965]CTVTDVK	dHex(1)Hex(3)HexNAc(6)(1850.692600)	Asn87	1.62	1.11	1.36	0.26
2	sp A0JNP2 SG1D_BOVIN	ILLN[1413]CTVTDVK	Hex(3)HexNAc(4)(1298.475900)	Asn87	3.79	4.06	3.93	0.13
4	sp A0JNP2 SG1D_BOVIN	ILLN[1371]CTVTDVK	Hex(4)HexNAc(3)(1257.449400)	Asn87	40.78	39.64	40.21	0.57
7	sp A0JNP2 SG1D_BOVIN	ILLN[1330]CTVTDVK	Hex(5)HexNAc(2)(1216.422800)	Asn87	38.62	42.20	40.41	1.79
9	sp A0JNP2 SG1D_BOVIN	ILLN[1737]CTVTDVK	Hex(5)HexNAc(4)(1622.581600)	Asn87	4.23	0.61	2.42	1.81
10	sp A0JNP2 SG1D_BOVIN	ILLN[1493]CTVTDVK	Hex(6)HexNAc(2)(1378.475600)	Asn87	6.13	7.78	6.96	0.83
12	sp A0JNP2 SG1D_BOVIN	ILLN[1655]CTVTDVK	Hex(7)HexNAc(2)(1540.528500)	Asn87	4.82	4.60	4.71	0.11

14	sp P18892 BT1A1_BOVIN	LSPN[1559]VSAK	dHex(1)Hex(3)HexNAc(4)(1444.533800)	Asn55	29.58	24.09	26.84	2.75
15	sp P18892 BT1A1_BOVIN	LSPN[1762]VSAK	dHex(1)Hex(3)HexNAc(5)(1647.613200)	Asn55	7.52	7.70	7.61	0.09
16	sp P18892 BT1A1_BOVIN	LSPN[1965]VSAK	dHex(1)Hex(3)HexNAc(6)(1850.692600)	Asn55	6.33	6.10	6.22	0.11
17	sp P18892 BT1A1_BOVIN	LSPN[1518]VSAK	dHex(1)Hex(4)HexNAc(3)(1403.507300)	Asn55	3.07	3.61	3.34	0.27
18	sp P18892 BT1A1_BOVIN	LSPN[1721]VSAK	dHex(1)Hex(4)HexNAc(4)(1606.586600)	Asn55	4.46	3.90	4.18	0.28
19	sp P18892 BT1A1_BOVIN	LSPN[1924]VSAK	dHex(1)Hex(4)HexNAc(5)(1809.666000)	Asn55	24.44	17.90	21.17	3.27
22	sp P18892 BT1A1_BOVIN	LSPN[1413]VSAK	Hex(3)HexNAc(4)(1298.475900)	Asn55	13.26	17.86	15.56	2.30
24	sp P18892 BT1A1_BOVIN	LSPN[1371]VSAK	Hex(4)HexNAc(3)(1257.449400)	Asn55	5.31	12.04	8.68	3.37
25	sp P18892 BT1A1_BOVIN	LSPN[1575]VSAK	Hex(4)HexNAc(4)(1460.528700)	Asn55	4.34	3.73	4.03	0.30
26	sp P18892 BT1A1_BOVIN	LSPN[1534]VSAK	Hex(5)HexNAc(3)(1419.502200)	Asn55	1.67	3.06	2.37	0.69
27	sp P24627 TRFL_BOVIN	DQYELLCLN[1655]NSR	Hex(7)HexNAc(2)(1540.528500)	Asn252	68.32	66.86	67.59	0.73
28	sp P24627 TRFL_BOVIN	DQYELLCLN[1817]NSR	Hex(8)HexNAc(2)(1702.581300)	Asn252	14.32	16.92	15.62	1.30
29	sp P24627 TRFL_BOVIN	DQYELLCLN[1979]NSR	Hex(9)HexNAc(2)(1864.634100)	Asn252	17.36	16.23	16.79	0.57
30	sp P26201 CD36_BOVIN	N[1965]CTLYGVLDIGK	dHex(1)Hex(3)HexNAc(6)(1850.692600)	Asn321	5.31	6.39	5.85	0.54
31	sp P26201 CD36_BOVIN	N[1883]CTLYGVLDIGK	dHex(1)Hex(5)HexNAc(4)(1768.639500)	Asn321	32.89	40.00	36.44	3.56
32	sp P26201 CD36_BOVIN	N[1842]CTLYGVLDIGK	dHex(1)Hex(6)HexNAc(3)(1727.612900)	Asn321	21.23	17.38	19.31	1.93
33	sp P26201 CD36_BOVIN	N[1819]CTLYGVLDIGK	Hex(3)HexNAc(6)(1704.634700)	Asn321	6.83	5.51	6.17	0.66
34	sp P26201 CD36_BOVIN	N[1534]CTLYGVLDIGK	Hex(5)HexNAc(3)(1419.502200)	Asn321	22.51	22.30	22.40	0.11
35	sp P26201 CD36_BOVIN	N[1737]CTLYGVLDIGK	Hex(5)HexNAc(4)(1622.581600)	Asn321	2.05	1.61	1.83	0.22
36	sp P26201 CD36_BOVIN	N[1696]CTLYGVLDIGK	Hex(6)HexNAc(3)(1581.555000)	Asn321	9.18	6.82	8.00	1.18

37	sp P26201 CD36_BOVIN	HNYIVPILWLN[1817]ETGTIGDEK	Hex(8)HexNAc(2)(1702.581300)	Asn417	81.27	80.91	81.09	0.18
38	sp P26201 CD36_BOVIN	HNYIVPILWLN[1979]ETGTIGDEK	Hex(9)HexNAc(2)(1864.634100)	Asn417	18.73	19.09	18.91	0.18
39	sp P80025 PERL_BOVIN	IVGYLDEEGVLDQN[1413]R	Hex(3)HexNAc(4)(1298.475900)	Asn212	14.52	14.60	14.56	0.04
40	sp P80025 PERL_BOVIN	IVGYLDEEGVLDQN[1819]R	Hex(3)HexNAc(6)(1704.634700)	Asn212	85.48	85.40	85.44	0.04
41	sp P80025 PERL_BOVIN	KPSPCEFIN[1330]TTAR	Hex(5)HexNAc(2)(1216.422800)	Asn358	6.11	7.28	6.70	0.59
42	sp P80025 PERL_BOVIN	KPSPCEFIN[1493]TTAR	Hex(6)HexNAc(2)(1378.475600)	Asn358	43.57	40.26	41.92	1.65
43	sp P80025 PERL_BOVIN	KPSPCEFIN[1655]TTAR	Hex(7)HexNAc(2)(1540.528500)	Asn358	50.31	52.45	51.38	1.07
44	sp P80195 GLCM1_BOVIN	N[1924]ATLGSEETTEHTPSDAST TEGK	dHex(1)Hex(4)HexNAc(5)(1809.6660 00)	Asn95	53.96	44.90	49.43	4.53
45	sp P80195 GLCM1_BOVIN	N[1883]ATLGSEETTEHTPSDAST TEGK	dHex(1)Hex(5)HexNAc(4)(1768.6395 00)	Asn95	35.97	46.68	41.33	5.35
46	sp P80195 GLCM1_BOVIN	N[2174]ATLGSEETTEHTPSDAST TEGK	dHex(1)Hex(5)HexNAc(4)NeuAc(1)(2 059.734900)	Asn95	10.06	8.43	9.25	0.82
47	sp P81265 PIGR_BOVIN	AN[1575]LTNFPESGTFVVDISHL THK	Hex(4)HexNAc(4)(1460.528700)	Asn83	28.65	19.82	24.24	4.42
48	sp P81265 PIGR_BOVIN	AN[1721]LTNFPESGTFVVDISHL THK	dHex(1)Hex(4)HexNAc(4)(1606.5866 00)	Asn83	26.74	21.68	24.21	2.53
49	sp P81265 PIGR_BOVIN	AN[1737]LTNFPESGTFVVDISHL THK	Hex(5)HexNAc(4)(1622.581600)	Asn83	31.68	42.51	37.09	5.42
50	sp P81265 PIGR_BOVIN	AN[1819]LTNFPESGTFVVDISHL THK	Hex(3)HexNAc(6)(1704.634700)	Asn83	3.31	3.96	3.63	0.32
51	sp P81265 PIGR_BOVIN	AN[1883]LTNFPESGTFVVDISHL THK	dHex(1)Hex(5)HexNAc(4)(1768.6395 00)	Asn83	9.61	12.03	10.82	1.21
52	sp P81265 PIGR_BOVIN	N[1413]VTAWLGEPLK	Hex(3)HexNAc(4)(1298.475900)	Asn468	5.27	8.38	6.82	1.55
53	sp P81265 PIGR_BOVIN	N[1493]VTAWLGEPLK	Hex(6)HexNAc(2)(1378.475600)	Asn468	2.02	1.90	1.96	0.06
54	sp P81265 PIGR_BOVIN	N[1575]VTAWLGEPLK	Hex(4)HexNAc(4)(1460.528700)	Asn468	18.90	23.21	21.05	2.16
55	sp P81265 PIGR_BOVIN	N[1696]VTAWLGEPLK	Hex(6)HexNAc(3)(1581.555000)	Asn468	14.22	10.37	12.29	1.93
56	sp P81265 PIGR_BOVIN	N[1721]VTAWLGEPLK	dHex(1)Hex(4)HexNAc(4)(1606.5866 00)	Asn468	4.15	5.03	4.59	0.44

57	sp P81265 PIGR_BOVIN	N[1778]VTAWLGEPLK	Hex(4)HexNAc(5)(1663.608100)	Asn468	1.70	2.34	2.02	0.32
58	sp P81265 PIGR_BOVIN	N[1809]VTAWLGEPLK	dHex(1)Hex(4)HexNAc(3)NeuAc(1)(1694.602700)	Asn468	0.54	1.02	0.78	0.24
59	sp P81265 PIGR_BOVIN	N[1819]VTAWLGEPLK	Hex(3)HexNAc(6)(1704.634700)	Asn468	45.12	41.18	43.15	1.97
60	sp P81265 PIGR_BOVIN	N[1899]VTAWLGEPLK	Hex(6)HexNAc(4)(1784.634400)	Asn468	4.72	3.51	4.11	0.60
61	sp P81265 PIGR_BOVIN	N[1924]VTAWLGEPLK	dHex(1)Hex(4)HexNAc(5)(1809.666000)	Asn468	3.37	3.07	3.22	0.15
62	sp Q95114 MFGM_BOVIN	IFIGNVN[1493]NSGLK	Hex(6)HexNAc(2)(1378.475600)	Asn227	28.65	26.04	27.35	1.31
63	sp Q95114 MFGM_BOVIN	IFIGNVN[1655]NSGLK	Hex(7)HexNAc(2)(1540.528500)	Asn227	41.43	37.77	39.60	1.83
64	sp Q95114 MFGM_BOVIN	IFIGNVN[1817]NSGLK	Hex(8)HexNAc(2)(1702.581300)	Asn227	3.49	6.55	5.02	1.53
65	sp Q95114 MFGM_BOVIN	IFIGNVN[1979]NSGLK	Hex(9)HexNAc(2)(1864.634100)	Asn227	26.42	29.64	28.03	1.61
66	tr Q3ZCL0 Q3ZCL0_BOVIN	MQWN[1330]TTAAANAQNWANK	Hex(5)HexNAc(2)(1216.422800)	Asn65	60.45	60.98	60.71	0.27
67	tr Q3ZCL0 Q3ZCL0_BOVIN	MQWN[1493]TTAAANAQNWANK	Hex(6)HexNAc(2)(1378.475600)	Asn65	39.55	39.02	39.29	0.27

Tablo Ek17. İnek sütü glikoproteinlerine ait tespit edilen potansiyel O-glikopeptitlerin listesi.

Protein Name	Sequence (unformatted)	Mods (variable)	Glyc ans	PEP 2D	PEP 1D	Log Prob	Score	z	Obs. m/z	Calc m/z	p p m er r.	Obs. MH	Calc MH	Sca n Tim e
>sp P02668 CASK_BOVIN Kappa-casein OS=Bos taurus GN=CSN3 PE=1 SV=1	K.SC[+58.00548]QAQPT{+365.13220}TMAR.H	T7(OGlycan / 365.1322)	1 1 0 0 0 0	6.30 E-13	1.50 E-11	12.2	606.3	2	808. 8428	808. 8426	0. 3 5	1616 .678	1616 .678	33. 957 6
>sp P02663 CASA2_BOVIN Alpha-S2-casein OS=Bos taurus GN=CSN1S2 PE=1 SV=2	R.NAVPITPT{+365.13220}LNR.E	T8(OGlycan / 365.1322)	1 1 0 0 0 0	3.40 E-11	8.30 E-10	10.47	579	2	780. 9101	780. 9094	0. 8 8	1560 .813	1560 .812	54. 017 7
>sp P02663 CASA2_BOVIN Alpha-S2-casein OS=Bos taurus GN=CSN1S2 PE=1 SV=2	R.NAVPIT{+365.13220}PTLNR.E	T6(OGlycan / 365.1322)	1 1 0 0 0 0	3.50 E-10	8.60 E-09	9.45	547	2	780. 9097	780. 9094	0. 4 1	1560 .812	1560 .812	51. 173 7

>sp P02663 CASA2_BOVIN Alpha-S2-casein OS=Bos taurus GN=CSN1S2 PE=1 SV=2	R.NAVPIT{+656.22761}PTL NR.E	T6(OGlycan / 656.2276)	1 1 0 1 0 0	2.20 E- 09	5.40 E- 08	8.66	459.3	2	926. 4582	926. 4571	1. 2 2	1851 .909	1851 .907	60. 083 9
>sp P02668 CASK_BOVIN Kappa-casein OS=Bos taurus GN=CSN3 PE=1 SV=1	K.SC[+58.00548]QAQPT{+3 65.13220}TMAR.H	T7(OGlycan / 365.1322)	1 1 0 0 0 0	1.40 E- 08	3.40 E- 07	7.86	411.7	2	808. 8418	808. 8426	- 0. 9 4	1616 .676	1616 .678	31. 547 4
>sp P02663 CASA2_BOVIN Alpha-S2-casein OS=Bos taurus GN=CSN1S2 PE=1 SV=2	R.NAVPITPT{+656.22761}L NR.E	T8(OGlycan / 656.2276)	1 1 0 1 0 0	3.00 E- 09	7.30 E- 08	8.52	407.4	2	926. 4579	926. 4571	0. 8 1	1851 .909	1851 .907	60. 426 3
>sp P02662 CASA1_BOVIN Alpha-S1-casein OS=Bos taurus GN=CSN1S1 PE=1 SV=2	K.DIGSEST{+1167.41772}E DQAMEDIK.Q	T7(OGlycan / 1167.4177)	2 2 1 1 0 0	1.20 E- 08	2.90 E- 07	7.93	396.9	3	979. 0587	979. 0637	- 5. 1	2935 .162	2935 .177	78. 577 8
>sp P02663 CASA2_BOVIN Alpha-S2-casein OS=Bos taurus GN=CSN1S2 PE=1 SV=2	R.NAVPIT{+365.13220}PTL NR.E	T6(OGlycan / 365.1322)	1 1 0 0 0 0	2.50 E- 09	6.20 E- 08	8.6	383.8	2	780. 9103	780. 9094	1. 1 9	1560 .813	1560 .812	51. 522 6
>sp P02662 CASA1_BOVIN Alpha-S1-casein OS=Bos taurus GN=CSN1S1 PE=1 SV=2	K.DIGSEST{+1167.41772}E DQAMEDIK.Q	T7(OGlycan / 1167.4177)	2 2 1 1 0 0	6.90 E- 08	1.70 E- 06	7.16	379.3	3	979. 0581	979. 0637	- 5. 7 2	2935 .16	2935 .177	79. 602 2
>sp P02662 CASA1_BOVIN Alpha-S1-casein OS=Bos taurus GN=CSN1S1 PE=1 SV=2	K.DIGSEST{+1167.41772}E DQAMEDIK.Q	T7(OGlycan / 1167.4177)	2 2 1 1 0 0	6.90 E- 08	1.70 E- 06	7.16	376.9	3	979. 0587	979. 0637	- 5. 1 6	2935 .162	2935 .177	78. 232 8
>sp P02662 CASA1_BOVIN Alpha-S1-casein OS=Bos taurus GN=CSN1S1 PE=1 SV=2	K.DIGSEST{+1167.41772}E DQAMEDIK.Q	T7(OGlycan / 1167.4177)	2 2 1 1 0 0	6.00 E- 08	1.50 E- 06	7.22	371.9	3	979. 0571	979. 0637	- 6. 7 8	2935 .157	2935 .177	79. 939 4
>sp P02662 CASA1_BOVIN Alpha-S1-casein OS=Bos taurus GN=CSN1S1 PE=1 SV=2	K.DIGSEST{+1167.41772}E DQAMEDIK.Q	T7(OGlycan / 1167.4177)	2 2 1 1 0 0	1.90 E- 07	4.60 E- 06	6.72	361.3	3	979. 0609	979. 0637	- 2. 8 5	2935 .168	2935 .177	77. 896 7
>sp P02663 CASA2_BOVIN Alpha-S2-casein OS=Bos taurus GN=CSN1S2 PE=1 SV=2	R.NAVPIT{+656.22761}PTL NR.E	T6(OGlycan / 656.2276)	1 1 0 1 0 0	1.20 E- 08	2.90 E- 07	7.92	359.1	3	617. 975	617. 9738	1. 8 9	1851 .911	1851 .907	60. 229 7
>sp P02662 CASA1_BOVIN Alpha-S1-casein OS=Bos taurus GN=CSN1S1 PE=1 SV=2	K.DIGSEST{+1167.41772}E DQAMEDIK.Q	T7(OGlycan / 1167.4177)	2 2 1 1 0 0	4.00 E- 07	9.80 E- 06	6.4	350.9	3	979. 0584	979. 0637	- 5. 4 1	2935 .161	2935 .177	79. 261
>sp P02662 CASA1_BOVIN Alpha-S1-casein OS=Bos taurus GN=CSN1S1 PE=1 SV=2	K.DIGSEST{+1167.41772}E DQAMEDIK.Q	T7(OGlycan / 1167.4177)	2 2 1 1 0 0	2.40 E- 07	5.80 E- 06	6.63	344.3	3	979. 0593	979. 0637	- 4. 5 3	2935 .163	2935 .177	77. 561 4
>sp P02662 CASA1_BOVIN Alpha-S1-casein OS=Bos taurus GN=CSN1S1 PE=1 SV=2	K.DIGSEST{+1167.41772}E DQAMEDIK.Q	T7(OGlycan / 1167.4177)	2 2 1 1 0 0	1.60 E- 07	3.90 E- 06	6.8	341.4	3	979. 0587	979. 0637	- 5. 1 6	2935 .162	2935 .177	78. 921 2

>sp P02663 CASA2_BOVIN Alpha-S2-casein OS=Bos taurus GN=CSN1S2 PE=1 SV=2	R.NAVPIT{+656.22761}PTL NR.E	T6(OGlycan / 656.2276)	1 1 0 1 0 0	8.00 E- 09	2.00 E- 07	8.09	329.7	2	926. 4588	926. 4571	1. 8	1851 .91	1851 .907	62. 374 6
>sp P02662 CASA1_BOVIN Alpha-S1-casein OS=Bos taurus GN=CSN1S1 PE=1 SV=2	K.DIGSEST{+1167.41772}E DQAMEDIK.Q	T7(OGlycan / 1167.4177)	2 2 1 1 0 0	4.10 E- 07	9.90 E- 06	6.39	326.1	3	979. 0562	979. 0637	- 7. 6 5	2935 .154	2935 .177	80. 283 5
>Reverse >sp Q95M18 ENPL_BOVIN Endoplasmin OS=Bos taurus GN=HSP90B1 PE=2 SV=1	K.YEDEEVEKS{+146.0579 1}PR.Q	S9(OGlycan / 146.0579)	0 0 1 0 0 0	0.00 45	0.00 45	2.35	317.2	2	763. 8458	763. 8465	- 0. 8 5	1526 .684	1526 .686	87. 882 7
>sp P02662 CASA1_BOVIN Alpha-S1-casein OS=Bos taurus GN=CSN1S1 PE=1 SV=2	K.DIGSEST{+1167.41772}E DQAMEDIK.Q	T7(OGlycan / 1167.4177)	2 2 1 1 0 0	1.20 E- 08	2.90 E- 07	7.92	307	2	1468 .085	1468 .092	- 4. 9	2935 .162	2935 .177	78. 728