

Apéndice B

Tabla S2. Metabolitos diferenciales identificados putativamente de acuerdo con el valor VIP después del tratamiento con el AE LOT-II sobre la formación de *biofilm* de *S. aureus*.

Metabolito	Fórmula química	<i>m/z</i>	VIP
1-Metoxifenantreno	C ₁₅ H ₁₂ O	226.1224	4.076
1-fenil-2-hexanona	C ₁₂ H ₁₆ O	177.1273	3.808
Ácido L-argininosuccínico	C ₁₀ H ₁₈ N ₄ O ₆	291.1294	3.767
Fenilacetaldehído	C ₈ H ₈ O	121.0650	3.600
L-Valina	C ₅ H ₁₁ NO ₂	118.0864	3.549
Estearamida	C ₁₈ H ₃₇ NO	284.2945	3.283
Urato-3-ribonucleósido	C ₁₀ H ₁₂ N ₄ O ₇	301.0793	3.275
Ácido 11-amino-undecanoico	C ₁₁ H ₂₃ NO ₂	202.1800	2.847
Ácido 5-amino-pentanoico	C ₅ H ₁₁ NO ₂	140.0682	2.814
Glicerol	C ₃ H ₈ O ₃	115.0369	2.795
2-(3-fenilpropil) piridina	C ₁₄ H ₁₅ N	198.1276	2.739
Dodecanamida	C ₁₂ H ₂₅ NO	200.2008	2.700
Pipericina	C ₂₂ H ₄₁ NO	336.3257	2.674
Creatina	C ₄ H ₉ N ₃ O ₂	132.0768	2.648
MG(i-18:0/0:0/0:0)	C ₂₁ H ₄₂ O ₄	381.2970	2.410
Ácido fenilacético	C ₈ H ₈ O ₂	154.0862	2.401
D-glucosamina	C ₆ H ₁₃ NO ₅	180.0865	2.391
Armillarina	C ₂₄ H ₃₀ O ₆	415.2110	2.382
Ácido L-glutámico	C ₅ H ₉ NO ₄	170.0422	2.345
Espermidina	C ₇ H ₁₉ N ₃	146.1651	2.321
Ácido fenilglioxílico	C ₈ H ₆ O ₃	151.0389	2.280
Fosfocreatina	C ₄ H ₁₀ N ₃ O ₅ P	194.032	2.267
Linoleamida	C ₁₈ H ₃₃ NO	280.2632	2.242
Isopropilmaleato	C ₇ H ₁₀ O ₄	159.0651	2.225
Ácido 9,10-epoxiesteárico	C ₁₈ H ₃₄ O ₃	321.2398	2.220

L-Serina-O-fosfato	C ₃ H ₈ NO ₆ P	207.9981	2.216
Dihidouracilo	C ₄ H ₆ N ₂ O ₂	132.0768	2.209
N-Butiril-L-homoserina lactona	C ₈ H ₁₃ NO ₃	172.0967	2.181
7-hexadecenal	C ₁₆ H ₃₀ O	239.2367	2.157
MG(16:0/0:0/0:0)	C ₁₉ H ₃₈ O ₄	331.2839	2.125
Ácido 10-oxo-nonadecanoico	C ₁₉ H ₃₆ O ₃	313.2733	2.093
Ácido alfa-linolénico	C ₁₈ H ₃₀ O ₂	279.2315	2.086
Pantotenato	C ₉ H ₁₇ NO ₅	202.1073	1.991
Ácido 5-oxo-heneicosanoico	C ₂₁ H ₄₀ O ₃	341.3046	1.973
Ácido linoleil hidroxámico	C ₁₈ H ₃₃ NO ₂	296.2580	1.959
Ácido 3-hidroxifenilacético	C ₈ H ₈ O ₃	170.0811	1.936
1-Metilpirrolinio	C ₅ H ₁₀ N	107.0706	1.911
Ser Arg Tyr	C ₁₈ H ₂₈ N ₆ O ₆	425.2140	1.907
Pro Lys Asn	C ₁₅ H ₂₇ N ₅ O ₅	358.2078	1.896
Ácido 2,4,12-octadecatrienoico isobutilamida	C ₂₂ H ₃₉ NO	334.3102	1.893
CDP-ribitol	C ₁₄ H ₂₅ N ₃ O ₁₅ P ₂	560.0643	1.879
10-dodecen-1-ol	C ₁₂ H ₂₄ O	202.2164	1.839
Dehidrofitoesfingosina	C ₁₈ H ₃₇ NO ₃	316.2843	1.824
Ácido fosfohidroxipirúvico	C ₃ H ₅ O ₇ P	92.9961	1.816
L-homofenilalanina	C ₁₀ H ₁₃ NO ₂	180.1018	1.780
3-Oxo-3-fenilpropanoato	C ₉ H ₈ O ₃	165.0546	1.770
L-lisina	C ₆ H ₁₄ N ₂ O ₂	129.1023	1.720
Fosfato de N-metiletanolamina	C ₃ H ₁₀ NO ₄ P	156.0421	1.633
Citosina	C ₄ H ₅ N ₃ O	112.0508	1.609
3-Hidroxibenzaldehído	C ₇ H ₆ O ₂	123.0442	1.552
sn-Glicero-3-fosfocolina	C ₈ H ₂₁ NO ₆ P	130.0629	1.519
L-histidina	C ₆ H ₉ N ₃ O ₂	156.0766	1.509
Ácido N-carbamoilglutámico	C ₆ H ₁₀ N ₂ O ₅	171.0400	3.519
Ácido octadecanedioico	C ₁₈ H ₃₄ O ₄	313.2377	3.457
Arg Arg Met	C ₁₇ H ₃₅ N ₉ O ₄ S	496.2240	3.314
Ácido 3-oxohexadecanoico	C ₁₇ H ₃₂ O ₃	329.2326	3.258

Oxaloglutarato	$C_7H_8O_7$	203.0197	3.253
Ácido 12-hidroxiesteárico	$C_{18}H_{36}O_3$	299.2585	2.651
4-fosfopantoato	$C_6H_{13}O_7P$	227.0317	2.130
Ácido 6-fosfogluconico	$C_6H_{13}O_{10}P$	275.0167	2.018
Ácido 10-oxo-11-octadecenoico	$C_{18}H_{32}O_3$	295.2270	1.771
Trp Arg Val	$C_{22}H_{33}N_7O_4$	494.2276	1.550