

Tables of Ions Corresponding to Specific FAME Structures

Table 1. CACI-MS-1 Expected FAME Ions.

FAME	[M+H-32-18]	[M+H-32]	[M+H]	[M+54]
6:0	81	99	131	N/A
8:0	109	127	159	N/A
10:0	137	155	187	N/A
10:1	135	153	185	238
12:0	165	183	215	N/A
12:1	163	181	213	266
13:0	179	197	229	N/A
14:0	193	211	243	N/A
14:1	191	209	241	294
14:2	189	207	239	292
15:0	207	225	257	N/A
16:0	221	239	271	N/A
16:1	219	237	269	322
16:2	217	235	267	320
17:0	235	253	285	N/A
18:0	249	267	299	N/A
18:1	247	265	297	350
18:2	245	263	295	348
18:3	243	261	293	346
18:4	241	259	291	344
19:0	263	281	313	N/A
20:0	277	295	327	N/A
20:1	275	293	325	378
20:2	273	291	323	376
20:3	271	289	321	374
20:4	269	287	319	372
20:5	267	285	317	370
21:0	291	309	341	N/A
22:0	305	323	355	N/A
22:1	303	321	353	406
22:2	301	319	351	404
22:3	299	317	349	402
22:4	297	315	347	400
22:5	295	313	345	398
22:6	293	311	343	396
23:0	319	337	369	N/A
24:0	333	351	383	N/A
24:1	331	349	381	434
24:2	329	347	379	432
24:3	327	345	377	430
24:4	325	343	375	428
24:5	323	341	373	426
24:6	321	339	371	424

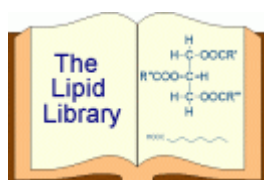
FAME	[M+H-32-18]	[M+H-32]	[M+H]	[M+54]
26:0	361	379	411	N/A
26:1	359	377	409	462
26:2	357	375	407	460
26:3	355	373	405	458
26:4	353	371	403	456
26:5	351	369	401	454
26:6	349	367	399	452
28:0	389	407	439	N/A
28:1	387	405	437	490
28:2	385	403	435	488
28:3	383	401	433	486
28:4	381	399	431	484
28:5	379	397	429	482
28:6	377	395	427	480
28:7	375	393	425	478
28:8	373	391	423	476
30:0	417	435	467	N/A
30:1	415	433	465	518
30:2	413	431	463	516
30:3	411	429	461	514
30:4	409	427	459	512
30:5	407	425	457	510
30:6	405	423	455	508
30:7	403	421	453	506
30:8	401	419	451	504
32:0	445	463	495	N/A
32:1	443	461	493	546
32:2	441	459	491	544
32:3	439	457	489	542
32:4	437	455	487	540
32:5	435	453	485	538
32:6	433	451	483	536
32:7	431	449	481	534
32:8	429	447	479	532
34:0	473	491	523	N/A
34:1	471	489	521	574
34:2	469	487	519	572
34:3	467	485	517	570
34:4	465	483	515	568
34:5	463	481	513	566
34:6	461	479	511	564
34:7	459	477	509	562
34:8	457	475	507	560

Table 2. CACI-MS-2 Diagnostic Ions For Monoenoic and Homoallylic FAME.

FAME	α -diagnostic ion					ω -diagnostic ion				
	n-3	n-5	n-6	n-7	n-9	n-3	n-5	n-6	n-7	n-9
14:1	280	252	238	224	196	124	152	166	180	208
14:2	264	236	222	208	—	150	178	192	206	—
16:1	308	280	266	252	224	124	152	166	180	208
16:2	292	264	250	236	208	150	178	192	206	234
16:3	248	220	206	192	—	148	176	190	204	—
18:1	336	308	294	280	252	124	152	166	180	208
18:2	320	292	278	264	236	150	178	192	206	234
18:3	276	248	234	220	192	148	176	190	204	232
18:4	274	246	232	218	—	188	216	230	244	—
20:1	364	336	322	308	280	124	152	166	180	208
20:2	348	320	306	292	264	150	178	192	206	234
20:3	304	276	262	248	220	148	176	190	204	232
20:4	302	274	260	246	218	188	216	230	244	272
20:5	300	272	258	—	—	228	256	270	—	—
22:1	392	364	350	336	308	124	152	166	180	208
22:2	376	348	334	320	292	150	178	192	206	234
22:3	332	304	290	276	248	148	176	190	204	232
22:4	330	302	288	274	246	188	216	230	244	272
22:5	328	300	286	272	—	228	256	270	284	—
22:6	326	298	—	—	—	268	296	—	—	—
24:1	420	392	378	364	336	124	152	166	180	208
24:2	404	376	362	348	320	150	178	192	206	234
24:3	360	332	318	304	276	148	176	190	204	232
24:4	358	330	316	302	274	188	216	230	244	272
24:5	356	328	314	300	272	228	256	270	284	312
24:6	354	326	312	298	—	268	296	310	324	—
26:1	448	420	406	392	364	124	152	166	180	208
26:2	432	404	390	376	348	150	178	192	206	234
26:3	388	360	346	332	304	148	176	190	204	232
26:4	386	358	344	330	302	188	216	230	244	272
26:5	384	356	342	328	300	228	256	270	284	312
26:6	382	354	340	326	298	268	296	310	324	352
28:1	476	448	434	420	392	124	152	166	180	208
28:2	460	432	418	404	376	150	178	192	206	234
28:3	416	388	374	360	332	148	176	190	204	232
28:4	414	386	372	358	330	188	216	230	244	272
28:5	412	384	370	356	328	228	256	270	284	312
28:6	410	382	368	354	326	268	296	310	324	352
28:7	408	380	366	352	—	308	336	350	364	—
28:8	406	378	—	—	—	348	376	—	—	—
30:1	504	476	462	448	420	124	152	166	180	208
30:2	488	460	446	432	404	150	178	192	206	234
30:3	444	416	402	388	360	148	176	190	204	232
30:4	442	414	400	386	358	188	216	230	244	272
30:5	440	412	398	384	356	228	256	270	284	312
30:6	438	410	396	382	354	268	296	310	324	352
30:7	436	408	394	380	352	308	336	350	364	392
30:8	434	406	392	378	—	348	376	390	404	—

Table 3. CACI-MS-2 Diagnostic Ions for Conjugated Linoleic Acid FAME.

Double bond position	α -diagnostic ion	ω -diagnostic ion
3,5	180	276
4,6	194	262
5,7	208	248
6,8	222	234
7,9	236	220
8,10	250	206
9,11	264	192
10,12	278	178
11,13	292	164
12,14	306	150
13,15	320	136
14,16	334	122



Identification of FAME Double Bond Location by Covalent Adduct Chemical
Ionization (CACI) Tandem Mass Spectrometry

J. Thomas Brenna & Cynthia Tyburczy

Division of Nutritional Sciences, Cornell University, Ithaca, NY 14853, U.S.A.