

Supplementary Materials for

Disturbed gut microbiota and bile homeostasis in *Giardia*-infected mice contributes to metabolic dysregulation and growth impairment

Ambre Riba, Kasra Hassani, Alesia Walker, Niels van Best, Dunja von Zeschwitz, Teresa Anslinger, Nina Sillner, Stefanie Rosenhain, Daniel Eibach, Oumou Maiga-Ascofaré, Ulrike Rolle-Kampezyk, Marijana Basic, Anne Binz, Sabine Mocek, Beate Sodeik, Rudolf Bauerfeind, Antje Mohs, Christian Trautwein, Fabian Kiessling, Jürgen May, Martin Klingenspor, Felix Gremse, Philippe Schmitt-Kopplin, André Bleich, Natalia Torow, Martin von Bergen, Mathias W. Hornef*

*Corresponding author. Email: mhornef@ukaachen.de

Published 14 October 2020, *Sci. Transl. Med.* **12**, eaay7019 (2020)
DOI: 10.1126/scitranslmed.aay7019

The PDF file includes:

- Fig. S1. Neonatal infection leads to persistent infection.
- Fig. S2. Parasite persistence leads to impaired growth and weight gain.
- Fig. S3. Enhanced bile secretion upon *G. lamblia* persistence.
- Fig. S4. Bile-derived LysoPC as a metabolic substrate and persistence-promoting factor for *G. lamblia*.
- Fig. S5. Infection-induced changes of the enteric microbiota.
- Fig. S6. Metabolic consequences of persistent *G. lamblia* infection.
- Fig. S7. *G. lamblia* infection of adult germ-free animals.
- Fig. S8. Potential mechanisms contributing to reduced postnatal body weight gain and linear growth.
- Table S1. Metabolic profiling for acylcarnitines in serum of mice persistently infected with *G. lamblia* versus healthy age-matched control animals.
- Table S2. Metabolic profiling for PCs in total liver tissue of mice persistently infected with *G. lamblia* versus healthy age-matched control animals.
- Table S3. Bile acid standards for metabolically profiling bile acids.

Other Supplementary Material for this manuscript includes the following:

(available at stm.sciencemag.org/cgi/content/full/12/565/eaay7019/DC1)

- Movie S1 (.mp4 format). Representative live imaging of a healthy 4-week-old mouse.
- Movie S2 (.mp4 format). Representative live imaging of a mouse, infected at the age of 3 days with *G. lamblia*, at 4 weeks p.i.
- Data file S1 (Microsoft Excel format). Individual-level data for all figures.

Supplementary Materials

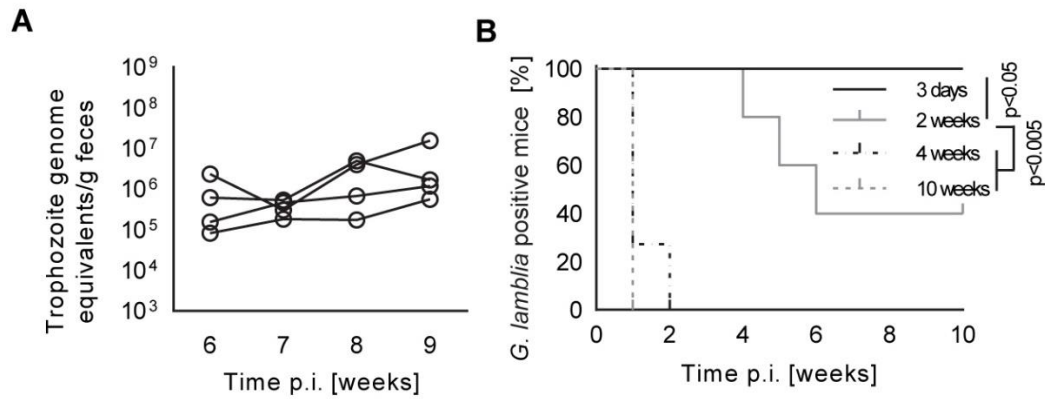


Fig. S1. Neonatal infection leads to persistent infection. (A) Quantitative PCR for *Giardia lamblia* trophozoite genome content equivalents in feces from mice at the indicated time p.i.. The time course of four individual animals (n=4 per group from 2 litters) is shown. **(B)** 3-day-old as well as 2-, 4-, or 10-week-old mice were orally infected with 2×10^5 (for 3-day-old or 2-week-old mice) or 1×10^7 *G. lamblia* trophozoites (for 4- or 10-week-old mice), and fecal *G. lamblia* antigen was monitored weekly (n=5-11 per group from 2-3 litters). Mantel Cox test (B).

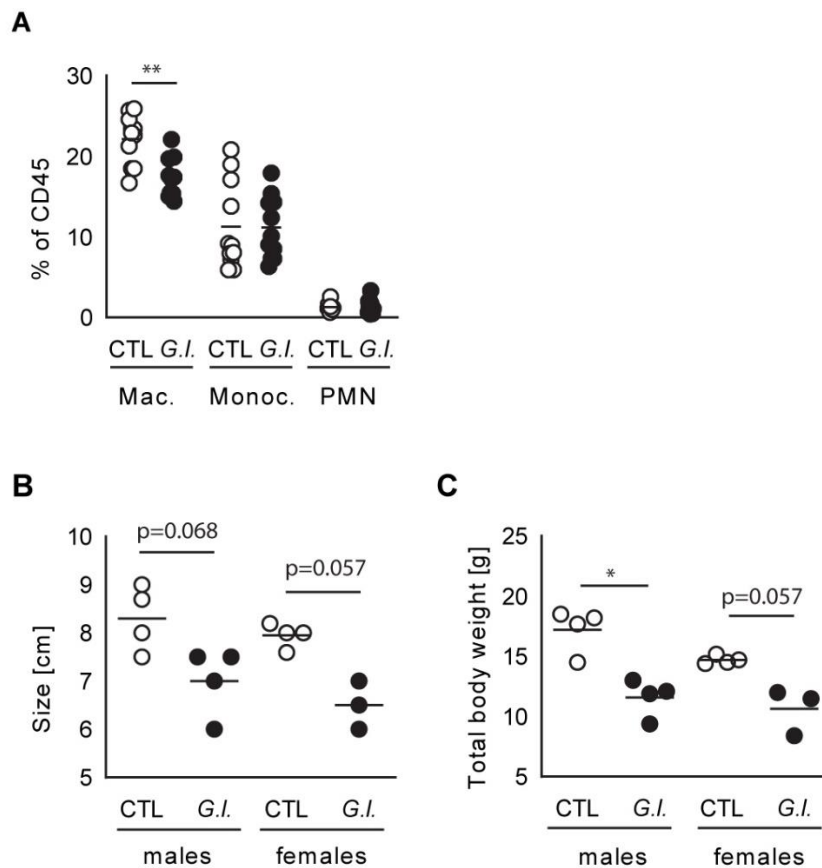


Fig. S2. Parasite persistence leads to impaired growth and weight gain. (A) Flow cytometric analysis of the relative number of *lamina propria* macrophages (mac), monocytes (mono) and polymorphonuclear cells (PMN) among all CD45⁺ immune cells in the small intestine at 4 weeks p.i. in *G. lamblia*-infected mice (G.I.) or healthy age-matched controls (CTL) (n=11 per group from 2-3 litters). Body size **(B)** and total body weight **(C)** of male or female 4-week-old mice infected at the age of 3 days (G.I.) or healthy age- and sex-matched control animals (CTL) (n=3-4 per group from 2 litters). Graphs show the mean±SD; *P<0.05, **P<0.01 by 2-way ANOVA, Bonferroni post-test (A) or Mann-Whitney test (B, C). All data are representative of two to three independent *in vivo* experiments.

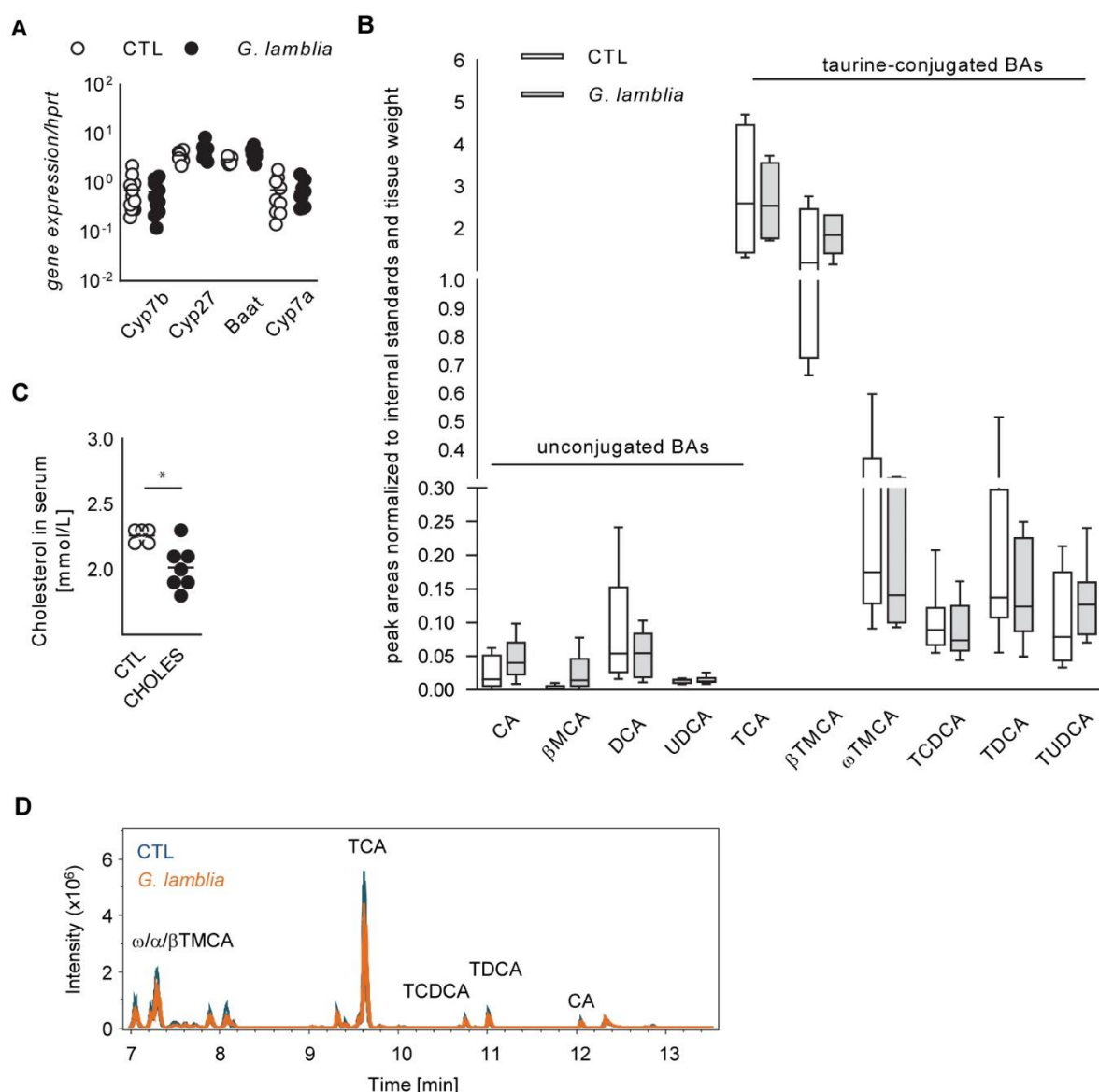


Fig. S3. Enhanced bile secretion upon *G. lamblia* persistence. (A) Quantitative RT-PCR for cholesterol 7 α -hydroxylase (Cyp7a), 25-hydroxycholesterol 7- α -hydroxylase (Cyp7b), sterol 27-hydroxylase (Cyp27) and bile acid-CoA:amino acid N-acyltransferase (Baat) mRNA in total liver tissue of 4-week-old *G. lamblia*-positive mice (*G. lamblia*) infected at the age of 3 days with 2×10^5 trophozoites or healthy age-matched control animals (CTL). Values were normalized to the expression of the housekeeping gene *hprt* (n = 6-8 per group from 2 litters). (B) Global mass spectrometric bile acid composition analysis in liver tissue of adult mice persistently infected with *G. lamblia* or healthy control animals (n=22-25 per group from 3-4 litters). (C) Serum cholesterol in adult mice treated for 1 week with cholestyramin (500 mg/kg body weight daily by oral gavage) or PBS (n=5-7 per group from 2 litters). (D) Comparative mass spectrometric analysis of bile acid concentration in culture medium supplemented with murine bile before (blue, CTL) and after (orange, *G. lamblia*) *in vitro* culture of *G. lamblia* for 48h (one out of three independent experiments is shown). Graphs show the mean $\pm$ SD; *P<0.05, **P<0.01 by Mann-Whitney test (A, C) or 2-way ANOVA, Bonferroni post-test (B). All data are representative of two to three independent *in vivo* experiments.

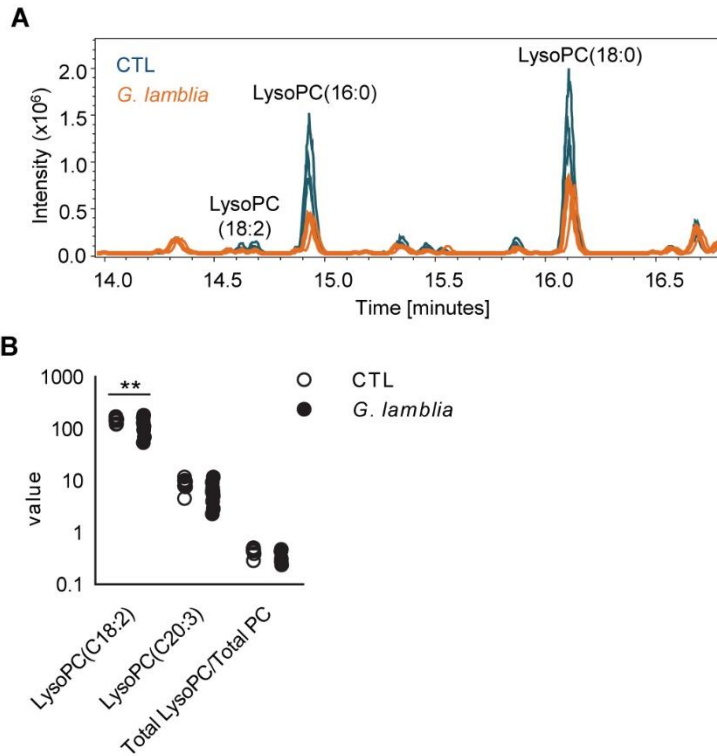


Fig. S4. Bile-derived LysoPC as a metabolic substrate and persistence-promoting factor for *G. lamblia*. **(A)** Comparative mass spectrometric analysis of LysoPCs concentration in culture medium supplemented with murine bile before (blue, CTL) and after (orange, *G. lamblia*) *in vitro* culture of *G. lamblia* for 48h (one out of three independent experiments is shown). **(B)** Quantitative analysis of selected LysoPCs with significantly different concentration in peripheral blood of mice persistently infected with *G. lamblia* 4 weeks p.i. as compared to healthy age-matched control animals (CTL) (n=10-11 per group from 2-3 litters). Graphs show the mean $\pm$ SD; **P<0.01 by 2-way ANOVA, Bonferroni post-test (B). All data are representative of two to three independent *in vivo* experiments.

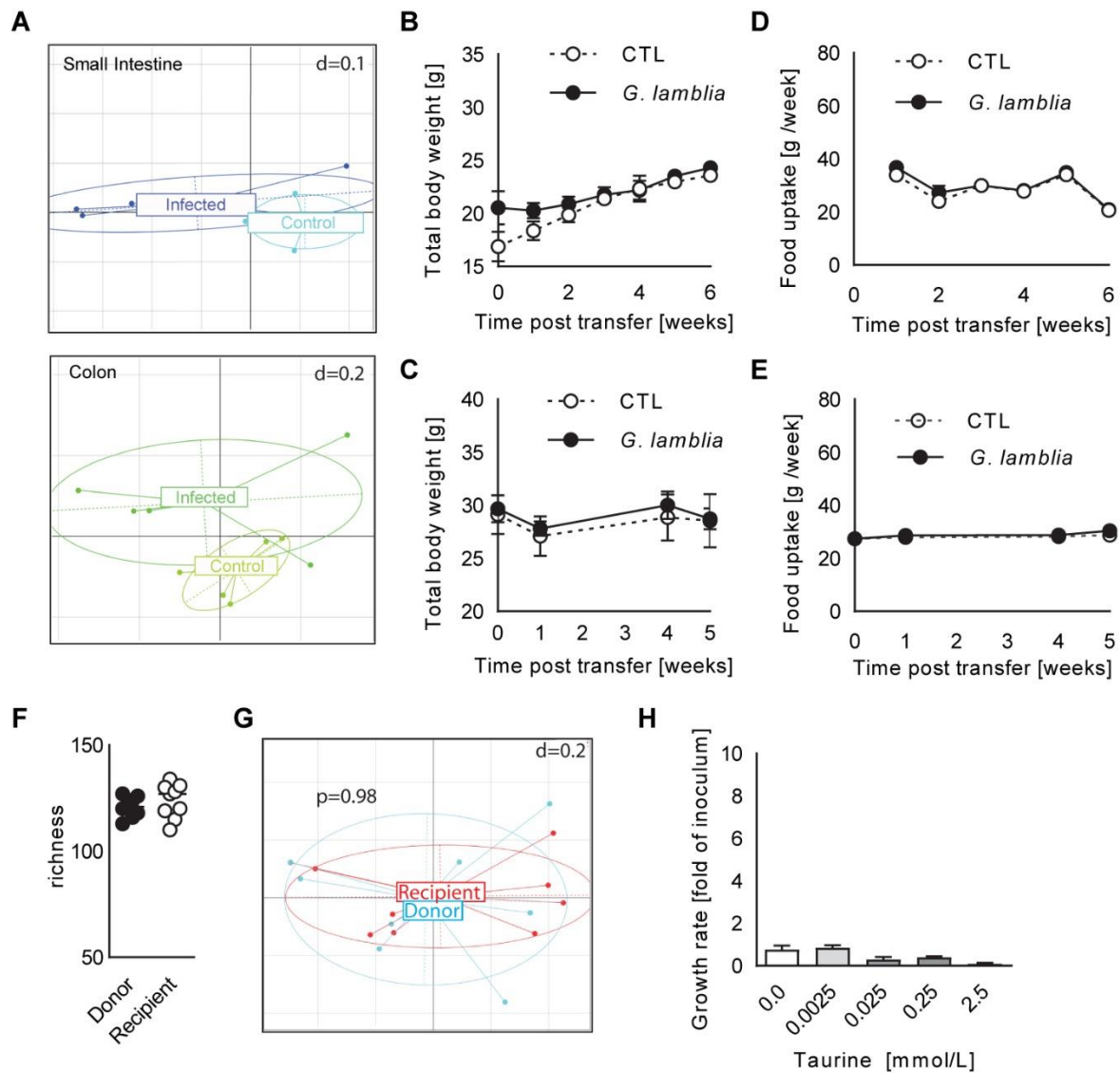


Fig. S5. Infection-induced changes of the enteric microbiota. (A) Principal coordinate analysis (PCoA) of the small intestinal (upper panel) and colonic (lower panel) microbiota composition 1 week p.i. in mice infected as 3-day-old neonates (*G. lamblia*) or age-matched healthy control animals (CTL), as determined by 16S rRNA gene sequencing ($n=5$ per group). (B-E) Total body weight (B and C) and food intake (g/week) (D and E) of adult C57BL/6J germ-free recipient mice after microbiota transplantation from (B, D) 4-week-old persistently *G. lamblia*-infected (*G. lamblia*, $n=4$) or age-matched control animals (CTL, $n=5$) or (C, E) persistently *G. lamblia*-infected animals 3 weeks after spontaneous parasitic clearance or age-matched control animals (CTL, $n=4-5$ per group). (F-G) Richness (F) (number of OTUs) and principal coordinate analysis (PCoA) (G) of the colonic microbiota of *G. lamblia*-infected (*G.I.*) donor mice (Donor) and the colonic microbiota of ex germ-free microbiota recipient mice (Recipient) at 6 weeks after microbiota transfer ($n=9-10$ per group from 2-3 litters). (H) Effect of taurine supplementation in culture medium on *G. lamblia* growth after 48h ($n=4$ per group from 2 litters). Graphs show the mean $\pm$ SD; Permanova (A, G), 2-way ANOVA, Bonferroni post-test (B-E, H) or Mann-Whitney test (F). All data are representative of two to three independent *in vivo* experiments.

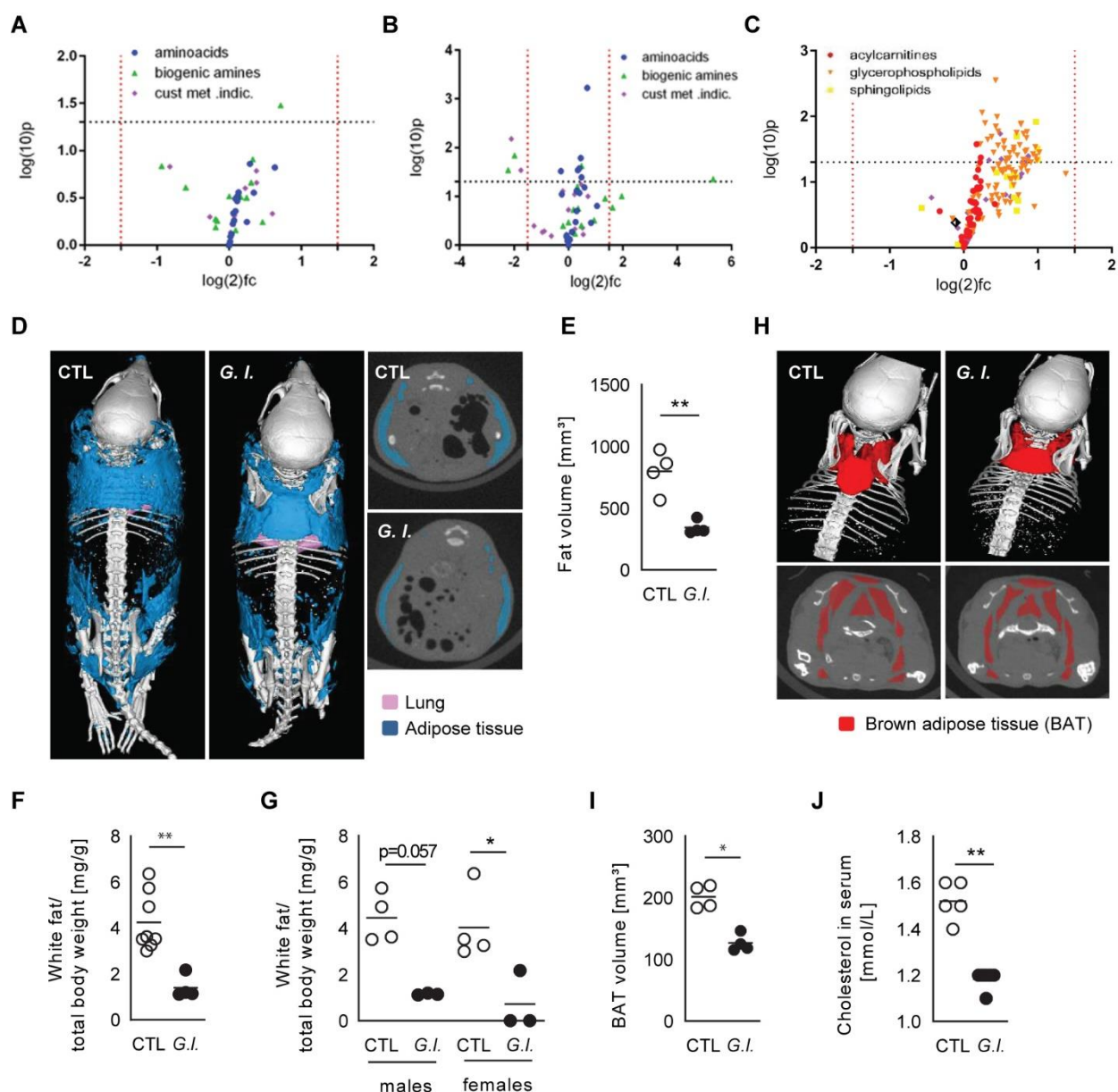


Fig. S6. Metabolic consequences of persistent *G. lamblia* infection. (A–C) Volcano plot (persistently *G. lamblia*-infected/age-matched healthy controls) of amino acids and biogenic amines (A and B) in total liver tissue (A) and serum (B) as well as lipophilic metabolites (C) as measured by mass spectrometry in liver tissue of 4-week-old mice persistently infected with *G. lamblia* and healthy age-matched control animals ($n=10-11$ per group from 2-3 litters). Black diamond, sugars; pink diamond, custom metabolomics indicator. (D) Imaging of total adipose tissue from control (CTL) and *G. lamblia*-infected (*G.I.*) mice at 4 weeks p.i.. Three-dimensional volume renderings of segmented adipose tissue (blue) and lung (pink) upon μ CT imaging (left and middle panel) and 2D cross-sectional μ CT images in transversal planes of the abdomen (upper and lower right panel). (E) Total body adipose tissue volume [mm^3] of *G. lamblia*-infected (*G.I.*) and age-matched control animals (CTL)

(n=4-5 per group from 2 litters). **(F)** Perigonadal white adipose tissue obtained from male and female 4-week-old persistently *G. lamblia*-infected adult mice (*G.I.*) or age-matched control animals (CTL) (n=3-4 per group from 2 litters). **(G)** Perigonadal white adipose tissue harvested from male or female 4-week-old persistently *G. lamblia*-infected adult mice (*G.I.*) or age-matched control animals (CTL) (n=4 per group from 2 litters). **(H)** Comparison of brown adipose tissue (BAT) from *G. lamblia*-infected mice (*G.I.*) at 4 weeks p.i. and age-matched control animals (CTL). Three-dimensional volume renderings of BAT (red) upon μ CT imaging (upper panel), 2D cross-sectional μ CT images in transversal planes of the abdomen of the mice (lower panel). **(I)** Total BAT volume of *G. lamblia*-infected (*G.I.*) and age-matched control animals (CTL) (n=4-5 per group from 2 litters). **(J)** Serum cholesterol concentration of persistently *G. lamblia*-infected mice (*G.I.*) or healthy age-matched control animals (CTL) after fasting 12 h and access to food for 30 min. 3-day-old mice were infected with 2×10^5 *G. lamblia* trophozoites (n=7-9 per group from 2-3 litters). Graphs show the mean $\pm$ SD; *P<0.05, **P<0.01, ***P<0.001 by unpaired, two-tailed t-test (E, I) or Mann-Whitney test (F, G, J). All data are representative of one to two independent *in vivo* experiments.

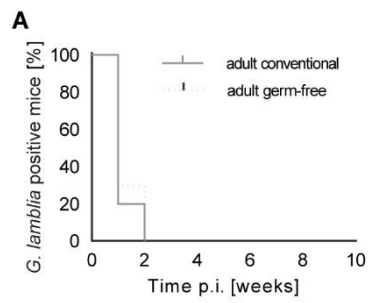


Fig. S7. *G. lamblia* infection of adult germ-free animals. Percentage of adult conventionally raised (conventional) or germ-free C57BL/6J mice with positive fecal *G. lamblia* antigen test after oral infection with 1×10^7 *G. lamblia* trophozoites at the age of 4 weeks (n=5-10, Mantel Cox test).

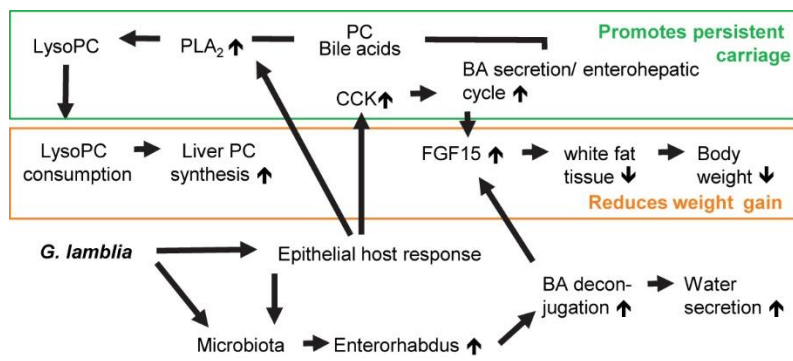


Fig. S8. Potential mechanisms contributing to reduced postnatal body weight gain and linear growth.

Table S1. Metabolic profiling for acylcarnitines in serum of mice persistently infected with *G. lamblia* versus healthy age-matched control animals.
Measurements were done by mass spectrometry (n=10-11 per group).

Acycarnitines µM in serum

	INF1	INF2	INF3	INF4	INF5	INF6	INF7	INF8	INF9	INF10	CTL1	CTL2	CTL3	CTL4	CTL5	CTL6	CTL7	CTL8	CTL9	CTL10	mean INF	mean CTL	log2 (fc)	-log10 (p)
C0	20	17,4	16,4	17,6	26,7	21	85,4	51,4	26,3	36,8	20,2	21,9	27,7	20,4	14,4	31,2	30,6	19,6	22,1	20,5	31,9	22,86	0,48073102	0,63915739
C10	0,18	0,14	0,186	0,129	0,139	0,172	0,177	0,166	0,145	0,139	0,163	0,177	0,149	0,136	0,143	0,162	0,157	0,152	0,157	0,153	0,1573	0,1549	0,02218153	0,12228988
C10:1	0,101	0,064	0,075	0,082	0,085	0,074	0,087	0,079	0,074	0,089	0,078	0,071	0,062	0,065	0,074	0,085	0,092	0,067	0,072	0,071	0,081	0,0737	0,13625729	0,95656958
C10:2	0,132	0,117	0,135	0,251	0,146	0,14	0,113	0,118	0,146	0,148	0,161	0,132	0,136	0,118	0,147	0,149	0,14	0,129	0,122	0,145	0,1446	0,1379	0,0684451	0,206691
C12	0,236	0,155	0,189	0,178	0,189	0,197	0,209	0,21	0,159	0,221	0,187	0,163	0,14	0,137	0,143	0,229	0,229	0,167	0,176	0,188	0,1943	0,1759	0,14353042	0,72938715
C12-DC	0,273	0,223	0,284	0,196	0,227	0,249	0,233	0,236	0,24	0,214	0,277	0,263	0,24	0,223	0,23	0,241	0,253	0,236	0,23	0,254	0,2375	0,2447	-0,04308659	0,32268449
C12:1	0,094	0,058	0,081	0,06	0,078	0,068	0,08	0,082	0,068	0,068	0,064	0,065	0,057	0,045	0,055	0,075	0,079	0,057	0,071	0,065	0,0737	0,0633	0,21945912	1,36394372
C14	0,322	0,198	0,22	0,251	0,201	0,238	0,283	0,296	0,182	0,319	0,199	0,18	0,182	0,144	0,172	0,272	0,271	0,184	0,216	0,222	0,251	0,2042	0,2977045	1,40643609
C14:1	0,132	0,069	0,1	0,089	0,07	0,096	0,09	0,096	0,076	0,105	0,075	0,057	0,067	0,051	0,066	0,111	0,106	0,075	0,091	0,102	0,0923	0,0801	0,20452841	0,72390576
C14:1-OH	0,07	0,043	0,046	0,07	0,054	0,052	0,053	0,054	0,049	0,064	0,05	0,045	0,045	0,038	0,05	0,053	0,058	0,039	0,05	0,047	0,0555	0,0475	0,22456026	1,40255088
C14:2	0,065	0,035	0,039	0,073	0,042	0,046	0,041	0,045	0,034	0,061	0,038	0,03	0,031	0,028	0,033	0,049	0,06	0,038	0,041	0,041	0,0481	0,0389	0,30626674	1,00732577
C14:2-OH	0,046	0,03	0,04	0,068	0,046	0,048	0,035	0,038	0,035	0,048	0,042	0,037	0,035	0,031	0,041	0,046	0,049	0,037	0,041	0,041	0,0434	0,04	0,11769504	0,41816484
C16	0,874	0,394	0,41	0,38	0,399	0,424	0,688	0,635	0,348	0,577	0,321	0,254	0,294	0,194	0,328	0,456	0,511	0,313	0,426	0,441	0,5129	0,3538	0,53574352	1,61147433
C16-OH	0,113	0,104	0,109	0,179	0,136	0,186	0,092	0,095	0,099	0,135	0,163	0,12	0,113	0,091	0,128	0,148	0,138	0,132	0,119	0,131	0,1248	0,1283	-0,03990324	0,10687527
C16:1	0,204	0,107	0,158	0,139	0,102	0,138	0,168	0,162	0,099	0,166	0,092	0,09	0,089	0,066	0,086	0,136	0,147	0,104	0,121	0,139	0,1443	0,107	0,4314605	1,83207402
C16:1-OH	0,068	0,045	0,05	0,116	0,061	0,067	0,06	0,062	0,053	0,081	0,053	0,052	0,049	0,043	0,05	0,069	0,067	0,052	0,054	0,061	0,0663	0,055	0,26957725	0,89509264
C16:2	0,058	0,041	0,044	0,067	0,044	0,05	0,055	0,052	0,041	0,066	0,043	0,036	0,039	0,033	0,043	0,053	0,051	0,041	0,041	0,047	0,0518	0,0427	0,27871603	1,61790715
C16:2-OH	0,036	0,022	0,026	0,033	0,029	0,03	0,032	0,028	0,026	0,032	0,025	0,023	0,023	0,022	0,025	0,029	0,03	0,025	0,027	0,027	0,0294	0,0256	0,19967234	1,59170351
C18	0,207	0,093	0,122	0,099	0,128	0,11	0,163	0,132	0,099	0,15	0,069	0,068	0,074	0,06	0,097	0,112	0,138	0,089	0,105	0,109	0,1303	0,0921	0,50056402	1,90162543
C18:1	0,61	0,26	0,336	0,219	0,302	0,368	0,495	0,384	0,268	0,468	0,182	0,155	0,188	0,101	0,248	0,299	0,336	0,222	0,286	0,34	0,371	0,2357	0,65446743	1,99896798
C18:1-OH	0,07	0,049	0,051	0,056	0,058	0,055	0,062	0,056	0,047	0,058	0,05	0,046	0,046	0,042	0,047	0,059	0,056	0,046	0,051	0,059	0,0562	0,0502	0,16288277	1,32299237
C18:2	0,192	0,093	0,11	0,117	0,127	0,136	0,194	0,178	0,107	0,205	0,089	0,072	0,091	0,061	0,091	0,128	0,126	0,082	0,099	0,123	0,1459	0,0962	0,60087108	2,26359866
C2	17,6	15,4	12	8,31	14,8	14,7	52,1	35,9	18,4	32,4	16,5	13,3	18,2	14,3	9,4	23,5	20,1	14,1	18,6	17,1	22,161	16,51	0,42468286	0,62767204
C3	0,48	0,395	0,324	0,213	0,599	0,339	0,842	0,782	0,357	0,483	0,327	0,506	0,606	0,517	0,276	0,47	0,491	0,392	0,457	0,333	0,4814	0,4375	0,13795312	0,25692108
C3-DC (C4-OH)	0,46	0,639	0,389	0,237	0,462	0,453	1,21	0,799	0,466	0,621	0,227	0,226	0,236	0,253	0,202	0,302	0,266	0,224	0,292	0,312	0,5736	0,254	1,17521653	2,33167104
C3-OH	0,096	0,098	0,107	0,202	0,128	0,123	0,097	0,092	0,102	0,138	0,119	0,102	0,093	0,085	0,109	0,133	0,106	0,106	0,105	0,106	0,1183	0,1064	0,15295192	0,50373872
C3:1	0,048	0,048	0,039	0,033	0,047	0,04	0,046	0,041	0,048	0,042	0,042	0,04	0,049	0,041	0,049	0,042	0,052	0,035	0,05	0,042	0,0432	0,0442	-0,03301506	0,17032576
C4	0,422	0,57	1,05	0,247	0,534	0,913	1,74	1,02	0,669	1,13	0,719	0,679	1,32	0,914	0,453	0,799	1,04	0,723	1,01	0,603	0,8295	0,826	0,0061002	0,00758422
C4:1	0,104	0,094	0,105	0,089	0,096	0,112	0,113	0,099	0,114	0,1	0,109	0,119	0,105	0,087	0,104	0,104	0,115	0,101	0,113	0,11	0,1026	0,1067	-0,05652945	0,5123846
C6 (C4:1-DC)	0,162	0,175	0,187	0,096	0,138	0,162	0,316	0,248	0,189	0,267	0,154	0,132	0,173	0,148	0,127	0,18	0,168	0,139	0,177	0,183	0,194	0,1581	0,29521928	0,89870263
C5	0,202	0,21	0,197	0,158	0,242	0,263	0,457	0,348	0,217	0,321	0,192	0,219	0,272	0,235	0,188	0,264	0,299	0,221	0,249	0,23	0,2615	0,2369	0,14253275	0,36059055
C5-M-DC	0,183	0,162	0,156	0,151	0,127	0,139	0,158	0,154	0,148	0,145	0,159	0,165	0,168	0,139	0,153	0,133	0,145	0,144	0,142	0,148	0,1523	0,1496	0,02580577	0,18439002
C5-OH (C3-DC-M)	0,169	0,156	0,157	0,148	0,157	0,166	0,342	0,261	0,167	0,222	0,171	0,167	0,181	0,181	0,143	0,199	0,194	0,148	0,166	0,161	0,1945	0,1711	0,1849304	0,54735962
C5:1	0,094	0,095	0,108	0,083	0,093	0,094	0,11	0,107	0,09	0,096	0,105	0,109	0,105	0,087	0,088	0,094	0,104	0,086	0,089	0,092	0,097	0,0959	0,01645393	0,10668006
C5:1-DC	0,101	0,103	0,105	0,094	0,094	0,101	0,099	0,09	0,111	0,098	0,105	0,103	0,103	0,103	0,102	0,093	0,094	0,091	0,097	0,099	0,0996	0,099	0,00871722	0,09054218
C5-DC (C6-OH)	0,133	0,123	0,126	0,137	0,122	0,144	0,196	0,146	0,128	0,131	0,125	0,135	0,123	0,114	0,136	0,123	0,139	0,121	0,13	0,128	0,1386	0,1274	0,12156198	0,81607421
C6:1	0,066	0,06	0,062	0,045	0,057	0,057	0,067	0,049	0,064	0,061	0,065	0,064	0,06	0,051	0,064	0,052	0,068	0,051	0,054	0,052	0,0588	0,0581	0,01727799	0,08403984
C7-DC	0,109	0,076	0,089	0,159	0,108	0,11	0,11	0,1	0,093	0,112	0,097	0,09	0,079	0,081	0,09	0,116	0,111	0,084	0,097	0,09	0,1066	0,0935	0,18916917	0,92387189
C8	0,203	0,178	0,199	0,191	0,204	0,202	0,269	0,229	0,21	0,235	0,209	0,19	0,182	0,187	0,192	0,21	0,227	0,187	0,191	0,201	0,212	0,1976	0,10148132	0,83705856
C9	0,093	0,077	0,094	0,158	0,086	0,092	0,084	0,083	0,083	0,09	0,092	0,095	0,08	0,071	0,085	0,099	0,086	0,078	0,084	0,081	0,094	0,0851	0,14350162	0,55888765

Table S2. Metabolic profiling for PCs in total liver tissue of mice persistently infected with *G. lamblia* versus healthy age-matched control animals.
Measurements were done by mass spectrometry (n=10-11 per group).

Glycerophosphocholine $\mu\text{M}/\text{mg}$ liver tissue

	INF1	INF2	INF3	INF4	INF5	INF6	INF7	INF8	INF9	INF10	CTL1	CTL2	CTL3	CTL4	CTL5	CTL6	CTL7	CTL8	CTL9	CTL10	CTL11	mean INF	mean CTL	log2 (fc)	-log10 (p)	
lysoPC a C14:0	0,0085	0,0136	0,0107	0,0109	0,0088	0,0098	0,0096	0,0099	0,0092	0,0100	0,0101	0,0090	0,0093	0,0108	0,0087	0,0091	0,0100	0,0111	0,0102	0,0090	0,0092	0,0101	0,0097	0,0546	0,3181	
lysoPC a C16:0	0,0511	0,0451	0,0872	0,0741	0,0180	0,0817	0,0303	0,0703	0,0459	0,0644	0,0163	0,0252	0,0170	0,0374	0,0471	0,0377	0,0308	0,0465	0,0481	0,0896	0,0243	0,0568	0,0382	0,5729	1,1926	
lysoPC a C16:1	0,0031	0,0045	0,0069	0,0048	0,0035	0,0074	0,0049	0,0073	0,0048	0,0069	0,0046	0,0044	0,0043	0,0060	0,0075	0,0070	0,0053	0,0079	0,0069	0,0073	0,0048	0,0054	0,0060	-0,1530	0,4408	
lysoPC a C17:0	0,0006	0,0007	0,0009	0,0010	0,0003	0,0009	0,0004	0,0008	0,0006	0,0008	0,0004	0,0004	0,0003	0,0006	0,0006	0,0005	0,0003	0,0005	0,0005	0,0009	0,0003	0,0007	0,0005	0,5413	1,6034	
lysoPC a C18:0	0,0214	0,0133	0,0304	0,0300	0,0033	0,0309	0,0085	0,0176	0,0117	0,0162	0,0033	0,0084	0,0044	0,0093	0,0109	0,0090	0,0082	0,0096	0,0117	0,0340	0,0046	0,0183	0,0103	0,8323	1,2414	
lysoPC a C18:1	0,0090	0,0092	0,0203	0,0145	0,0040	0,0206	0,0097	0,0186	0,0118	0,0211	0,0075	0,0100	0,0073	0,0107	0,0171	0,0114	0,0088	0,0131	0,0121	0,0229	0,0070	0,0139	0,0116	0,2529	0,4410	
lysoPC a C18:2	0,0269	0,0303	0,0502	0,0461	0,0257	0,0513	0,0291	0,0693	0,0438	0,0592	0,0209	0,0354	0,0285	0,0549	0,0525	0,0364	0,0352	0,0510	0,0395	0,0495	0,0304	0,0432	0,0395	0,1289	0,2740	
lysoPC a C20:3	0,0020	0,0026	0,0052	0,0035	0,0020	0,0059	0,0038	0,0064	0,0040	0,0063	0,0027	0,0039	0,0033	0,0053	0,0064	0,0039	0,0031	0,0051	0,0041	0,0058	0,0027	0,0042	0,0042	-0,0107	0,0164	
lysoPC a C20:4	0,0162	0,0318	0,0591	0,0459	0,0228	0,0490	0,0256	0,0476	0,0351	0,0434	0,0149	0,0321	0,0261	0,0435	0,0394	0,0236	0,0350	0,0476	0,0398	0,0518	0,0285	0,0377	0,0347	0,1162	0,2230	
lysoPC a C24:0	0,0005	0,0004	0,0005	0,0004	0,0002	0,0005	0,0003	0,0007	0,0006	0,0011	0,0004	0,0003	0,0002	0,0003	0,0006	0,0006	0,0002	0,0003	0,0003	0,0006	0,0002	0,0005	0,0004	0,4442	0,8048	
lysoPC a C26:0	0,0004	0,0003	0,0005	0,0003	0,0001	0,0006	0,0003	0,0008	0,0007	0,0016	0,0005	0,0003	0,0002	0,0003	0,0007	0,0010	0,0002	0,0002	0,0003	0,0006	0,0002	0,0006	0,0004	0,4762	0,4856	
lysoPC a C26:1	0,0003	0,0003	0,0003	0,0003	0,0001	0,0005	0,0002	0,0005	0,0006	0,0012	0,0003	0,0002	0,0001	0,0002	0,0006	0,0005	0,0001	0,0002	0,0003	0,0005	0,0002	0,0004	0,0003	0,5641	0,6901	
lysoPC a C28:0	0,0006	0,0007	0,0006	0,0006	0,0003	0,0006	0,0005	0,0008	0,0007	0,0012	0,0006	0,0005	0,0004	0,0005	0,0007	0,0008	0,0005	0,0006	0,0005	0,0006	0,0005	0,0007	0,0006	0,1984	0,5074	
lysoPC a C28:1	0,0006	0,0008	0,0006	0,0005	0,0003	0,0007	0,0005	0,0008	0,0009	0,0014	0,0005	0,0005	0,0004	0,0004	0,0008	0,0009	0,0004	0,0005	0,0005	0,0007	0,0004	0,0007	0,0005	0,3813	0,7859	
PC aa C24:0	0,0004	0,0003	0,0004	0,0003	0,0001	0,0005	0,0002	0,0005	0,0005	0,0007	0,0003	0,0003	0,0001	0,0002	0,0004	0,0004	0,0002	0,0002	0,0002	0,0005	0,0002	0,0004	0,0003	0,5256	1,1407	
PC aa C26:0	0,0025	0,0030	0,0028	0,0028	0,0022	0,0030	0,0022	0,0035	0,0034	0,0048	0,0028	0,0024	0,0021	0,0023	0,0032	0,0036	0,0023	0,0026	0,0026	0,0029	0,0022	0,0030	0,0026	0,2043	0,7778	
PC aa C28:1	0,0003	0,0003	0,0004	0,0003	0,0002	0,0004	0,0002	0,0006	0,0005	0,0010	0,0005	0,0003	0,0001	0,0002	0,0005	0,0005	0,0002	0,0002	0,0002	0,0004	0,0002	0,0004	0,0003	0,4518	0,6302	
PC aa C30:0	0,0008	0,0009	0,0015	0,0011	0,0003	0,0009	0,0004	0,0009	0,0006	0,0014	0,0004	0,0006	0,0003	0,0006	0,0007	0,0007	0,0005	0,0006	0,0005	0,0011	0,0003	0,0009	0,0006	0,6754	1,5234	
PC aa C30:2	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0000	0,0002	0,0001	0,0002	0,0002	0,0003	0,0001	0,0001	0,0000	0,0000	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0000	0,0002	0,0000	0,0001	0,0001	0,6252	0,6838	
PC aa C32:0	0,0091	0,0066	0,0167	0,0133	0,0009	0,0098	0,0038	0,0086	0,0056	0,0120	0,0014	0,0033	0,0016	0,0050	0,0062	0,0043	0,0034	0,0033	0,0044	0,0177	0,0016	0,0087	0,0048	0,8616	1,1609	
PC aa C32:1	0,0027	0,0015	0,0044	0,0025	0,0003	0,0046	0,0013	0,0038	0,0023	0,0059	0,0009	0,0018	0,0006	0,0012	0,0054	0,0041	0,0012	0,0013	0,0019	0,0045	0,0005	0,0029	0,0021	0,4694	0,5379	
PC aa C32:2	0,0006	0,0005	0,0010	0,0006	0,0001	0,0006	0,0002	0,0006	0,0004	0,0009	0,0002	0,0003	0,0001	0,0002	0,0007	0,0006	0,0003	0,0003	0,0002	0,0007	0,0001	0,0005	0,0003	0,6963	1,1432	
PC aa C32:3	0,0001	0,0001	0,0002	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0002	0,0001	0,0003	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0002	0,0001	0,0001	0,0001	0,0002	0,0001	0,0001	0,0001	0,4271	0,9022	
PC aa C34:1	0,0341	0,0165	0,0576	0,0338	0,0035	0,0548	0,0171	0,0475	0,0279	0,0720	0,0103	0,0208	0,0086	0,0140	0,0525	0,0397	0,0141	0,0165	0,0251	0,0635	0,0062	0,0365	0,0247	0,5655	0,7018	
PC aa C34:2	0,0757	0,0316	0,1050	0,0753	0,0084	0,0898	0,0207	0,0934	0,0505	0,1116	0,0104	0,0323	0,0135	0,0259	0,0745	0,0569	0,0265	0,0273	0,0363	0,0873	0,0090	0,0662	0,0364	0,8651	1,3259	
PC aa C34:3	0,0055	0,0023	0,0060	0,0043	0,0006	0,0052	0,0014	0,0047	0,0027	0,0059	0,0009	0,0020	0,0010	0,0014	0,0048	0,0034	0,0017	0,0015	0,0021	0,0050	0,0007	0,0039	0,0022	0,8028	1,3423	
PC aa C34:4	0,0006	0,0004	0,0007	0,0005	0,0001	0,0005	0,0002	0,0004	0,0003	0,0005	0,0001	0,0002	0,0002	0,0002	0,0004	0,0003	0,0002	0,0003	0,0003	0,0006	0,0002	0,0004	0,0003	0,6087	1,2179	
PC aa C36:0	0,0008	0,0008	0,0011	0,0015	0,0004	0,0009	0,0004	0,0007	0,0006	0,0008	0,0004	0,0005	0,0004	0,0006	0,0006	0,0006	0,0005	0,0006	0,0006	0,0012	0,0004	0,0008	0,0006	0,4446	0,9491	
PC aa C36:1	0,0063	0,0033	0,0104	0,0083	0,0007	0,0087	0,0033	0,0069	0,0034	0,0077	0,0016	0,0038	0,0015	0,0024	0,0055	0,0041	0,0027	0,0027	0,0035	0,0117	0,0011	0,0059	0,0037	0,6744	0,9529	
PC aa C36:2	0,0381	0,0177	0,0485	0,0399	0,0045	0,0538	0,0120	0,0341	0,0205	0,0477	0,0060	0,0229	0,0078	0,0151	0,0296	0,0241	0,0153	0,0154	0,0168	0,0446	0,0043	0,0317	0,0184	0,7873	1,2644	
PC aa C36:3	0,0141	0,0080	0,0218	0,0142	0,0017	0,0212	0,0065	0,0179	0,0101	0,0261	0,0040	0,0095	0,0039	0,0058	0,0178	0,0134	0,0060	0,0065	0,0076	0,0192	0,0021	0,0141	0,0087	0,6972	1,0590	
PC aa C36:4	0,0775	0,0361	0,1060	0,0635	0,0044	0,0777	0,0156	0,0590	0,0366	0,0759	0,0073	0,0248	0,0101	0,0166	0,0512	0,0330	0,0224	0,0203	0,0287	0,0878	0,0070	0,0552	0,0281	0,9751	1,3877	
PC aa C36:5	0,0038	0,0017	0,0044	0,0028	0,0003	0,0044	0,0010	0,0029	0,0019	0,0040	0,0006	0,0016	0,0006	0,0011	0,0034	0,0023	0,0012	0,0010	0,0013	0,0039	0,0004	0,0027	0,0016	0,7762	1,2014	
PC aa C36:6	0,0004	0,0003	0,0005	0,0004	0,0001	0,0003	0,0002	0,0003	0,0002	0,0004	0,0001	0,0002	0,0001	0,0001	0,0003	0,0002	0,0002	0,0002	0,0001	0,0004	0,0001	0,0003	0,0002	0,7715	1,8764	
PC aa C38:0	0,0005	0,0004	0,0007	0,0005	0,0002	0,0005	0,0002	0,0005	0,0004	0,0005	0,0002	0,0003	0,0002	0,0003	0,0003	0,0003	0,0003	0,0003	0,0003	0,0005	0,0002	0,0004	0,0003	0,5458	1,5107	
PC aa C38:1	0,0001	0,0001	0,0003	0,0001	0,0001	0,0003	0,0001	0,0003	0,0002	0,0002	0,0001	0,0001	0,0001	0,0000	0,0002	0,0002	0,0001	0,0002	0,0001	0,0003	0,0000	0,0002	0,0001	0,4435	0,6436	
PC aa C38:3	0,0044	0,0029	0,0077	0,0047	0,0006	0,0075	0,0023	0,0052	0,0034	0,0072	0,0012	0,0037	0,0017	0,0022	0,0055	0,0040	0,0024	0,0026	0,0029	0,0079	0,0008	0,0046	0,0032	0,5329	0,7905	
PC aa C38:4	0,0498	0,0221	0,0678	0,0448	0,0029	0,0569	0,0098	0,0293	0,0205	0,0392	0,0041	0,0192	0,0069	0,0115	0,0250	0,0161	0,0167	0,0135	0,0176	0,0554	0,0047	0,0343	0,0173	0,9879	1,3279	
PC aa C38:5	0,0172	0,0096	0,0220	0,0139	0,0010	0,0180	0,0043	0,0105	0,0082	0,0167	0,0023	0,0065	0,0026	0,0035	0,0113	0,0071	0,0050	0,0048	0,0061	0,0190	0,0016	0,0121	0,0063	0,9370	1,4231	
PC aa C38:6	0,0599	0,0260	0,0775	0,0465	0,0024	0,0558	0,0114	0,0438	0,0278	0,0549	0,0050	0,0178	0,0067	0,0118	0,0382	0,0241	0,0156	0,0137	0,0202	0,0621	0,0048	0,0406	0,0200	1,0222	1,4524	
PC aa C40:1	0,0010	0,0015	0,0012	0,0012	0,0011	0,0009	0,0012	0,0013	0,0012	0,0012	0,0014	0,0011	0,0010	0,0011	0,0011	0,0012	0,0011	0,0014	0,0011	0,0011	0,0012	0,0012	0,0012	0,0012	0,0044	0,0195
PC aa C40:2	0,0003	0,0003	0,0003	0,0003	0,0002	0,0003	0,0002	0,0003	0,0003	0,0003	0,0002	0,0002</														

PC aa C42:5	0,0003	0,0004	0,0004	0,0004	0,0002	0,0003	0,0003	0,0003	0,0003	0,0003	0,0003	0,0003	0,0002	0,0002	0,0003	0,0003	0,0003	0,0003	0,0004	0,0003	0,0003	0,0003	0,1978	1,2152		
PC aa C42:6	0,0007	0,0009	0,0008	0,0008	0,0007	0,0008	0,0006	0,0008	0,0007	0,0008	0,0009	0,0007	0,0006	0,0007	0,0007	0,0007	0,0008	0,0006	0,0007	0,0007	0,0007	0,0007	0,0007	0,0474	0,2630	
PC aa C30:0	0,0004	0,0005	0,0004	0,0004	0,0003	0,0004	0,0003	0,0005	0,0005	0,0006	0,0005	0,0004	0,0004	0,0004	0,0005	0,0003	0,0004	0,0004	0,0004	0,0003	0,0004	0,0004	0,1837	0,8138		
PC ae C30:1	0,0002	0,0002	0,0002	0,0001	0,0001	0,0003	0,0001	0,0004	0,0004	0,0008	0,0002	0,0002	0,0001	0,0001	0,0004	0,0004	0,0001	0,0001	0,0001	0,0002	0,0001	0,0003	0,0002	0,7385	0,7991	
PC ae C30:2	0,0003	0,0003	0,0002	0,0001	0,0003	0,0004	0,0002	0,0003	0,0002	0,0003	0,0003	0,0003	0,0002	0,0002	0,0003	0,0003	0,0002	0,0001	0,0001	0,0002	0,0001	0,0003	0,0002	0,3313	0,9328	
PC ae C32:1	0,0002	0,0002	0,0002	0,0003	0,0001	0,0003	0,0001	0,0003	0,0003	0,0005	0,0001	0,0002	0,0001	0,0001	0,0003	0,0003	0,0001	0,0001	0,0001	0,0003	0,0001	0,0002	0,0002	0,6483	1,0444	
PC ae C32:2	0,0001	0,0002	0,0001	0,0001	0,0001	0,0002	0,0001	0,0002	0,0002	0,0004	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0002	0,0002	0,0001	0,0001	0,0001	0,0002	0,0000	0,0002	0,0001	0,4754	0,7403	
PC ae C34:0	0,0004	0,0004	0,0005	0,0006	0,0001	0,0004	0,0002	0,0004	0,0003	0,0005	0,0002	0,0003	0,0002	0,0002	0,0003	0,0003	0,0002	0,0002	0,0002	0,0006	0,0001	0,0004	0,0003	0,5759	1,3551	
PC ae C34:1	0,0009	0,0008	0,0017	0,0010	0,0002	0,0013	0,0005	0,0012	0,0008	0,0017	0,0004	0,0005	0,0003	0,0005	0,0012	0,0009	0,0004	0,0005	0,0007	0,0015	0,0003	0,0010	0,0006	0,6251	1,0491	
PC ae C34:2	0,0005	0,0003	0,0007	0,0006	0,0001	0,0005	0,0002	0,0006	0,0004	0,0009	0,0002	0,0002	0,0001	0,0002	0,0005	0,0003	0,0002	0,0002	0,0002	0,0006	0,0001	0,0005	0,0003	0,8475	1,4810	
PC ae C34:3	0,0002	0,0002	0,0002	0,0002	0,0001	0,0003	0,0001	0,0002	0,0002	0,0004	0,0002	0,0002	0,0001	0,0001	0,0002	0,0002	0,0001	0,0001	0,0001	0,0002	0,0001	0,0002	0,0002	0,5174	1,1786	
PC ae C36:0	0,0005	0,0007	0,0006	0,0006	0,0004	0,0005	0,0005	0,0006	0,0006	0,0006	0,0005	0,0004	0,0005	0,0005	0,0006	0,0005	0,0005	0,0006	0,0005	0,0007	0,0005	0,0006	0,0005	0,1249	0,7596	
PC ae C36:1	0,0009	0,0010	0,0012	0,0010	0,0002	0,0011	0,0008	0,0014	0,0010	0,0015	0,0010	0,0008	0,0006	0,0005	0,0010	0,0008	0,0005	0,0006	0,0007	0,0013	0,0003	0,0010	0,0007	0,4742	1,2633	
PC ae C36:2	0,0011	0,0087	0,0015	0,0187	0,0002	0,0223	0,0005	0,0190	0,0010	0,0313	0,0055	0,0007	0,0053	0,0006	0,0211	0,0009	0,0076	0,0006	0,0113	0,0014	0,0042	0,0104	0,0054	0,9543	0,6240	
PC ae C36:3	0,0004	0,0003	0,0005	0,0004	0,0001	0,0004	0,0002	0,0004	0,0004	0,0006	0,0001	0,0002	0,0002	0,0002	0,0004	0,0003	0,0002	0,0003	0,0003	0,0005	0,0002	0,0004	0,0003	0,4976	1,1837	
PC ae C36:4	0,0008	0,0005	0,0012	0,0007	0,0001	0,0007	0,0002	0,0006	0,0004	0,0009	0,0002	0,0004	0,0002	0,0003	0,0005	0,0004	0,0003	0,0003	0,0004	0,0008	0,0001	0,0006	0,0003	0,8291	1,4601	
PC ae C36:5	0,0002	0,0002	0,0003	0,0002	0,0001	0,0003	0,0001	0,0003	0,0002	0,0003	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0002	0,0002	0,0001	0,0001	0,0001	0,0003	0,0001	0,0002	0,0001	0,5711	1,3062	
PC ae C38:0	0,0021	0,0013	0,0024	0,0016	0,0005	0,0021	0,0008	0,0016	0,0011	0,0017	0,0007	0,0009	0,0006	0,0007	0,0015	0,0012	0,0010	0,0008	0,0009	0,0022	0,0004	0,0015	0,0010	0,6135	1,3624	
PC ae C38:1	0,0002	0,0002	0,0002	0,0001	0,0000	0,0002	0,0001	0,0002	0,0002	0,0003	0,0001	0,0002	0,0001	0,0001	0,0002	0,0002	0,0001	0,0001	0,0002	0,0001	0,0000	0,0002	0,0001	0,3776	0,7145	
PC ae C38:2	0,0004	0,0003	0,0006	0,0005	0,0001	0,0006	0,0002	0,0005	0,0004	0,0007	0,0001	0,0003	0,0001	0,0002	0,0005	0,0003	0,0002	0,0002	0,0003	0,0004	0,0001	0,0004	0,0003	0,7240	1,4071	
PC ae C38:3	0,0004	0,0004	0,0006	0,0005	0,0001	0,0006	0,0002	0,0006	0,0004	0,0007	0,0002	0,0003	0,0002	0,0002	0,0005	0,0004	0,0002	0,0002	0,0003	0,0005	0,0001	0,0005	0,0003	0,6213	1,4444	
PC ae C38:4	0,0014	0,0009	0,0018	0,0014	0,0002	0,0014	0,0004	0,0012	0,0009	0,0015	0,0004	0,0008	0,0004	0,0005	0,0010	0,0006	0,0005	0,0005	0,0006	0,0013	0,0002	0,0011	0,0006	0,8536	1,7612	
PC ae C38:5	0,0008	0,0006	0,0014	0,0008	0,0002	0,0008	0,0003	0,0007	0,0005	0,0008	0,0002	0,0004	0,0003	0,0004	0,0006	0,0004	0,0004	0,0004	0,0005	0,0011	0,0003	0,0007	0,0004	0,6478	1,1818	
PC ae C38:6	0,0005	0,0004	0,0007	0,0005	0,0001	0,0005	0,0002	0,0005	0,0003	0,0006	0,0002	0,0002	0,0001	0,0002	0,0003	0,0003	0,0002	0,0002	0,0002	0,0005	0,0001	0,0004	0,0003	0,7765	1,8887	
PC ae C40:1	0,0042	0,0023	0,0044	0,0038	0,0007	0,0035	0,0011	0,0028	0,0025	0,0033	0,0008	0,0014	0,0009	0,0013	0,0025	0,0018	0,0015	0,0015	0,0016	0,0037	0,0009	0,0029	0,0016	0,8078	1,7375	
PC ae C40:2	0,0004	0,0004	0,0004	0,0005	0,0002	0,0004	0,0002	0,0004	0,0003	0,0004	0,0002	0,0003	0,0002	0,0002	0,0003	0,0004	0,0003	0,0003	0,0002	0,0003	0,0004	0,0004	0,0003	0,4639	1,5561	
PC ae C40:3	0,0003	0,0003	0,0004	0,0004	0,0001	0,0004	0,0001	0,0003	0,0003	0,0004	0,0002	0,0002	0,0002	0,0002	0,0003	0,0003	0,0002	0,0002	0,0002	0,0004	0,0002	0,0003	0,0002	0,4614	1,2696	
PC ae C40:4	0,0010	0,0013	0,0009	0,0008	0,0008	0,0012	0,0006	0,0008	0,0008	0,0009	0,0008	0,0009	0,0007	0,0006	0,0009	0,0007	0,0009	0,0005	0,0006	0,0007	0,0003	0,0009	0,0007	0,3775	1,6880	
PC ae C40:5	0,0005	0,0004	0,0006	0,0004	0,0001	0,0006	0,0002	0,0004	0,0003	0,0006	0,0002	0,0002	0,0001	0,0002	0,0005	0,0003	0,0002	0,0002	0,0003	0,0005	0,0001	0,0004	0,0003	0,6755	1,4770	
PC ae C40:6	0,0008	0,0006	0,0010	0,0010	0,0002	0,0008	0,0003	0,0007	0,0006	0,0009	0,0003	0,0004	0,0003	0,0004	0,0007	0,0004	0,0003	0,0004	0,0004	0,0010	0,0003	0,0007	0,0004	0,7148	1,7491	
PC ae C42:0	0,0025	0,0035	0,0029	0,0032	0,0026	0,0029	0,0025	0,0029	0,0029	0,0028	0,0032	0,0026	0,0026	0,0026	0,0025	0,0027	0,0029	0,0030	0,0028	0,0027	0,0026	0,0029	0,0027	0,0653	0,5366	
PC ae C42:1	0,0007	0,0007	0,0008	0,0006	0,0003	0,0007	0,0004	0,0007	0,0007	0,0009	0,0004	0,0005	0,0003	0,0004	0,0006	0,0005	0,0004	0,0005	0,0005	0,0007	0,0003	0,0006	0,0005	0,4663	1,7694	
PC ae C42:2	0,0005	0,0004	0,0006	0,0005	0,0002	0,0005	0,0003	0,0005	0,0004	0,0007	0,0003	0,0003	0,0002	0,0002	0,0004	0,0004	0,0003	0,0003	0,0003	0,0005	0,0002	0,0005	0,0003	0,5488	1,6234	
PC ae C42:3	0,0015	0,0007	0,0016	0,0014	0,0002	0,0013	0,0003	0,0010	0,0009	0,0011	0,0003	0,0004	0,0003	0,0004	0,0010	0,0006	0,0005	0,0005	0,0006	0,0013	0,0003	0,0010	0,0006	0,8479	1,6708	
PC ae C42:4	0,0000	0,0000	0,0001	0,0001	0,0000	0,0001	0,0000	0,0001	0,0001	0,0001	0,0000	0,0000	0,0000	0,0001	0,0001	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0001	0,0000	0,0001	0,0000	1,3784	1,1249	
PC ae C42:5	0,0015	0,0024	0,0018	0,0019	0,0013	0,0017	0,0017	0,0019	0,0018	0,0016	0,0021	0,0018	0,0018	0,0015	0,0015	0,0015	0,0017	0,0018	0,0016	0,0015	0,0014	0,0018	0,0016	0,0998	0,5436	
PC ae C44:3	0,0003	0,0004	0,0004	0,0003	0,0001	0,0004	0,0002	0,0003	0,0003	0,0004	0,0002	0,0002	0,0002	0,0002	0,0003	0,0003	0,0002	0,0002	0,0002	0,0003	0,0002	0,0003	0,0002	0,4329	1,8442	
PC ae C44:4	0,0006	0,0005	0,0006	0,0006	0,0003	0,0005	0,0004	0,0006	0,0005	0,0006	0,0004	0,0004	0,0003	0,0004	0,0005	0,0004	0,0004	0,0005	0,0004	0,0006	0,0004	0,0005	0,0004	0,3239	1,6471	
PC ae C44:5	0,0007	0,0007	0,0008	0,0008	0,0004	0,0007	0,0005	0,0007	0,0006	0,0006	0,0005	0,0004	0,0004	0,0005	0,0006	0,0004	0,0005	0,0005	0,0004	0,0006	0,0004	0,0006	0,0005	0,4304	2,5477	
PC ae C44:6	0,0003	0,0003	0,0003	0,0003	0,0002	0,0003	0,0002	0,0003	0,0003	0,0003	0,0003	0,0003	0,0002	0,0002	0,0003	0,0003	0,0003	0,0003	0,0002	0,0003	0,0002	0,0003	0,0003	0,0003	0,1398	0,8107

Table S3. Bile acid standards for metabolically profiling bile acids. Bile acid standards for metabolically profiling bile acids in total small intestinal tissue (Fig. 6f), culture medium (Fig. 4j and 5a-c, Fig. S4e and S5a) and total liver tissue (Fig. S4c).

No.	No.	Name	Abbreviation	MZ_GD	RT_GD	Detected in biosamples	Supplier	Product number	CAS Number	HMDB ID
1	1	ω-Tauromuricholic acid	ωTMCA	514,28	6,9	yes	Steraloids	C1889-000		
2	2	α-Tauromuricholic acid	αTMCA	514,28	7,1		Steraloids	C1893-000		
3	3	β-Tauromuricholic acid	βTMCA	514,28	7,15	yes	Steraloids	C1899-000		HMDB0000932
5	4	Tauroursodeoxycholic acid	TUDCA	498,28	9,1	yes	Calbiochem	580549-1GM	14605-22-2	HMDB0000874
6	5	Glycohyocholic acid	GHCA	464,3	9,1		Steraloids	C1860-000		
8	6	Taurocholic acid	TCA	514,28	9,46	yes	Steraloids	C1965-000	81-24-3	HMDB0000036
9	7	Glycochenodeoxycholic acid	GCDCA	448,3	11		Sigma	G0759-100MG	16564-43-5	HMDB0006898
10	8	Glycohyodeoxycholic acid	GHDCa	448,3	9,7		Santa Cruz	sc-396740	13042-33-6	
12	9	Glycocholic acid	GCA	464,3	9,8		Steraloids	C1925-000	475-31-0	HMDB0000138
15	10	Taurochenodeoxycholic acid	TCDCa	498,28	10,62	yes	Sigma	T6260-100MG	6009-98-9	HMDB0000951
16	11	ω-Muricholic acid	ωMCA	407,28	10,6	yes	Steraloids	C1888-000		HMDB0000364
17	12	α-Muricholic acid	αMCA	407,28	10,8	yes	Steraloids	C1890-000	2393-58-0	HMDB0000506
18	13	Taurodeoxycholic acid	TDCA	498,28	10,9	yes	Steraloids	C1160-000		HMDB0000896
20	14	β-Muricholic acid	βMCA	407,28	10,9	yes	Steraloids	C1895-000	2393-59-1	HMDB0000415
21	15	Glycoursodeoxycholic acid	GUDCA	448,3	9,66		Sigma	06863-1G	64480-66-6	HMDB0000708
22	16	Glycodeoxycholic acid	GDCA	448,3	11,3		Calbiochem	361311-5GM	16564-43-5	HMDB0000631
26	17	Tauroolithocholic acid	TLCA	482,29	11,9		Sigma	T7515-1G	6042-32-6	HMDB0000722
28	18	Cholic acid	CA	407,28	11,9	yes	Sigma	C1129-25G	81-25-4	HMDB0000619
29	19	Ursodeoxycholic acid	UDCA	391,28	11,9	yes	Sigma	U5127-1G	128-13-2	HMDB0000946
30	20	Hyodeoxycholic acid	HDCA	391,28	12,1		Sigma	H3878-5G	83-49-8	HMDB0000733
31	21	6-oxoallothocholic acid	6-oxo-alloLCA	389,26	12,4		Steraloids	C0720-000	10573-17-8	
33	22	Glycolithocholic acid	GLCA	432,31	12,5		Santa Cruz	sc-396741	24404-83-9	HMDB0000698
34	23	7-oxolithocholic acid	7-oxoLCA	389,26	12,5		Steraloids	C1600-000	4651-67-6	HMDB0000467
35	24	12-oxolithocholic acid	12-oxoLCA	389,26	12,7		Steraloids	C1650-000	5130-29-0	HMDB0000328
36	25	Apocholeic acid	apoCA	389,26	12,9		Steraloids	C2500-000	641-81-6	
37	26	3-dehydrochenodeoxycholic acid	3-dehydroCDCA	389,26	13,4		Steraloids	C1706-000		HMDB0000503
38	27	Chenodeoxycholic acid	CDCA	391,28	13,4	yes	Sigma	C9377-100MG	474-25-9	HMDB0000518
39	28	Deoxycholic acid	DCA	391,28	13,6	yes	Sigma	D2510-10G	83-44-3	HMDB0000626
40	29	Alloolithocholic acid	alloLCA	375,29	14		Steraloids	C0700-000	2276-93-9	HMDB0000381
41	30	Isolithocholic acid	isoLCA	375,29	14,3		Steraloids	C1475-000	1534-35-6	HMDB0000717
42	31	7,12α-dihydroxy-5β-cholanic acid	7,12α-dihydroxy-5β-cholanic acid	391,28	14,6		Steraloids	C1170-000	566-17-6	HMDB0002536
43	32	3α-hydroxy-11,(5β)-cholenic acid	Lithochol-11-enoic acid	373,27	14,6		Steraloids	C2700-000	1053-37-8	
44	33	Lithocholic acid	LCA	375,29	15,2		Sigma	L6250-10G	434-13-9	HMDB0000761
45	34	Dehydrolithocholic acid	dehydroLCA	373,27	15,2		Steraloids	C1750-000	1553-56-6	
46	35	d5-Taurocholic acid	d5-TCA	519,31	9,4		Toronto research chemicals	NC0341860		
47	36	d4-Glycodeoxycholic acid	d4-GDCA	452,33	11,3		Sigma	739707-SPEC		
48	37	d4-Cholic acid	d4-CA	411,3	11,9		Sigma	D-2452		
49	38	d4-Deoxycholic acid	d4-DCA	395,3	13,6		CDN Isotopes	D-2941	112076-61-6	