

MATERIAL SUPLEMENTAR

Técnicas avançadas para a diferenciação de isômeros por espectrometria de massas

Tatiana C. Penna^{} e Thiago C. Correra^{*,}

Departamento de Química Fundamental, Instituto de Química, Universidade de São Paulo, 05508-000 São Paulo – SP, Brasil

*e-mail: tcorrera@iq.usp.br

Tabela 1S. Os 50 artigos mais citados entre 2007 e 2017 com “IRMPD spectroscopy” como palavra chave como apresentado em Rodrigues-Oliveira, A. F. et al. ACS Omega 3, 9075–9085 (2018)

DOI	Sistema	Faixa de frequência analisada
10.1021/ja711343q	[Arg+Sr] ²⁺ [Arg+Ba] ²⁺ [Gln+Ba] ²⁺ [Pro+Ba] ²⁺ [Ser+Ba] ²⁺ [Val+Ba] ²⁺	Fingerprint
10.1021/jp710885a	[Ser+M] ⁺ M=Li, Na, K, Rb, Cs	Fingerprint
10.1021/jp074935e	[((C ₆ H ₅) ₃ P) ₂ (C ₃ H ₅)Pd] ⁺	Fingerprint Alta Frequência
10.1021/ja807615v	[Trp-H] ⁻ [Phe-H] ⁻ [Tyr-H] ⁻ [Cys-H] ⁻ [Ser-H] ⁻ [Asp-H] ⁻ [Glu-H] ⁻	Fingerprint
10.1021/jp711237g	[Thr+M] ⁺ M=Li, Na, K, Rb, Cs	Fingerprint
10.1002/cphc.200700700	[PheAla+Na] ⁺ [AlaPhe+Na] ⁺ [PheAla+K] ⁺ [AlaPhe+K] ⁺	Fingerprint
10.1021/jp071902q	[Lys+M] ⁺ M=Li, Na, K, H [Lys(Me)+M] ⁺	Fingerprint
10.1039/B618094A	Dialanina AlaninaHistidina beta-AlaninaHistidina cyclo -AlaninaHistidina GlyGlyGly Arginina-Glycina-ÁcidoAspartico	Fingerprint
10.1021/ja8067929	ciclo AG B2 ⁺ ion do AGG G=glicina, A= alanina	Fingerprint
10.1021/ja073868z	[pTyr+H] ⁺ [pThr+H] ⁺ [pSer+H] ⁺ p=phosphorilada	Fingerprint
10.1021/ja0734492	[GlyGlyGly+H] ⁺ [AlaAlaAla+H] ⁺	Fingerprint

10.1016/j.jasms.2008.10.012	b2frag [AlaAlaAla+H] ⁺ [cicloAlaAlaAla+H] ⁺	Fingerprint
10.1088/0004-637X/706/1/L66	[PAH+H] ⁺ Polycyclic aromatic hydrocarbon = hidrocarbonetos policíclicos aromáticos	Fingerprint
10.1021/ja0662321	[GlyMe+H] ⁺ [AlaMe+H] ⁺ [ValMe+H] ⁺ [LeuMe+H] ⁺	Fingerprint
10.1021/ja200849g	Peptídeos "I e II" DiGly	Fingerprint Alta Frequência
10.1021/ja808177z	GlyArg.(H ou M) ⁺ M=Li, Na, Cs ArgGly. (H ou M) ⁺ M=Li, Na, K, Cs	Fingerprint
10.1039/B803492C	[V _m O _n] ⁻ (m,n)=(2,6)(2,7)(3,8)(4,10)(5,13)(6,15)(7,18)(8,20)	Fingerprint
10.1021/ja068715a	[Gly ₂ +H] ⁺ [Pro ₂ +H] ⁺	Fingerprint
10.1021/ja101556g	Fragmentos a _n de peptídeos: GGG,GGGG,GGGGG,AAAAA G=glicina, A= alanina	Fingerprint
10.1021/ja901870d	[GlyArg+H] ⁺ [ValArg+H] ⁺ [ProArg+H] ⁺ [LysArg+H] ⁺ [HisArg+H] ⁺ [(HisArg+2H)] ²⁺ [ArgArg+H] ⁺ [(ArgArg+2H)] ²⁺	Fingerprint
10.1021/jp800069n	[Ala _n +H] ⁺ n=3,4,5,7	high freq
10.1016/j.ijms.2007.10.004	[GG+Na] ⁺ [AA+Na] ⁺ [GGG+Na] ⁺ [AAA+Na] ⁺ G=glicina, A= alanina	Fingerprint
10.1021/jp9008064	Asn+M M=H ⁺ ,Li ⁺ ,Na ⁺ ,K ⁺ ,Rb ⁺ ,Cs ⁺ , Ba ²⁺	Fingerprint

10.1021/ja108341t	M(H ₂ O) ₃₅₋₃₇ M=La ³⁺ ,Co ²⁺ ,Li ⁺ ,Cs ⁺ ,TBA ⁺ M=Tm ³⁺ ,La ³⁺ ,Mg ²⁺ ,Co ²⁺ ,Ca ²⁺ ,Ba ²⁺ ,H ⁺ ,Li ⁺ ,Na ⁺ , Cs ⁺ ,TMA ⁺ ,TBA ⁺ ,OH ⁻ ,HCO ₃ ⁻ ,Cl ⁻ ,I ⁻	Alta Frequência
10.1021/jp905060n	Ala ₂ +M M=Ba ²⁺ ,Sr ²⁺ ,Ca ²⁺ ,K ⁺ [Ala ₃ +Ba] ²⁺ [PheAla+Ba] ²⁺ [AlaPhe+Ba] ²⁺	Fingerprint
10.1002/cphc.200800543	[Gly+H] ⁺ [Pro+H] ⁺ [Ala+H] ⁺ [Phe+H] ⁺ [Lys+H] ⁺ [Ser+H] ⁺	Fingerprint
10.1021/ct900057s	[Ala ₂ +H] ⁺ [Ala ₃ +H] ⁺	Fingerprint Alta Frequência
10.1021/jp0736903	[Gly ₂ +H] ⁺ [Ala ₂ +H] ⁺ [Val ₂ +H] ⁺ [AlaGly+H] ⁺	Fingerprint
10.1021/jp903064w	[His+Ba] ²⁺ [His+Ca] ²⁺	Fingerprint
10.1021/ja077321w	quadruplex seq. DNA	Fingerprint
10.1021/ja109045j	[PhePhe+M] ⁺ M=Li,Na,H	Fingerprint
10.1021/jp909366a	(La.Ala _n +H) ²⁺ (Ho.Ala ₅ +H) ²⁺ (Eu.Leu-enk+H) ²⁺ (La.Leu-enk+H) ²⁺	Fingerprint
10.1021/jp811468q	[(Gly) _n +H] ⁺ n=1 a 5	Fingerprint
10.1021/jp803121w	[Gl+.M] ⁺ M=Li, Na,K,Cs	Fingerprint
10.1021/ja304929h	[PABA(H ₂ O) ₁₋₆ +H] ⁺ PABAOMeH ⁺ anilínio(H ₂ O) ₃ PPDAH.(H ₂ O) ₃	Alta Frequência
10.1021/jp809993k	(Thy) _n -Li+. (H ₂ O) _m (Ura) _n -Li+. (H ₂ O) _m n=1,2;m=1,2	Alta Frequência
10.1039/b700805h	[APE+H] ⁺ APE=2-amino-1-feniletanol [Lys+H] ⁺ [PhO.+Lys+H] ⁺ [AlaAla+H] ⁺ [PhO.AlaAla+H] ⁺	Alta Frequência

10.1039/c003576a	[Cys] ^{·+} Cation Radical	Fingerprint Alta Frequência
10.1021/jp8087176	(Trp)-M ²⁺ M=Ca, Sr, Ba (Trp) ₂ -M ²⁺ M=Mn, Co, Ni, Zn, Cd, Ba CdClTrp ⁺	Fingerprint
10.1039/c0cp02133d	[Dopamina+H] ⁺	Fingerprint
10.1016/j.jasms.2010.01.021	[UO ₂ (OAc) ₃] ⁻ [UO ₂ (OBz) ₃] ⁻	Fingerprint
10.1021/ja200219q	PhePhe+M M = Ba ²⁺ , Ca ²⁺ , Li ⁺ , Na ⁺ , K ⁺ , Cs ⁺ , Ag ⁺	Fingerprint
10.1016/j.ijms.2010.04.010	N-Metil-Prolina.M N-Metil-Alanina.M M = Li ⁺ , Na ⁺ , K ⁺ , Cs ⁺ , Rb ⁺	Fingerprint
10.1039/b919039b	Metionina.M M = Li ⁺ , Na ⁺ , K ⁺ , Cs ⁺ , Rb ⁺	Fingerprint
10.1021/jp805514b	[GlyGly+H] ⁺ [GlyGly+Na] ⁺	Alta Frequência
10.1039/b716666d	[PheGlyGly+H] ⁺ [GlyGlyPhe+H] ⁺	Alta Frequência
10.1039/c1cp20987f	(2-naftil-1-etanol; cis-1-amino-indan-ol) Cinchona	Alta Frequência
10.1039/b715337f	[UO ₂ (NO ₃) ₃] ⁻ [Eu(NO ₃) ₄] ⁻	Fingerprint
10.1002/anie.200804101	His ^{·+} cation radical	Fingerprint
10.1016/j.jasms.2010.01.029	[GGGGGGGG+Na] ⁺ G=glicina	Fingerprint Alta Frequência